

УДК 467

Академик НАН Армении Д. М. Седракян, А. Ж. Хачатрян

Рекуррентные соотношения для задачи рассеяния электрона на одномерном потенциале

(Представлено 2/XI 1998)

1. Как известно, задача рассеяния электрона на произвольном одномерном потенциале $V(x)$ сводится к решению волнового уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

где приняты $\hbar^2 = 2m = 1$

Пусть заданный потенциал $V(x)$ отличен от нуля между точками x_1 и x_2 . Тогда очевидно, что наиболее общее решение уравнения (1) вне области потенциала имеет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{при } x < x_1 \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & \text{при } x > x_2, \end{cases} \quad (2)$$

где $k^2 = E$ – энергия электрона, и следовательно, $k > 0$.

Хорошо известно также, что между коэффициентами общего решения (2) имеет место линейная связь, которую можно записать в следующем виде (1,2):

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

где матрица $\hat{U}$ вследствие сохранения плотности тока

$$|A_2|^2 - |B_2|^2 = |A_1|^2 - |B_1|^2 \quad (4)$$

должна иметь вид

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \alpha^* \alpha - \beta^* \beta = 1. \quad (5)$$

Здесь α и β некоторые комплексные числа. Матрица $\hat{U}$, связывающая коэффициенты решения (2) по обе стороны заданного потенциала $V(x)$, называется трансфер матрицей или матрицей монодромии. Задание трансфер матрицы однозначно определяется заданием потенциала рассеяния, следовательно элементы матрицы $\hat{U}$ зависят только от вида потенциала $V(x)$. Вследствие этого любые

линейно-независимые решения уравнения Шредингера, нормированные одинаковым образом, приводят к одинаковому значению плотности тока:

$$\psi_1^* \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_1^*}{dx} = \psi_2^* \frac{d\psi_2}{dx} - \psi_2 \frac{d\psi_2^*}{dx}, \quad (6)$$

где ψ_1 и ψ_2 - два произвольных линейно-независимых решения уравнения (1).

Пусть ψ_1 и ψ_2 два линейно-независимых, нормированных на δ -функцию решения уравнения (1), соответствующие задачам падения электрона на потенциал $V(x)$ слева и справа. Тогда в области, где потенциал равен нулю, для ψ_1 и ψ_2 имеют место следующие решения:

$$\psi_1 = \begin{cases} e^{ikx} + \bar{r}e^{-ikx} & \text{при } x < x_1 \\ \bar{t}e^{ikx} & \text{при } x > x_2 \end{cases} \quad (7)$$

и

$$\psi_2 = \begin{cases} \bar{t}e^{-ikx} & \text{при } x < x_1 \\ e^{-ikx} + \bar{r}e^{ikx} & \text{при } x > x_2 \end{cases}, \quad (8)$$

где $\bar{t}$ и $\bar{r}$ - коэффициенты прохождения и отражения для задачи падения электрона слева, а $\bar{t}$ и $\bar{r}$ - соответствующие коэффициенты для задачи падения электрона справа. Условие сохранения плотности тока для каждой задачи и условие (6) приводят к уравнениям

$$1 - |\bar{r}|^2 = |\bar{t}|^2, \quad 1 - |\bar{r}|^2 = |\bar{t}|^2 \quad \text{и} \quad |\bar{t}|^2 = |\bar{t}|^2, \quad |\bar{r}|^2 = |\bar{r}|^2. \quad (9)$$

Из сравнения решений (7) и (8) с (2) мы видим, что в первом случае $A_1 = 1$, $B_1 = \bar{r}$, $A_2 = \bar{t}$ и $B_2 = 0$ тогда как во втором случае $A_1 = 0$, $B_1 = \bar{t}$, $A_2 = \bar{r}$ и $B_2 = 1$. Переписав соотношения (3) к обоим решениям ψ_1 и ψ_2 , с учетом (5) получим

$$\begin{pmatrix} \bar{t} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{r} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} \bar{r} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{t} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Из (10), в частности, следует

$$\bar{t} = \bar{t}, \quad \bar{r} = -\frac{\bar{r}^* \bar{t}}{\bar{t}^*}, \quad \alpha = \frac{1}{\bar{t}^*} \quad \text{и} \quad \beta = -\frac{\bar{r}^*}{\bar{t}^*}. \quad (11)$$

Как видно из (11), коэффициенты прохождения частицы при падении электрона на произвольный барьер слева и справа совпадают, а коэффициенты отражения отличаются по фазе. Введя обозначения $\bar{t} = t$ и $\bar{r} = r$ для трансфер матрицы (5), с учетом (11) получим

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*} & \frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad |r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (12)$$

2. Пусть потенциал $V(x)$ имеет вид

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V_n(x - x_n). \quad (13)$$

Здесь x_n — координата середины области определения, отличное от нуля $V_n(x - x_n)$, а $2d_n$ — ширина этой области. Мы предполагаем, что $x_n - x_{n-1} > 2(d_n - d_{n-1})$. Тогда если каждый потенциал цепочки характеризовать своей трансфер матрицей, то для системы N потенциалов можно записать следующее соотношение (2):

$$\begin{pmatrix} T_N \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{U}_N \hat{U}_{N-1} \cdots \hat{U}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ R_N \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где T_N, R_N — амплитуды прохождения и отражения частицы для потенциала $V(x)$. Матрицы $\hat{U}_n$ являются трансфер матрицами одиночных потенциалов цепочки $V_n(x - x_n)$ ($n = 1, 2, \dots, N$) и согласно (12) имеют вид:

$$\hat{U}_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_n^*} & \frac{r_n^*}{t_n^*} \\ -\frac{r_n}{t_n} & \frac{1}{t_n} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где t_n и r_n — амплитуды прохождения и отражения частицы для потенциала $V_n(x - x_n)$. Например, в случае, когда $V_n(x - x_n)$ является одиночным δ -потенциалом, т.е. $V_n(x - x_n) = V_n \delta(x - x_n)$, для t_n и r_n имеем следующие выражения (2):

$$t_n = \frac{1}{1 + \frac{iV_n}{2k}} \quad \text{и} \quad r_n = \frac{-\frac{iV_n}{2k} e^{2ikx_n}}{1 + \frac{iV_n}{2k}}. \quad (16)$$

Рассмотрим трансфер матрицу потенциала $V(x)$:

$$\hat{U}_N = \prod_{n=1}^N \hat{U}_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_N^*} - \frac{R_N^*}{T_N^*} \\ -\frac{R_N}{T_N} & \frac{1}{T_N} \end{pmatrix} \quad (17)$$

Тогда матрица $\hat{U}_{N-1}$ характеризует рассеяние частицы только при наличии первых $N-1$ потенциалов поля $V(x)$, т.е. когда $V_N(x - x_N) = 0$. Как следует из (14), (15) и (17),

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T_N^*} - \frac{R_N^*}{T_N^*} \\ -\frac{R_N}{T_N} & \frac{1}{T_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_N^*} - \frac{r_N^*}{t_N^*} \\ -\frac{r_N}{t_N} & \frac{1}{t_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T_{N-1}^*} - \frac{R_{N-1}^*}{T_{N-1}^*} \\ -\frac{R_{N-1}}{T_{N-1}} & \frac{1}{T_{N-1}} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Введем обозначения $D_N = \frac{1}{T_N}$ и $\bar{D}_N = \frac{R_N^*}{T_N^*}$. Тогда из (18) получим линейную систему конечно-разностных уравнений для комплексных величин D_N и $\bar{D}_N$:

$$D_N = \frac{r_N}{t_N} \bar{D}_{N-1} + \frac{1}{t_N} D_{N-1}, \quad (19a)$$

$$\bar{D}_N = \frac{r_N^*}{t_N^*} D_{N-1} + \frac{1}{t_N^*} \bar{D}_{N-1}. \quad (19b)$$

Исключив из уравнения (19a) $\bar{D}_{N-1}$ и из уравнения (19b) D_{N-1} , полученную нами систему уравнений (19) можно записать в более удобной форме:

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2}, \quad (20a)$$

$$\bar{D}_N = A_N^* \bar{D}_{N-1} - B_N^* \bar{D}_{N-2}, \quad (20b)$$

где

$$A_N = \frac{1}{t_N} + \frac{1}{t_{N-1}^*} B_N \quad \text{и} \quad B_N = \frac{r_N t_{N-1}}{t_N r_{N-1}}. \quad (20c)$$

Как видно из (20), система уравнений (19) распадается на две независимые системы для комплексных величин D_N и $\bar{D}_N$. Отметим также, что уравнения (19) и (20) верны для любого потенциала, имеющего вид (13).

3. Рассмотрим частный, на наш взгляд важный, вид потенциала $V(x)$, когда одиночные потенциалы суммы (13) имеют вид прямоугольных барьеров, характеризующихся произвольными высотой V_n , шириной $2d_n$ и расположением x_n (x_n — координата середины прямоугольного барьера). Коэффициенты прохождения и отражения для прямоугольного барьера с параметрами V_n , $2d_n$ и x_n хорошо известны в квантовой механике и задаются в виде (2)

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_n} &= e^{2ik_0 d_n} \left[\cos 2k_n d_n - i \frac{k_n^2 + k_0^2}{2k_0 k_n} \sin 2k_n d_n \right], \\ \frac{r_n}{t_n} &= i \frac{e^{2ik_0 x_n}}{2k_0 k_n} (k_n^2 - k_0^2) \sin 2k_n d_n, \end{aligned} \quad (21)$$

где $k_0 = \sqrt{E}$, $k_n = \sqrt{E - V_n}$. Коэффициенты A_N и B_N , входящие в уравнение (20a) и (20b), определяются из (20c) и (21). В частности, для B_N получаем следующее выражение:

$$B_N = \frac{k_N^2 - k_0^2}{k_{N-1}^2 - k_0^2} \cdot \frac{k_{N-1}}{k_N} \cdot \frac{\sin 2k_N d_N}{\sin 2k_{N-1} d_{N-1}} \cdot e^{2ik_0(x_N - x_{N-1})}. \quad (22)$$

Если высота барьера $V_N \rightarrow \infty$, а ширина $2d_N \rightarrow \infty$, так чтобы $2V_N d_N \rightarrow \bar{V}_N$, тогда прямоугольные барьеры переходят в δ -функции с

амплитудой $\bar{V}_N$. Нетрудно проверить, что при таком переходе формулы в (21), определяющие t_N и r_N , перейдут в формулы (15), следовательно и выражения для A_N и B_N совпадут с соответствующими выражениями работы (3), полученными для δ -потенциалов методом последовательного решения уравнений Дайсона для функции Грина.

Таким образом, мы получили рекуррентное уравнение (20) для коэффициента прохождения электрона через систему N произвольных одномерных потенциалов. Коэффициенты A_N и B_N для системы произвольных прямоугольных барьеров выражаются формулами (20в), (21) и (22). Данные формулы могут быть использованы для получения дифференциального уравнения для функции $D(x) = 1/T(x)$, где $T(x)$ — коэффициент прохождения для потенциала

$$V = V(y)\theta(y - x), \quad (23)$$

где $V(y)$ — произвольный барьер, а θ — функция Хевисайда.

Если обозначим $D_{N-1} = D(x)$, тогда $D_N = D(x + \Delta x)$ есть величина, обратная коэффициенту прохождения при добавлении прямоугольного барьера высотой $V(x + \Delta x)$ и шириной Δx , а $D_{N-2} = D(x)$ соответствующая величина для барьера высотой $V(x - \Delta x)$ и шириной Δx . Тогда разностное уравнение (20а) можно записать в следующем виде:

$$D(x + \Delta x) = A(V(x), \Delta x)D(x) - B(V(x), \Delta x)DV(x - \Delta x). \quad (24)$$

Разлагая функцию D по малой величине Δx , уравнение (24) можно записать в виде

$$\frac{1}{2}(1 + B)\frac{d^2 D}{dx^2}(\Delta x)^2 + (1 - B)\frac{dD}{dx}\Delta x - (A - B - 1)D(x) + \theta((\Delta x)^3) = 0. \quad (25)$$

Используя формулы (21), (22) и (20в) и принимая $V_{N-1} = V(x)$ и $V_N = V(x + \Delta x)$, для коэффициентов уравнения (25) получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} B - 1 &= 2ik_0\Delta x + \theta(\Delta x^2), \\ A - B - 1 &= V \cdot (\Delta x)^2 + \theta((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (26)$$

Подставляя (26) в уравнение (25) и устремляя $\Delta x \rightarrow 0$, получим искомое дифференциальное уравнение для функции $D(x)$

$$\frac{d^2 D}{dx^2} - 2ik_0 \frac{dD}{dx} - VD = 0. \quad (27)$$

Для нахождения коэффициента прохождения электрона через произвольный барьер $V(x)$ шириной L необходимо решить уравнение (27) с начальными условиями

$$D(0) = 1 \quad \text{и} \quad \left. \frac{dD}{dx} \right|_{x=0} = \frac{iV(0)}{2k_0}. \quad (28)$$

Значение $D(x)$ в точке $x = L$ и определяет искомый коэффициент прохождения.

Отметим, что задача рассеяния электрона на произвольном барьере сводится к задаче Коши для комплексного уравнения (27). В случае конечно-прямоугольного барьера высотой V и шириной L уравнение (27) с начальными условиями (28) легко решается, и для $D(L)$ получаем следующее выражение:

$$D(L) = e^{ik_0 L} \left(\cos kL - i \frac{k_N^2 + k_0^2}{2kk_0} \sin kL \right), \quad (29)$$

которое, как и ожидалось, совпадает с первой формулой (21) для $L = 2d$.

В конце отметим, что уравнение (27) может играть важную роль в задачах переноса электромагнитных и упругих волн в одномерных и неоднородных линейных средах (4).

Авторы выражают благодарность профессору Д.А.Бадалян за обсуждение полученных результатов.

Ереванский государственный университет
Государственный инженерный университет Армении

Հայաստանի ԳԱԱ ակադեմիկոս Դ. Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Ա. Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

**Ռեկուրենտ առնչություններ միաչափ պոտենցիալ դաշտում
էլեկտրոնի ցրման խնդրում**

Աշխատանքում ստացված են ռեկուրենտ առնչություններ էլեկտրոնի անցման գործակցի համար կամայական միաչափ պոտենցիալ դաշտում: Հաշվված է այդ առնչությունների գործակիցները ուղղանկյուն արգելքների համար: Գտնված է դիֆերենցիալ հավասարում, որի լուծումը որոշում է անցման գործակիցը կամայական պոտենցիալ արգելքի համար:

ЛИТЕРАТУРА – ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

- ¹ В.И.Арнольд, Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М., Наука, 1978. ² P.Erdos, R.C.Herdon, Adv. in Phys., v.31, p.65 (1982). ³ V.M.Gasparian, B.L.Altshuler, A.C.Aronov, Z.H.Kasamian, Phys. Lett., A132 p.201, (1988). ⁴ Д.М.Седракан, Д.А.Бадалян, В.М.Гаспарян и др., ЖЭТФ, т.111, с.575 (1997).