Известия НАН Армении, Физика, т.36, №5, с.241-247 (2001)

УДК 539.2

ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ЭЛЕКТРОНА, ДВИЖУЩЕГОСЯ В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Д.М. СЕДРАКЯН[1], А.Ж. ХАЧАТРЯН[2]

[1]Ереванский государственный университет

[2]Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 3 апреля 2001 г.)

Предложен метод для определения волновой функции электрона, движущегося в поле одномерного потенциала произвольного вида.

1. Введение

Как известно, задача определения волновых функций и спектра состояния одномерного стационарного уравнения Шредингера имеет как общефизический интерес [1,2], так и практическое значение для различных областей физики [3].

Рассмотрим задачу движения электрона в поле одномерного потенциала

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}+u(x)\right)\psi(x)=\varepsilon\psi(x), \tag{1}$$

где $u(x)=\hbar^2/2mU(x)$, $\varepsilon=\hbar^2/2mE$ и $U(x),E$ являются потенциальной и полной энергиями электрона, соответственно. Пусть $u(x)$ имеет вид

$$u(x)=\begin{cases}V_1=\text{const}, & x<0,\\ V(x), & 0\le x\le d,\\ V_2=\text{const}, & x>d,\end{cases} \tag{2}$$

где $V(x)$ – произвольная функция и в общем случае V_1, V_2 принимают различные значения.

Случай инфинитного движения электрона ($\varepsilon>V_1, V_2$) был исследован в работах [4-7], где, в частности, было показано, что задача рассеяния электрона в поле потенциала вида (2) в общем виде может быть сформулирована как задача Коши для волнового уравнения (1). Случай финитного движения электрона ($\varepsilon<V_1, V_2$) рассматривался в работе [8], где было показано, что задача определения спектра связанных состояний в поле потенциала (2) сводится к задаче рассеяния электрона

на внутрислойном потенциале $V(x)$, когда потенциал вне слоя равен нулю ($V_1 = V_2 = 0$).

В данной работе нами рассматривается задача определения волновых функций как делокализованных, так и связанных электронных состояний для потенциала (2). Предлагаемый ниже метод позволяет рассмотреть задачу в общем виде.

2. Волновая функция электрона, совершающего инфинитное движение в поле одномерного потенциала произвольного вида

Рассмотрим задачу определения волновой функции электрона (1), когда $\varepsilon > V_1, V_2$. Сначала рассмотрим инфинитное движение электрона в поле потенциала $u(x)$ (2) для частного случая, когда $V_1 = V_2 = 0$. В этом случае общее решение уравнения Шредингера вне области слоя имеет вид

$$\Psi = \begin{cases} A_0 \exp\{ik_0 x\} + B_0 \exp\{-ik_0 x\}, & x < 0, \\ C_0 \exp\{ik_0 x\} + D_0 \exp\{-ik_0 x\}, & x > d, \end{cases} \tag{3}$$

где $k_0 = \sqrt{\varepsilon}$ и $\varepsilon > 0$. Заметим, что между коэффициентами решения (3), A_0, B_0 и C_0, D_0 существует линейная связь, которая может быть представлена с помощью амплитуд прохождения t и отражения r электрона для потенциала $u(x)$ (2), когда $V_1 = V_2 = 0$ [9]:

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Из (3), (4) следует, что знание амплитуд рассеяния t и r определяет решение уравнения (1) в областях $x < 0$ и $x > d$.

Для определения решения внутри слоя будем рассматривать $\Psi(x)$ в виде

$$\Psi(x) = A(x) \exp\{ik(x)x\} + B(x) \exp\{-ik(x)x\}, \quad 0 < x < d, \tag{5}$$

где $k(x) = \sqrt{\varepsilon - V(x)}$. Предположим, что в малой области вокруг точки x правее от нее потенциал имеет постоянное значение $V(x)$ и левее от нее значение потенциала равно нулю. Тогда, согласно методу матриц переноса [9] (см. также [6]), между $A(x)$, $B(x)$ и A_0, B_0 может быть установлена следующая линейная связь:

$$\begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix} = \frac{k_0}{k(x)} \begin{pmatrix} 1/t_{0x}^*(x) & -r_{0x}^*(x)/t_{0x}^*(x) \\ -r_{0x}(x)/t_{0x}(x) & 1/t_{0x}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/t^*(x) & -r^*(x)/t^*(x) \\ -r(x)/t(x) & 1/t(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где t_{0x}, r_{0x} являются амплитудами рассеяния электрона для потенциала, который левее точки x имеет значение, равное нулю, и правее от точки x принимает постоянное значение, равное $V(x)$:

$$\frac{1}{t_{0x}}=\frac{k_0+k(x)}{2k}\exp\{i(k(x)-k)\},\quad \frac{r_{0x}}{t_{0x}}=\frac{k_0-k(x)}{2k}\exp\{i(k(x)+k)\}. \tag{7}$$

В (6) $t(x)$, $r(x)$ являются амплитудами прохождения и отражения электрона для потенциала $u(x)$ (2) с $V_1=0$, который правее от точки x принимает значение, равное нулю. Заметим, что при $x=d$ функции $t(x)$, $r(x)$ совпадают с амплитудами рассеяния электрона t, r (4) от внутрислойной части потенциала, когда слой с обеих сторон граничит с вакуумом.

Используя (6), (7), волновую функцию электрона внутри слоя (5) можно представить в виде

$$\Psi(x)=\left(\frac{1}{t^*(x)}\exp\{ik_0x\}-\frac{r(x)}{t(x)}\exp\{-ik_0x\}\right)A_0+\left(\frac{1}{t(x)}\exp\{-ik_0x\}-\frac{r^*(x)}{t^*(x)}\exp\{ik_0x\}\right)B_0. \tag{8}$$

Волновая функция (8) представляет собой решения уравнения (1) внутри слоя, когда вне слоя решение представлено в наиболее общей форме (3). В частности, когда $A_0=1$ и $B_0=r$, (8) представляет собой волновую функцию электрона, падающего на слой справа.

Как следует из (8), задача нахождения волновой функции сводится к задаче нахождения функций $t(x)$ и $r(x)$. Последняя задача рассматривалась в работах [4,5], где было показано, что амплитуды рассеяния $r(x)$ и $t(x)$ могут быть выражены через реальные функции $H_{1,2}(x)$ с помощью следующих формул:

$$\frac{1}{t(x)}=\frac{\exp\{ikx\}}{2}\left[H_1(x)+\frac{dH_2(x)}{dx}-ik_0H_2(x)+\frac{i}{k_0}\frac{dH_1(x)}{dx}\right], \tag{9}$$

$$\frac{r(x)}{t(x)}=\frac{\exp\{ikx\}}{2}\left[-H_1(x)+\frac{dH_2(x)}{dx}-ik_0H_2(x)-\frac{i}{k_0}\frac{dH_1(x)}{dx}\right], \tag{10}$$

где $H_{1,2}(x)$ удовлетворяют уравнению (1)

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}+u(x)\right)H_{1,2}(x)=\varepsilon H_{1,2}(x), \tag{11}$$

с начальными условиями

$$H_1(0)=1,\ H_2(0)=0 \text{ и } dH_1(x)/dx\,|_{x=0}=0,\ dH_2(x)/dx\,|_{x=0}=1. \tag{12}$$

Подставляя (9), (18) в (8), получим волновую функцию делокализованных состояний $\Psi(x)$ для частного случая потенциала $u(x)$ (2), когда $V_1=V_2=0$, выраженную через функции $H_{1,2}(x)$:

$$\Psi=A_0\exp\{ik_0x\}+B_0\exp\{-ik_0x\},\qquad x\le 0, \tag{13}$$

$$\Psi(x)=\{H_1(x)+ik_0H_2(x)\}A_0+\{H_1(x)-ik_0H_2(x)\}B_0,\quad 0<x<d, \tag{14}$$

$$\Psi(x)=\frac{A_0-r^*B_0}{t^*}\exp\{ik_0x\}+\frac{B_0-rA_0}{t}\exp\{-ik_0x\}\,,\ x\geq d\,. \tag{15}$$

Используя (13)-(15) и условие непрерывности волновой функции в точках $x=0$ и $x=d$, получим волновую функцию потенциала (2) в общем случае:

$$\Psi(x)=A\exp\{ik_1x\}+B\exp\{-ik_1x\},\quad x\leq 0\,, \tag{16}$$

$$\Psi(x)=\{H_1(x)+ik_1H_2(x)\}A+\{H_1(x)-ik_1H_2(x)\}B\,,\quad 0<x<d\,, \tag{17}$$

$$\Psi(x)=\frac{k_1}{k_2}\left[\frac{A-R^*B}{T^*}\exp\{ik_2x\}+\frac{B-RA}{T}\exp\{-ik_2x\}\right],\quad x\geq d\,, \tag{18}$$

где $k_1=\sqrt{\varepsilon-V_1}$, $k_2=\sqrt{\varepsilon-V_2}$, а R, T являются амплитудами отражения и прохождения электрона для потенциала (2) [6,7]:

$$\frac{1}{T}=\frac{\exp\{ik_2d\}}{2}\left[\frac{k_2}{k_1}H_1+\frac{dH_2}{dx}-ik_2H_2+\frac{i}{k_1}\frac{dH_1}{dx}\right], \tag{19}$$

$$\frac{R}{T}=\frac{\exp\{ik_2d\}}{2}\left[-\frac{k_2}{k_1}H_1+\frac{dH_2}{dx}-ik_2H_2-\frac{i}{k_1}\frac{dH_1}{dx}\right]. \tag{20}$$

Как следует из (16)-(20), знание функций $H_{1,2}(x)$ определяет волновую функцию, где сами функции $H_{1,2}(x)$ удовлетворяют уравнению Шредингера (1) (или (11)) с начальными условиями (12). Заметим, что при $A=B$ волновая функция реальна, и при $A=-B$ она чисто мнимая. Последнее означает, что когда плотность потока вероятности вне слоя равна нулю, то она равна нулю внутри слоя.

3. Волновая функция связанного состояния

Рассмотрим движение электрона с полной энергией ε меньшей, чем V_1, V_2, движущегося в поле потенциала $u(x)$ (2). Согласно работе [8], для существования внутри слоя связанного электронного состояния, его энергия должна удовлетворять следующему трансцендентальному уравнению:

$$\mathrm{tg}kd=\frac{k(\chi_1+\chi_2)\,\mathrm{Re}\,\alpha+(\chi_1\chi_2-k^2)\,\mathrm{Im}\,\alpha-(\chi_1\chi_2+k^2)\,\mathrm{Im}\,\beta-k(\chi_1-\chi_2)\,\mathrm{Re}\,\beta}{k(\chi_1+\chi_2)\,\mathrm{Im}\,\alpha-(\chi_1\chi_2-k^2)\,\mathrm{Re}\,\alpha+(\chi_1\chi_2+k^2)\,\mathrm{Re}\,\beta-k(\chi_1-\chi_2)\,\mathrm{Im}\,\beta}, \tag{21}$$

где $\chi_1=\sqrt{V_1-\varepsilon}$, $\chi_2=\sqrt{V_2-\varepsilon}$ и $\alpha=1/t^*$, $\beta=-r^*/t^*$, где r, t являются амплитудами отражения (4) для слоя, граничащего с обеих сторон с вакуумом. Используя (9), (10), уравнение (21) может быть представлено в виде

$$\chi_2 H_1 + \chi_1 \frac{dH_2}{dx} + \chi_1\chi_2 H_2 + \frac{dH_1}{dx} = 0. \qquad (22)$$

В (22) $H_{1,2}$ и $dH_{1,2}/dx$ являются значениями функций $H_{1,2}(x)$ и их производных в точке $x = d$.

Обозначим корни уравнения (22) через ε_n. Тогда волновая функция электрона вне слоя имеет вид

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} L_1 \exp\{\chi_1^n x\}, & x < 0, \\ L_2 \exp\{-\chi_2^n x\}, & x > d, \end{cases} \qquad (23)$$

где $\chi_1^n = \sqrt{V_1 - \varepsilon_n}$, $\chi_2^n = \sqrt{V_2 - \varepsilon_n}$.

Предположим, что непосредственно при переходе через границы внутрь слоя существуют бесконечно малые области, в которых значение потенциала равно нулю. Тогда волновая функция в этих областях может быть представлена в виде

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} A_0 \exp\{ik_n x\} + B_0 \exp\{-ik_n x\}, & 0 < x < 0+0, \\ C_0 \exp\{ik_n x\} + D_0 \exp\{-ik_n x\}, & d-0 < x < 0, \end{cases} \qquad (24)$$

где $\varepsilon_n = k_n^2$.

Согласно методу, развитому в п.1 данной работы, волновая функция внутри слоя может быть быть выражена через величины A_0, B_0:

$$\Psi(x) = \{H_1^n(x) + ik_n H_2^n(x)\}A_0 + \{H_1^n(x) - ik_n H_2^n(x)\}B_0. \qquad (25)$$

В (25) через $H_{1,2}^n(x)$ обозначены функции $H_{1,2}(x)$, определяемые из (11), (12), когда энергия $\varepsilon = \varepsilon_n$.

Из требования непрерывности волновой функции и ее производной в точках $x = 0$ и $x = d$ получим

$$L_1 = A_0 + B_0, \qquad (26)$$

$$L_1 = \frac{ik_n}{\chi_1^n}(A_0 - B_0), \qquad (27)$$

$$L_2 \exp\{-\chi_2^n d\} = \{H_1^n + ik_n H_2^n\}A_0 + \{H_1^n - ik_n H_2^n\}B_0, \qquad (28)$$

$$-\chi_2^n L_2 \exp\{-\chi_2^n d\} = \left\{\frac{dH_1^n}{dx} + ik_n \frac{dH_2^n}{dx}\right\}A_0 + \left\{\frac{dH_1^n}{dx} - ik_n \frac{dH_2^n}{dx}\right\}B_0. \qquad (29)$$

В (28), (29) через $H_{1,2}^n$ и $dH_{1,2}^n/dx$ обозначены значения функций $H_{1,2}^n(x)$ и их производных в точке $x = d$.

Используя (26)-(29), выразим A_0, B_0 и L_2 через L_1, которую мы будем рассматривать как нормировочную константу для волновой функции:

$$A_0 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\chi_1^n}{ik_n}\right]L_1, \tag{30}$$

$$B_0 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\chi_1^n}{ik_n}\right]L_1, \tag{31}$$

$$L_2 = \exp\{-\chi_2^n d\}[H_1^n + \chi_1^n H_2^n]L_1 . \tag{32}$$

Используя (30)-(31) и (25), для волновой функции связанного состояния получим

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} L_1 \exp\{\chi_1^n x\}, & x \le 0, \\ L_1[H_1^n(x) + \chi_1^n H_2^n(x)], & 0 < x < d, \\ L_1[H_1^n + \chi_1^n H_2^n]\exp\{\chi_2^n (d-x)\}, & x \ge d. \end{cases} \tag{33}$$

Как видно из (33), $\Psi_n(x)$ выражается через функции $H_{1,2}^n(x)$. Следовательно, задача определения волновой функции связанного состояния сводится к задаче Коши для волнового уравнения (1).

Потребуем, чтобы волновая функция (33) удовлетворяла условию нормировки на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 = 1 . \tag{34}$$

Используя (33), из (34) для L_1 получим

$$\frac{1}{|L_1|^2} = \frac{1}{2\chi_1^n} + \frac{[H_1^n + \chi_1^n H_2^n]^2}{2\chi_2^n} + \int_0^d [H_1^n(x) + \chi_1^n H_2^n(x)]^2 dx . \tag{35}$$

Из (28), (29) следует, что при выборе L_1 в (33) в виде (35) волновая функция будет нормирована на единицу.

4. Заключение

В данной работе нами предложен метод для нахождения волновой функции как для финитно, так и инфинитно движущегося электрона в поле одномерного потенциала произвольного вида (2). Показано, что рассматриваемая задача в общем виде сводится к задаче Коши для волнового уравнения Шредингера.

Авторы выражают благодарность академику В.М.Арутюняну, профессору Д.А.Бадаляну и профессору С.Г.Петросяну за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1984.
2. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. М., Наука, 1974.
3. E.L.Ivchenko and G.E.Pikus. Superlattices and other heterostructures. Berlin, Springer-Verlag, 1997.
4. Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян. ДНАН Армении, **98**, 301 (1998); Астрофизика, **42**, 420 (1999).
5. D.M.Sedrakian, A.Zh.Khachatrian. Phys. Lett. A, **265**, 294 (2000).
6. А.Ж.Хачатрян, Д.М.Седракян, Г.М.Андреасян, Ю.Н.Айрапетян. Известия НАН Армении, Физика, **36**, 117 (2001).
7. Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян, Г.М.Андреасян. ДНАН Армении, **101**, №2 (2001) (в печати).
8. Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян. Известия НАН Армении, Физика, **36**, 62 (2001).
9. В.И.Арнольд. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М., Наука, 1978.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՖՈՒՆԿՑԻԱՆ ՄԻԱՉԱՓ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԱՅԻՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Ա.Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Աշխատանքում առաջարկված է մեթոդ կամայական միաչափ դաշտում էլեկտրոնի ալիքային ֆունկցիան որոշելու համար:

ELECTRON WAVE FUNCTION IN THE FIELD OF A ONE-DIMENSIONAL POTENTIAL

D.M. SEDRAKIAN, A.ZH. KHACHATRIAN

A method for determination of the electron wave function in the field of an arbitrary one-dimensional potential is proposed.