ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ ԳԻՏԱԿԱՆ ՏԵՂԵԿԱԳԻՐ
УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ ЕРЕВАНСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Բնական գիտություններ 2, 2002 Естественные науки

Физика

УДК13.3

Д.М. СЕДРАКЯН, А.Ж. ХАЧАТРЯН,

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОЙ НЕСИММЕТРИЧНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЫ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМОЙ ДНА

В работе предложен новый точный метод для рассмотрения стационарного движения электрона в поле одномерного потенциала произвольного вида. Показано, что в случае электрона, совершающего инфинитное движение, задача определения волновой функции в общем виде может быть представлена как задача Коши для одномерного волнового уравнения Шредингера. Для случая финитного движения найдено уравнение, определяющее спектр связанных состояний. Доказано, что когда спектр связанных состояний известен, то задача построения волновых функций дискретного спектра также в общем виде может быть сформулирована как задача Коши для волнового уравнения.

1. Введение. Как известно, задача определения волновых функций и спектра связанных состояний электрона в поле потенциала произвольного вида имеет как общефизический интерес [1], так и ~~важное~~ практическое значение [2, 3]. Общеизвестно, что аналитический подход к задачам данного класса для случаев двух- и трехмерных систем, когда потенциальная энергия электрона является произвольно или случайно меняющейся от точки к точке функцией, сопряжен с большими математическими трудностями, и они в основном рассматриваются численными методами. Даже в рамках приближенных методов получение окончательного результата требует выполнения большого количества численных вычислений.

Вместе с тем уже много лет интенсивно рассматриваются одномерные модели, которые не утратили своей актуальности, и по сей день являются интенсивно изучаемыми объектами [4 – 11]. Это связано с несколькими основными причинами. Во-первых, одномерные модели имеют самостоятельный физический интерес и актуальны при многих прикладных задачах. Во-вторых, понимание явления для одномерного случая открывает возможность его понимания для двухмерного и трехмерного случаев. В-третьих, разработка общих методов решения одномерных задач может служить полигоном для создания более мощных методов при решении многомерных задач.

Рассмотрим задачу движения электрона в поле одномерного потенциала

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

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

$$u(x) = \begin{cases} V_1 = const, \; x < 0, \\ 0, \quad 0 \le x < a, \\ V(x), \; a \le x < b, \\ 0, \quad b \le x < a, \\ V_2 = const, \; x \ge d, \end{cases} \tag{2}$$

где $V(x)$ – произвольная функция, а V_1, V_2 в общем случае, принимают различные значения. Далее мы будем принимать за начало отсчета энергии наименьшее значение потенциала, так что при $V_1 = V_2 = 0$ спектр электронных состояний будет непрерывным.

Как известно, в зависимости от поведения волновой функции левее ($x < 0$) и правее ($x > d$) от области с неоднородным слоем различают следующие три случая. Первый – это когда волновая функция отлична от нуля во всем пространстве. Такая волновая функция соответствует, например, электрону с энергией $\varepsilon > V_1, V_2$, который из второй полубесконечной среды частично переходит в первую. Второй случай соответствует волновой функции, отличной от нуля только в полубесконечной области одномерного пространства. Такая волновая функция (пусть для определенности $V_1 > V_2$) соответствует электрону с энергиями $\varepsilon < V_1$ и $\varepsilon > V_2$, который, падая из второй полубесконечной среды на первую и полностью отражаясь, снова распространяется во второй среде. Условие $\varepsilon < V_1$ обеспечивает затухание волны в первой. И наконец последний третий случай соответствует электрону, волновая функция которого заметно отлична от нуля только в области слоя и убывает по мере его углубления в первую и вторую полубесконечные среды. Данная волновая функция описывает так называемое связанное состояние, в котором может оказаться электрон с полной энергией $\varepsilon < V_1, V_2$. Важно отметить, что для первых двух случаев энергетический спектр состояний непрерывен, а в последнем – дискретен.

Задача определения волновых функций для всех трех случаев и электронного спектра для случая связанных состояний рассматривалась многочисленными точными и приближенными методами. Перечислим наиболее известные из них: метод инвариантного погружения, метод функций Грина, метод матриц переноса, квазиклассическое приближение, теория возмущений и т.д. [1, 12–16]. В данной работе мы предлагаем новый точный метод для рассмотрения вышеизложенной проблемы. В частности, как мы покажем ниже, проблема решения уравнения (1) с заданным решением левее и правее от слоя (граничная задача) может быть в общем виде сформулирована как задача с начальными условиями для дифференциального уравнения (1).

2. Волновая функция электрона, совершающего инфинитное движение. Обычно при рассмотрении инфинитного движения электрона в одномерном поле ограничиваются определением асимптотик волновой функции в бесконечностях. Так, в случае с электроном, рассеивающимся на одномерном потенциале, определяются только амплитуды отражения и прохождения электрона, в то время как волновая функция внутри самого потенциала остается неопределенной. Однако во многих физически интересных случаях необходимо знание делокализованной волновой функции не только в асимптотиках, но и во всем пространстве. Такая необходимость возникает, например, при исследовании характера оптического поглощения в полупроводниковых гетероструктурах, связанных с переходом электрона из связанного состояния дискретного спектра в делокализованное – в непрерывной части спектра.

Задача определения амплитуд прохождения и отражения электрона для слоя с неоднородным потенциалом, когда $V_1 = V_2 = 0$, рассматривалась в работах [17, 18]. В частности было показано, что амплитуда прохождения (АП) и амплитуда отражения (АО) могут быть определены с помощью следующих формул:

$$\frac{1}{t} = \frac{\exp\{ik(b-a)\}}{2}\left[\frac{i}{k}H_1'(b) + H_1(b) + H_2'(b) - ikH_2(b)\right], \tag{3}$$

$$\frac{r}{t} = \frac{\exp\{ik(b+a)\}}{2}\left[-\frac{i}{k}H_1'(b) - H_1 + H_2'(b) - ikH_2(b)\right], \tag{4}$$

где $k^2 = \varepsilon$. Сами функции $H_{1,2}(x)$ удовлетворяют волновому уравнению (1):

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)H_{1,2}(x) = k^2 H_{1,2}(x) \tag{5}$$

с начальными условиями, заданными в точке $x = a$,

$$H_1(a) = 1,\ \ H_2(a) = 0 \ \text{и}\ H_1'(a) = 0,\ H_2'(a) = 1. \tag{6}$$

Через $H_{1,2}'(a)$, $H_{1,2}'(b)$ в (3), (4) и (6) обозначены производные функций $H_{1,2}(x)$ в точках $x = a, b$.

Согласно (3)–(6), одномерная задача рассеяния электрона может быть в общем виде сформулирована как задача Коши для волнового уравнения (1). Как будет показано в данном параграфе, задача нахождения волновой функции $\psi(x)$ во всем пространстве также может быть сведена к задаче Коши (5), (6), т.е. выражена через функции $H_{1,2}(x)$ и их производные $H_{1,2}'(x)$. Рассмотрим наиболее общее решение уравнения (1) с потенциалом (2):

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \exp\{ik_1 x\} + B_1 \exp\{-ik_1 x\}, & x < 0, \\ A_0 \exp\{ikx\} + B_0 \exp\{-ikx\}, & 0 < x < a, \\ L_1 H_1(x) + L_2 H_2(x), & a < x < b, \\ C_0 \exp\{ikx\} + D_0 \exp\{-ikx\}, & b < x < d, \\ A_2 \exp\{ik_2 x\} + B_2 \exp\{-ik_2 x\}, & x > d, \end{cases} \tag{7}$$

где $k_1, k_2 > 0$ и $k_1 = \sqrt{\varepsilon - V_1}$, $k_2 = \sqrt{\varepsilon - V_2}$. Как видно из (7), в качестве решения внутри слоя ($a < x < b$) нами выбрана комбинация, состоящая из двух линейно независимых решений уравнения (5).

Для того чтобы (7) являлось волновой функцией, как известно, необходимо, чтобы она и ее производная были непрерывными также в точках

$x = 0,\ a,\ b,\ d$. Это приводит к следующей линейной системе из восьми уравнений для коэффициентов решения (7):

$$\begin{gathered}
A_1 + B_1 = A_0 + B_0, \\
k_1[A_1 - B_1] = k[A_0 - B_0], \\
A_0 \exp\{ika\} + B_0 \exp\{-ika\} = L_1 H_1(a) + L_2 H_2(a), \\
k[A_0 \exp\{ika\} - B_0 \exp\{-ika\}] = L_1 H_1'(a) - L_2 H_2'(a), \\
L_1 H_1(b) + L_2 H_2(b) = C_0 \exp\{ikb\} + D_0 \exp\{-ikb\}, \\
L_1 H_1'(b) - L_2 H_2'(b) = k[C_0 \exp\{ikb\} - D_0 \exp\{-ikb\}], \\
C_0 \exp\{ikd\} + D_0 \exp\{-ikd\} = A_2 \exp\{ik_2 d\} + B_2 \exp\{-ik_2 d\}, \\
k[C_0 \exp\{ikd\} - D_0 \exp\{-ikd\}] = k_2[A_2 \exp\{ik_2 d\} - B_2 \exp\{-ik_2 d\}]
\end{gathered} \tag{8}$$

Как видно из (8), десять неизвестных коэффициентов удовлетворяют системе из восьми линейных уравнений. Из этого, в частности, следует, что волновая функция, описывающая делокализованное состояние, может быть определена лишь с точности до двух произвольных постоянных. Обычно при рассмотрении задачи рассеяния, когда электрон падает слева на слой, в качестве этих констант выбираются

$$A_1 = 1 \text{ и } B_2 = 0. \tag{9}$$

В этом случае в (7) B_1 и A_2 имеют смысл амплитуд отражения и прохождения электрона для неоднородного слоя, когда слева и справа от него на расстояниях a и $d - b$ находятся однородные полубесконечные среды с потенциалами V_1 и V_2 соответственно:

$$B_1 \equiv R_{1,2},\quad A_2 \equiv T_{1,2} \text{ и } k_1\left(1 - |T_{1,2}|^2\right) = k_2 |R_{1,2}|^2. \tag{10}$$

Учитывая (3)–(6) и рассматривая (8) как линейную неоднородную систему с неоднородной частью, состоящей только из A_1, B_1, остальные коэффициенты решения (7) можем выразить через A_1, B_1 с помощью следующих формул

$$A_0 = \frac{k_1}{k}\frac{1}{t_{10}^*} A_1 - \frac{k_1}{k}\frac{r_{10}^*}{t_{10}^*} B_1, \qquad B_0 = -\frac{k_1}{k}\frac{r_{10}}{t_{10}} A_1 + \frac{k_1}{k}\frac{1}{t_{10}} B_1, \tag{11}$$

$$L_1 = \exp\{ika\}A_0 + \exp\{-ika\}B_0,\quad L_2 = k[\exp\{-ika\}B_0 - \exp\{ika\}A_0], \tag{12}$$

$$C_0 = \frac{k_1}{k}\frac{1}{T_{10}^*} A_1 - \frac{k_1}{k}\frac{R_{10}^*}{T_{10}^*} B_1,\ D_0 = -\frac{k_1}{k}\frac{R_{10}}{T_{10}} A_1 + \frac{k_1}{k}\frac{1}{T_{10}} B_1, \tag{13}$$

$$A_2 = \frac{k_1}{k_2}\frac{1}{T_{12}^*} A_1 - \frac{k_1}{k_2}\frac{R_{12}^*}{T_{12}^*} B_1, \quad B_2 = -\frac{k_1}{k_2}\frac{R_{12}}{T_{12}} A_1 + \frac{k_1}{k_2}\frac{1}{T_{12}} B_1, \tag{14}$$

где

$$\frac{1}{T_{1,0}} = \frac{1}{t_{1,0}}\frac{1}{t} + \frac{r_{1,0}^*}{t_{1,0}^*}\frac{r}{t}, \tag{15}$$

$$\frac{R_{1,0}}{T_{1,0}} = \frac{1}{t_{1,0}^*}\frac{r}{t} + \frac{r_{1,0}}{t_{1,0}}\frac{1}{t}, \tag{16}$$

$$\frac{1}{T_{1.2}}=\frac{1}{t_{1.0}}\frac{1}{t_{0.2}}\frac{1}{t}+\frac{r_{0.2}}{t_{0.2}}\frac{r_{1,0}^{*}}{t_{1,0}^{*}}\frac{1}{t^{*}}+\frac{r_{1.0}^{*}}{t_{1.0}^{*}}\frac{1}{t_{0.2}}\frac{r}{t}+\frac{r_{0.2}}{t_{0.2}}\frac{1}{t_{1.0}}\frac{r^{*}}{t^{*}}, \tag{17}$$

$$\frac{R_{1.2}}{T_{1.2}}=\frac{1}{t_{1.0}}\frac{1}{t_{0.2}}\frac{r}{t}+\frac{r_{0.2}}{t_{0.2}}\frac{r_{1.0}}{t_{1.0}}\frac{r^{*}}{t^{*}}+\frac{r_{1.0}}{t_{1.0}}\frac{1}{t_{0.2}}\frac{1}{t}+\frac{r_{0.2}}{t_{0.2}}\frac{1}{t_{1,0}^{*}}\frac{1}{t^{*}}. \tag{18}$$

В (11)–(18) $t_{1.0}$, $r_{1.0}$ ($t_{0,2}$, $r_{0.2}$) являются амплитудами прохождения и отражения электрона для первой полубесконечной среды, когда вакуум справа от нее (или для второй, когда вакуум слева):

$$t_{1.0}=\frac{2k_1}{k_1+k}\ ,\quad t_{0.2}=\frac{k}{k+k_2}\exp\{i(k-k_2)d\}, \tag{19}$$

$$r_{1.0}=\frac{k_1-k}{k_1+k},\quad r_{0,2}=\frac{k-k_2}{k+k_2}\exp\{i2kd\}. \tag{20}$$

Как следует из вышеизложенного, знание r и t позволяет определить волновую функцию $\psi(x)$ (7) во всем пространстве с точностью до двух произвольных постоянных A_1, B_1. Согласно формулам (3)–(6), задача нахождения r и t сводится к задаче Коши для уравнения Шредингера. Следовательно, согласно (11)–(18), задача определения волновой функции во всем пространстве также сводиться к задаче Коши для уравнения Шредингера.

В конце заметим, что, подставляя в (11)–(15) $A_1=1$ и $B_1=R_{1,2}$ с учетом (17), (18), из (7) мы получаем волновую функцию электрона, подающего на слой слева направо. При $B_1=(k_2/k_1)T_{12}$ и $A_1=0$ волновая функция (7) будет описывать движение электрона, падающего на слой справа налево.

3. Волновая функция электрона, совершающего движение в полубесконечной области одномерного пространства. В данном параграфе мы рассмотрим движение электрона в поле потенциала (2) с энергией $V_2<\varepsilon<V_1$ (здесь мы для определенности предполагаем, что $V_2<V_1$). Для этого случая вид волновой функции правее точки $x=0$ совпадает с (7), а левее точки $x=0$ она экспоненциально убывает по мере углубления в первую полубесконечную среду, т.е.

$$\psi(x)=G\exp\{\chi_1 x\}\ \text{при}\ x<0, \tag{21}$$

где $\chi_1=\sqrt{V_1-\varepsilon}$.

Как и для случая (7), требуя непрерывности волновой функции и ее производной в точках $x=0$, a, b, d, мы получим линейную систему из восьми уравнений для ее девяти коэффициентов. Легко увидеть, что шесть уравнений этой системы совпадают с последними шестью уравнениями системы (8), а первые два должны быть заменены уравнениями

$$\begin{gathered} G=A_0+B_0,\\ \chi_1 G=ik\left[A_0-B_0\right]. \end{gathered} \tag{22}$$

Заметим, что в отличие от волновой функции электрона, совершающего инфинитное движения во всем пространстве, количество неизвестных коэффициентов здесь уменьшилось на единицу. Это означает, что волновая функция электрона, совершающего инфинитное движения в полубесконечной части одномерного пространства, может быть определена с точностью до произвольной комплексной константы.

Выбирая за произвольную константу G, остальные коэффициенты волновой функции можем выразить через G с помощью формул

$$A_0 = B_0^* = \frac{k - i\chi_1}{2k} G, \tag{23}$$

$$L_1 = \left[\cos\{ka\} + \frac{\chi_1}{k}\sin\{ka\}\right]G, \quad L_2 = \left[\chi_1 \cos\{ka\} - k\sin\{ka\}\right]G, \tag{24}$$

$$C_0 = D_0^* = \frac{k(1-r^*) - i\chi_1(1+r^*)}{2kt^*} G, \tag{25}$$

$$A_2 = B_2^* = \frac{k(1-R_{02}^*) - i\chi_1(1+R_{02}^*)}{2k_2 T_{02}^*} G, \tag{26}$$

где

$$\frac{1}{T_{02}} = \frac{1}{t_{0,2}}\frac{1}{t} + \frac{r_{0,2}}{t_{0,2}}\frac{r^*}{t^*}, \quad \frac{R_{02}}{T_{02}} = \frac{1}{t_{0,2}}\frac{r}{t} + \frac{r_{0,2}}{t_{0,2}}\frac{1}{t^*}. \tag{27}$$

Как следует из (23)–(26), волновая функция электрона может быть записана в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} G\exp\{\chi_1 x\}, & x < 0, \\ 2\operatorname{Re}\left[A_0 \exp\{ikx\}\right], & 0 < x < a, \\ L_1 H_1(x) + L_2 H_2(x), & a < x < b, \\ 2\operatorname{Re}\left[C_0 \exp\{ikx\}\right], & b < x < d, \\ 2\operatorname{Re}\left[A_2 \exp\{ik_2 x\}\right], & x > d. \end{cases} \tag{28}$$

Из (28) и (23)–(27) видно, что волновая функция с точностью до константы G является действительной функцией, следовательно, плотность потока вероятности для рассматриваемых состояний всегда равна нулю:

$$\psi(x)\frac{d\psi^*(x)}{dx} - \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx} = 0 . \tag{29}$$

В конце заметим, что, как следует из результата (23)–(28) и формул (3)–(6), задача нахождения волновой функции электрона, стационарно движущегося в полубесконечной части одномерного пространства, сводится к задаче Коши для уравнения Шредингера, т.к., согласно (25)–(27), коэффициенты волновой функции выражаются через амплитуды рассеяния r и t (3)–(6).

4. Энергетический спектр и волновая функция финитного движения электрона. Здесь мы рассмотрим движение электрона в поле потенциала (2), когда его полная энергия $\varepsilon < V_1, V_2$. В этом случае движение носит финитный характер, и энергетический спектр в отличие от случаев, рассмотренных в параграфах 2, 3, дискретен.

Волновая функция для рассматриваемых состояний должна экспоненциально убывать по мере углубления электрона в первую и вторую полубесконечные среды. Следовательно, имеем

$$
\psi(x)=\begin{cases} G_1\exp\{\chi_1 x\}, & x<0, \\ A_0\exp\{ikx\}+B_0\exp\{-ikx\}, & 0<x<a, \\ L_1H_1(x)+L_2H_2(x), & a<x<b, \\ C_0\exp\{ikx\}+D_0\exp\{-ikx\}, & b<x<d, \\ G_2\exp\{-\chi_2 x\}, & x>d, \end{cases} \tag{30}
$$

где $\chi_1=\sqrt{V_1-\varepsilon}$, $\chi_2=\sqrt{V_2-\varepsilon}$.

Как видно из (30), волновая функция характеризуется восемью коэффициентами. Требования непрерывности функции (30) и ее производной в точках $x=0,\ a,\ b,\ d$ приводят к следующей системе из восьми линейных уравнений:

$$
\begin{gathered}
G_1=A_0+B_0, \\
\chi_1 G_1=ik[A_0-B_0], \\
A_0\exp\{ika\}+B_0\exp\{-ika\}=L_1H_1(a)+L_2H_2(a), \\
k[A_0\exp\{ika\}-B_0\exp\{-ika\}]=L_1H_1'(a)-L_2H_2'(a), \\
L_1H_1(b)+L_2H_2(b)=C_0\exp\{ikb\}+D_0\exp\{-ikb\}, \\
L_1H_1'(b)-L_2H_2'(b)=k[C_0\exp\{ikb\}-D_0\exp\{-ikb\}], \\
C_0\exp\{ikd\}+D_0\exp\{-ikd\}=G_2\exp\{-\chi_2 d\}, \\
ik[C_0\exp\{ikd\}-D_0\exp\{-ikd\}]=-\chi_2 G_2\exp\{-\chi_2 d\}.
\end{gathered} \tag{31}
$$

Так как количества переменных и уравнений в системе (31) равны друг другу и для того, чтобы (31) имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы ее детерминант был равен нулю. Это приводит к следующему трансцендентальному уравнению, определяющему спектр состояний:

$$
k\,tg\{ka_2\}=\frac{1}{\chi_2}\frac{S(D_1,D_2)}{S(M_1,M_2)}, \tag{32}
$$

где

$$
S(X_1,X_2)=\left(\frac{k}{\chi_1}\cos ka_1+\sin ka_1\right)X_1+k\left(\cos ka_1-\frac{k}{\chi_1}\sin ka_1\right)X_2, \tag{33}
$$

$$
D_{1,2}=H_{1,2}(b)+\frac{1}{\chi_2}H_{1,2}'(b),\quad M_{1,2}=H_{1,2}(b)-\frac{1}{\chi_2}H_{1,2}'(b). \tag{34}
$$

В (32), (33) введены обозначения $a=a_1$ и $a_2=d-b$. Как видно из (34), в уравнении (32) фигурируют значения функций $H_{1,2}(x)$ и их производных в точке $x=b$, которые в свою очередь также являются функциями от k, и знание последних полностью определяет спектр связанных состояний. Заметим, что (32) является сложным трансцендентальным уравнением, которое может быть решено только численно.

Рассмотрим следующие частные случаи. Пусть неоднородный слой непосредственно граничит со второй полубесконечной средой ($a_2=0$). Тогда уравнение (32) упрощается и принимает вид

$$
\frac{tg\{ka_1\}}{k}=-\frac{D_2+D_1/\chi_1}{D_1-k^2D_2/\chi_1}. \tag{35}
$$

Для случая, когда слой также соприкасается с первой полубесконечной средой ($a_1 = 0$), уравнение (35) принимает более простой вид [19]:

$$D_2 = -\frac{1}{\chi_1} D_1 \, . \tag{36}$$

Уравнение (32) позволяет также определить спектр связанных состояний для бесконечно глубокой ямы с неоднородным слоем внутри. Действительно, если принять $\chi_1 = \chi_2 = \chi$ и учесть, что

$$D_{1.2}(\chi \to \infty) = H_{1.2}(b) \;\; \text{и} \;\; k^2 M(\chi \to \infty) / \chi = -H'_{1.2}(b) , \tag{37}$$

из (32) получим

$$tg\{ka_2\} = -\frac{kH_2(b) + H_1(b)tg\{ka_1\}}{kH'_2(b) + H'_1(b)tg\{ka_1\}} . \tag{38}$$

Как видно из (38), при $a_1 = a_2 = 0$ условие, определяющее спектр состояний, принимает довольно простой вид:

$$H_2(b) = 0 \, . \tag{39}$$

Перейдем теперь к задаче нахождения волновой функции. Для этого обозначим через $\psi_n(x)$ волновую функцию, соответствующую дискретному энергетическому уровню $\varepsilon_n = k_n^2$, где k_n являются корнями уравнения (32). Важно отметить, что только при знании значений спектра состояний $\varepsilon_n = k_n^2$ возможно построение волновых функций.

Обозначим через $H^n_{1.2}(x)$ решения уравнения (5) с начальными условиями (6), когда k заменено на k_n. Тогда, согласно (3), (4), мы можем определить амплитуды отражения и прохождения электрона r_n и t_n для слоя, граничащего с обеих сторон с вакуумом, когда энергия электрона равна энергиям связанных состояний электрона внутри ямы. Из (31) можно получить следующие формулы, выражающие коэффициенты волновой функции (30) через константу G_1:

$$A_0 = B_0^* = \frac{k - i\chi_1^n}{2k} G_1 , \tag{40}$$

$$L_1 = \left[\cos\{k_n a\} + \frac{\chi_1^n}{k_n} \sin\{k_n a\} \right] G_1 , \; L_2 = \left[\chi_1^n \cos\{k_n a\} - k_n \sin\{k_n a\} \right] G_1 , \tag{41}$$

$$C_0 = D_0^* = \frac{k_n(1 - r_n^*) - i\chi_1^n (1 + r_n^*)}{2kt_n^*} G_1 , \tag{42}$$

$$G_2 = \exp\{\chi_2^n d\} \left[C_0 \exp\{ik_n d\} + D_0 \exp\{-ik_n d\} \right] , \tag{43}$$

где $\chi_1^n = \sqrt{V_1 - k_n^2}$, $\chi_2^n = \sqrt{V_2 - k_n^2}$.

Из (40)–(43) следует, что, как и для случая инфинитного движения электрона в полубесконечном пространстве (28), волновая функция связанного состояния (30) является реальной с точностью до произвольной комплексной константы, которая определяется из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \, . \tag{44}$$

В заключение данного параграфа заметим, что решение задачи квантомеханического движения электрона в потенциальной яме с произвольным дном сводится к интегрированию уравнения Шредингера с начальными условиями, заданными в точке $x=a$, и определению функции $H_{1,2}(x)$ и их производных.

Заключение. В данной работе предложен новый метод, позволяющий определить энергетический спектр и построить волновые функции электрона, движущегося в поле одномерного потенциала произвольного вида, имеющего в асимптотиках различные постоянные значения. На наш взгляд, предложенный метод, по сравнению с известными, имеет два преимущества. Первое: он позволяет свести решение задачи квантового движения электрона в одномерном случае к задаче Коши для уравнения Шредингера, что делает экономичным и удобным получение численных результатов, особенно если аналитическое решение для рассматриваемого потенциала неизвестно. Если же потенциал внутри слоя позволяет получить такое решение, то предложенными формулами непосредственно можно решить поставленную задачу. Второе: получается трансцендентальное уравнение, определяющее спектр связанных состояний электрона в несимметричной яме с произвольной формой дна, причем фигурирующие в нем значения функций $H_{1,2}$ и их производных также определяются из решения уравнения Шредингера с заданными начальными условиями.

В конце заметим, что предложенный подход может быть обобщен для рассмотрения задачи движения электрона в произвольных полях, обладающих произвольной сферической и цилиндрической симметриями.

ЕГУ, ГИУА

Поступила 05.12.2001

ЛИТЕРАТУРА

1. **Блохинцев Д.М.** Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983.
2. **Bastard G.** Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures, Les Ulis, France, 1990.
3. **Ivchenko E.L. and Pikus G.E.** Superlattices and Other Heterostructures, Springer, Heidelberg, 1997.
4. **Senders G.D., Stanton C.J.** – Phys. Rev., 1993, B48, p. 11067.
5. **Rorison J.M.** – Phys. Rev., 1994, B50, p. 8008.
6. **Дмитриев А.Н.** – ЖЭТФ, 1989, т. 95, р. 243.
7. **Чуприков Н.Л.** – ФТП, 1992, т. 26, р. 2040.
8. **Zhao X.D., Yamamoto H., Taniguchi K.** – Superlattices and Microstructures, 1998, v. 23, p. 1309.
9. **Мурадян А.Ж.** – ФТТ, 1999, т. 41, с. 1317.
10. **Osontchan T., Chin V.W.L., Tansley T.L.** – J. Appl. Phys., 1996, v. 80, p. 5342.
11. **Petrov A.G., Shik A.Ya.** – Semiconductors, 1996, v. 31, p. 567.
12. **Кляцкин И.В.** Метод погружения в теории волн. М.: Наука, 1983.
13. **Бабиков В.В.** – УФН, 1967, v. 3, с. 92.
14. **Арнольд В.И.** Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978.
15. **Erdos P., Herndon R.C.** – Adv. Phys., 1982, v. 31, p. 65; **Azbel M.Ya.** – Phys. Rev., 1983, B 22, p. 4106.
16. **Buttiker M.** – Phys. Rev., 1983, B 37, p. 6178.
17. **Седракян Д.М., Хачатрян А.Ж.** – ДАН НАН Армении, 1998, т. 98, с.301.
18. **Sedrakian D.M., Khachatrian A.Zh.** – Phys. Lett., 2000, A 265, p. 294.
19. **Седракян Д.М., Хачатрян А.Ж.** – Изв. НАН Армении, Физика, 2001, №. 32, с. 62.

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Ա.Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

ՄԻԱՉԱՓ ՈՉ ՍԻՄԵՏՐԻԿ ԿԱՄԱՅԱԿԱՆ ՀԱՏԱԿՈՎ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՓՈՍՈՒՄ ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ԱԼԻՔԱՅԻՆ ՖՈՒՆԿՑԻԱՆ ԵՎ ԷՆԵՐԳԵՏԻԿ ՍՊԵԿՏՐԸ

Ամփոփում

Աշխատանքում առաջարկված է նոր ճշգրիտ մեթոդ միաչափ կամայական տեսքի պոտենցիալ դաշտում էլեկտրոնի ստացիոնար շարժումը դիտարկելու համար: Ցույց է տրվել, որ ինֆինիտ շարժում կատարող էլեկտրոնի դեպքի համար ալիքային ֆունկցիաների կառուցման խնդիրը կարելի է հանգեցնել Շրենդինգերի միաչափ հավասարման համար Կոշու խնդրին: Ֆինիտ շարժման դեպքի համար ստացված է էներգետիկ սպեկտրը որոշող հավասարում: Ապացուցված է, որ եթե հայտնի է կապված վիճակների սպեկտրը, ապա դիսկրետ սպեկտրի ալիքային ֆունկցիաների կառուցումը նույնպես կարելի է ձևակերպել ինչպես Կոշու խնդիր Շրենդինգերի հավասարման համար:

D.M. SEDRAKIAN, A.ZH. KHACHATRIAN

AN ELECTRON ENERGY SPECTRUM AND WAVE FUNCTION IN THE FIELD OF ASYMMETRIC QUANTUM WELL WITH ARBITRARY SHAPE OF THE BOTTOM

Summary

A new method for consideration of an electron stationary motion in the field of an arbitrary one-dimensional potential. It is shown that for a case of an electron infinite motion, the problem of determination of wave functions can be represented as Cauchy problem for the one-dimensional Schrodinger equation. For the case of finite motion the equation determining the energy spectrum is found. It is proved, when the spectrum of bound states is know, the problem of building the wave functions of the discrete spectrum can be formulated as Cauchy problem for wave equation as well.