

УДК 539.2

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА ОДНОМЕРНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Д. М. СЕДРАКЯН, А. Ж. ХАЧАТРЯН

Ереванский государственный университет

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 24 декабря 1998 г.)

Получены рекуррентные соотношения для коэффициента прохождения электрона через систему N произвольных одномерных потенциалов. Вычислены коэффициенты этих соотношений для системы прямоугольных барьеров. Найдено дифференциальное уравнение, определяющее коэффициент прохождения электрона через произвольный потенциальный барьер.

1. Введение

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 принято $\hbar^2 = 2m = 1$.

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

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

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, соответствующие задачам падения и нормированные одинаковым образом, приводят к одному и тому же 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-независимые, нормированные на δ -функцию, решения уравнения (1), соответствующие случаям 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

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

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 $B_2 = 1$. Применяя соотношения (3) к обоим решениям ψ_1 и ψ_2 , с учетом (5) получим:

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

Из (10), в частности, следует:

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

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. Рекуррентное уравнение

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, в которой отлична от нуля функция $V_n(x - x_n)$, а $2d_n$ есть 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 , r_n — амплитуды прохождения и отражения частицы для потенциала $V_n(x - x_n)$. Например, в случае, когда $V_n(x - x_n)$ является одиноч-

ным 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]:

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

Рассмотрим трансфер-матрицу потенциала $V(x)$:

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

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 $\bar{D}_N$ [3]:

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

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

Исключив из уравнения (19a) $\bar{D}_{N-1}$, а 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

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

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).

Рассмотрим частный и важный, на наш взгляд, 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]

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_N} &= e^{2ik_o d_N} \left[\cos 2k_N d_N - i \frac{k_N^2 + k_o^2}{2k_o k_N} \sin 2k_N d_N \right], \\ \frac{r_N}{t_N} &= i \frac{e^{2ik_o x_N}}{2k_o k_N} (k_N^2 - k_o^2) \sin 2k_N d_N, \end{aligned} \quad (21)$$

где $k_o = \sqrt{E}$, $k_N = \sqrt{E - V_N}$. Коэффициенты A_n и B_n , входящие в уравнения (20а) и (20б), определяются из (20в) и (21). В частности, для B_n получаем следующее выражение:

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

Если высота барьера $V_N \rightarrow \infty$, а ширина $2d_n \rightarrow 0$ 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 (21), определяющие t_n и r_n , перейдут в формулы (15), а следовательно, и выражения для A_n и B_n совпадут с соответствующими выражениями работы [4], 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).

3. Уравнение, определяющее коэффициент прохождения для произвольного потенциала

Рассмотрим произвольный потенциал в виде $V(x)$, определенный в интервале $a \leq x \leq b$, и вне этого интервала $V(x) = 0$. Введем функцию $D(x) = 1/T(x)$, где $T(x)$ — амплитуда коэффициента прохождения для потенциала $V(x)$. Если обозначить $D_{N-1} = D(x)$, 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 $D_{N-2} = D(x - \Delta x)$ —

соответствующая величина для барьера высотой $V(x-\Delta x)$ и шириной Δx . Тогда разностное уравнение (20а) можно представить в следующем виде:

$$D(x+\Delta x) = A(V(x), \Delta x)D(x) - B(V(x), \Delta x)D(x-\Delta x). \quad (23)$$

Разлагая функцию D по малой величине Δx , уравнение (23) можно записать в виде

$$\frac{1}{2}(1+B)\frac{d^2 D}{dx^2}(\Delta x)^2 + (1-B)\frac{dD}{dx}(\Delta x) - (A-B-1)D(x) + O((\Delta x)^3) = 0. \quad (24)$$

Используя формулы (1), (22) и (20в) и принимая $V(x)$ заданным, для коэффициентов уравнения (24) получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} B-1 &= \left(2ik_0 + \frac{1}{v} \frac{dv}{dx} \right) \Delta x + O((\Delta x)^2), \\ A-B-1 &= V(\Delta x)^2 + O((\Delta x)^3). \end{aligned} \quad (25)$$

Подставляя (25) в уравнение (24) и устремляя $\Delta x \rightarrow 0$, получим искомое дифференциальное уравнение для функции $D(x)$:

$$\frac{d^2 D}{dx^2} \left(-2ik_0 + \frac{1}{v} \frac{dv}{dx} \right) \Delta x - \frac{dD}{dx} - V(x)D = 0. \quad (26)$$

Таким образом, для нахождения коэффициента прохождения электрона через произвольный барьер $V(x)$ шириной L необходимо решить уравнение (26) с определенными граничными условиями. Одно граничное условие тривиально: если потенциал $V(x)$ для $x < a$ равняется нулю, то

$$D(x)|_{x=a} = 1. \quad (27)$$

Второе условие, накладываемое на дифференциал функции $D(x)$, требует ее конечности при стремлении длины барьера к нулю:

$$\left. \frac{dD(x)}{dx} \right|_{x=a} = \frac{iV(a)}{2k_0}. \quad (28)$$

Таким образом, для нахождения коэффициента прохождения электрона через произвольный барьер $V(x)$, определенный в интервале $a \leq x \leq b$ и $V(x)=0$ вне этого интервала, необходимо решить уравнение (26) с граничными условиями (27) и (28). Коэффициент прохождения равняется $|T(b)|^2 = 1/|D(b)|^2$ и, следовательно, определяется значением функции $D(x)$ в точке b .

Отметим также, что уравнение (27) может играть важную роль в задачах переноса электромагнитных и упругих волн в одномерных и неоднородных линейных средах [5].

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

ЛИТЕРАТУРА

1. В.И.Арнольд. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М., Наука, 1978.
2. P.Erdos, R.C.Herdon. Adv. in Phys., 31, 65 (1982).
3. Д.М.Седракий, А.Ж.Хачатрян. ДНАН Армении, 98, 301 (1998).
4. V.M.Gasparian, V.M.Altshuler, A.G.Aronov, Z.H.Kasamian. Phys. Lett., A132, 201 (1988).
5. Д.М.Седракий, Д.А.Бадалян, В.М.Гаспарян, А.Ж.Хачатрян, ЖЭТФ, 111, 575 (1997).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ՑՐՈՒՄԸ ՄԻԱԶԱԾ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼ ԴԱՇՏՈՒՄ

Դ. Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Ա. Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Ստացված են ռեկուրենտ հարաբերակցություններ էլեկտրոնի անցման գործակցի համար կամայական միաչափ պոտենցիալների դաշտում: Հաշված են այդ հարաբերակցությունների գործակիցները ուղանկյուն արգելքների համար: Գտնված է դիֆերենցիալ հավասարում, որի լուծումը որոշում է անցման գործակիցը կամայական պոտենցիալ արգելքի համար:

ELECTRON SCATTERING ON THE ONE-DIMENSIONAL POTENTIAL

D. M. SEDRAKIAN, A. ZH. KHACHATRIAN

Recurrent relations for the transmission coefficient of electron moving through N arbitrary one-dimensional potentials are found. Coefficients of these relations for the system of N rectangular potentials are calculated. The differential equation, a solution of which defines the transmission coefficient for potential barrier is found.