

**ЕРЕВАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

На правах рукописи

Давид Робертович Восканян

«Исследование распространения локальных волновых возмущений в  
одномерных неупорядоченных средах»

Специальность –А.04.07 (Физика конденсированного состояния)

Научный руководитель      доктор физ.-мат. наук, профессор

А.Ж. Хачатрян

Диссертация на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук

ЕРЕВАН - 2016

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	4
<b>ГЛАВА I. Движение квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида</b> .....	16
§1. Об одном представлении решения одномерного стационарного уравнения Шредингера.....	21
§2. Амплитудные функции $a(x)$ , $b(x)$ .....	24
§3. О размерности волновой функции непрерывного спектра.....	27
§4. Волновая функция инфинитного движения как суперпозиция расходящихся и сходящихся волн.....	31
§5. Нормализация волновых функций непрерывного спектра для одномерного потенциала произвольного вида.....	36
§6. Левая и правая задачи рассеяния.....	42
<b>ГЛАВА II. Нормировка и размерность волновых функций рассеяния</b> .....	48
§1. Матрица рассеяния и трансфер матрица одномерного комплексного потенциала произвольного вида.....	49
§2. Аппроксимация произвольного непрерывного потенциала посредством ультратонких прямоугольных потенциалов.....	51
§3. Волновые функции и спектральное уравнение связанных состояний для одномерного потенциала.....	58
§4. Метод фазовых функций.....	64
§5. Метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния.....	67

§6. Метод расслоения .....	72
<b>ГЛАВА III. ПРОХОЖДЕНИЕ СВЕТА СКВОЗЬ ПОГЛОЩАЮЩИЙ ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ.....</b>	<b>77</b>
§1. Рекуррентные соотношения для расчета амплитуд рассеяния слоистой структуры.....	78
§2. Преобразование элементов трансфер матрицы при параллельном сдвиге рассеивающегося слоя.....	81
§3. Рассеяние электромагнитной волны на идеальной слоистой структуре.....	83
§4. Идеальная периодическая среда со структурным элементом из двух однородных слоев.....	85
§5. Однородный фотонный кристалл на основе нанокompозита .....	86
<b>ГЛАВА IV. ЭВОЛЮЦИЯ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ ИЗ МАТЕРИАЛЬНЫХ ВОЛН В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИЛА.....</b>	<b>91</b>
§1. Постановка эволюционной задачи и базис для его решения.....	92
§2. Бездисперсионное рассеяние и причинность в процессе рассеяния.....	95
§3. Квасисвязанные состояния .....	100
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 1.....</b>	<b>107</b>
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....</b>	<b>109</b>
<b>ЛИТЕРАТУРА.....</b>	<b>111</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Одной из важных проблем теории волн может считаться задача описания волновых процессов в средах с линейным законом суперпозиции, когда характеристики сред не зависят от времени и могут меняться от точки к точке произвольным образом. Как известно, в средах с линейным законом дисперсии, которые принято называть также линейными средами, возможно одновременное протекание различных, принципиально неограниченное количество, не влияющих на протекание друг друга волновых процессов. Волны в линейных средах принято также называть линейными волнами[1-4].

Основной особенностью любого волнового процесса является ход его временного протекания, т.е. закон в соответствии с которым происходит временное изменение величины характеризующей волновое поле в произвольной точке пространства. В целом характер временного протекания волновых процессов может быть подразделен на два класса. К первому классу следует отнести процессы, временной ход которых в различных точках пространства различен, когда волновой процесс носит эволюционирующий характер и возбужденный в одной локальной области пространства процесс передается в соседние области. Ко второму классу следует отнести волновые процессы с, так называемым, повторяющимся временным ходом, когда временная зависимость величины волнового поля для различных точек имеет один и тот же циклический характер. В этом случае возбужденное в одной локальной области пространства волновое возбуждение не передается в соседние, оно остается связанным сданной областью и временная зависимость величины поля в фиксированной точке носит периодический характер.

Как эволюционирующие, так и повторяющиеся во времени линейные волновые процессы уже не одно десятилетие являются объектами интенсивного исследования [5-12]. Как известно, динамика волнового процесса описывается на основе соответствующего волнового уравнения, решениями которого в зависимости от вида начального условия или вида стартового возбуждения

могут являться как эволюционирующие, так и повторяющиеся во времени волновые процессы. Для повторяющихся процессов, решение волнового уравнения через кратные определенной величине моменты времени принимает вид стартового состояния, т.е. в зависимости от времени оно является периодической функцией. В случае эволюционирующих процессов ни в один момент времени вид начального возбуждения не воспроизводится, т.е. решение не является периодической функцией времени. Очевидно, что если процесс повторился один раз, то он будет повторяться и далее.

Естественным требованием к волновому, как и любому другому физическому процессу является ограниченность его энергии, если конечно в среде все время не действуют порождающие возбуждения источники. Из данного требования, в частности, следует, что в случае неограниченной среды волновой процесс не может охватывать весь его объём одновременно. Так, возникший в одной области процесс, повторяясь, может оставаться связанным с данной областью или же, убывая в ней, эволюционируя передаваться соседним областям. Вместе с тем, обусловленными причинами как общетеоретического, так и с прикладного характера, представляет большой интерес рассмотрение охватывающих все пространстволновых процессов с бесконечно большой энергией возбуждения. Одним из наиболее известных примеров таких волн являются гармонические в пространстве и во времени Фурье волны, закон дисперсии которых определяет свойства и характер однородной среды.

На данный момент периодические, в частном случае гармонические волновые процессы могут считаться более полно и всесторонне изученными по сравнению с эволюционирующими волнами. Для волн с периодическим временным ходом сказанное в особой степени к одномерным системам, имеющим как упорядоченную, так и неупорядоченную структуру [13]. Для двухмерных и трехмерных систем расчет пространственного распределения возмущения гармонических процессов производится в основном численно [14]. Что касается эволюционирующих волновых процессов, то уже в случае простых

одномерных систем, начальное их рассмотрение приводит к парадоксальным результатам принципиального характера. Это в первую очередь относится к вопросу об изменениях в динамике процесса передачи волнового возмущения в среде, вносимых неоднородными участками среды [15].

Выше отмеченная проблема, более известная как проблема описания временного хода процесса туннелирования, уже не один десяток лет интенсивно исследуется [16-18]. Оказалось, что несмотря на прозрачность и простоту постановки, эта проблема довольно трудно поддается изучению. Спорным является вопрос об определении количества характеристик, необходимых для удовлетворительного описания процесса туннелирования, а также об интерпретации их физического смысла. Как известно, проводимые в данном направлении исследования до сих пор еще не дали окончательного ответа на вопрос о влиянии неоднородности среды на скорость передачи в ней возмущения. Открытым, в частности, остается вопрос о том, как следует однозначно и по возможности более полно определять скорость сильно изменяющегося как по форме, так и по размерам объекта, коим является распространяющееся в неоднородной среде локальное волновое возмущение. В связи с проблемой описания временного хода процесса туннелирования особого внимания заслуживает так называемый эффект Хартмана [19]. Согласно данному эффекту в некоторых случаях неоднородность среды может привести не к уменьшению, а к увеличению скорости передачи волнового возмущения и в принципе сделать возможным реализацию волновых процессов со сколь угодно большими скоростями распространения волнового возмущения, превышающими даже скорость света в вакууме. Несмотря на многочисленные усилия и большое количество работ, направленных на преодоление противоречия между основным постулатом специальной теории относительности и возможностью переноса волнового возмущения со сверхсветовой скоростью, эффект Хартмана все еще остается парадоксом. Можно сказать, что вся сложность и нетривиальность проблемы обусловлена

правомерностью применения понятий фазовой и групповой скоростей, а также вкладываемого в них физического смысла для волн, распространяющихся в неоднородных средах.

Работа посвящена задаче описания эволюции волновых процессов на примере распространения материальных волн в поле одномерного потенциала произвольного вида. Исследование поведения волновых пакетов производится на их основе представления в виде группы волн составленных из волновых функций рассеяния. Как известно они являются собственными функциями Гамильтониана взаимодействия частицы с рассеивающим потенциалом. Данное обстоятельство является наиболее существенным, так как позволяет наиболее адекватным образом задать постановку задачи эволюции волновых процессов и проводить обсуждение ее решения.

**Актуальность проблемы.** Первым экспериментально зафиксированным объектом, движущимся со «сверхсветовой скоростью», был короткий импульс микроволнового излучения, прошедший сквозь активную усиливающую среду [20]. Как показало детальное рассмотрение условий эксперимента, наблюдаемый эффект никоим образом не противоречит специальной теории относительности, а является прямым следствием того, что в активной среде кроме увеличения энергии проходящего сквозь нее электромагнитного импульса может также происходить поглощение этой энергии. Так, при вхождении импульса в среду его передний фронт провоцирует релаксацию поддерживаемого извне дипольного момента. В результате этого высвечивание энергии областью активной среды приводит к тому, что она становится поглощающей: задний фронт волны, пересекая уже высветивший энергию объем, отдает ему свою энергию, возвращая, тем самым, среду в активное состояние.

Вопрос не вызывал бы столь активного обсуждения, если бы схожее явление не наблюдалось экспериментально при прохождении волны сквозь неактивную среду [21]. Несмотря на то что случай взаимодействия с активной

средой нашел свое более или менее удовлетворительное физическое толкование, попытки объяснения случая взаимодействия с неактивной средой послужили поводом для выдвижения различного рода гипотез и предположений, включая предположение о том, что ход процесса туннелирования следует рассматривать в контексте комплексного времени [22]. Многие сходятся в том, что время туннелирования частицы сквозь барьерную область характеризуется так называемым фазовым временем прохождения, определяемым по фазе комплексного коэффициента прохождения [23]. По своей сути понятие фазового времени базируется на рассмотрении динамики распространения группы волн.

Различными авторами время туннелирования связывается с движением центра масс волнового пакета или же со скоростью движения максимума прошедшего волнового пакета [24]. Второй из известных подходов к определению характерного времени прохождения или длительности квантово-механического процесса туннелирования основывается на идее введения так называемых внешних часов. Первым примером внешних часов являются так называемые ларморовские часы [25], для которых расчет времени туннелирования проводится на основе величины, характеризующей изменение направления спина частицы при ее прохождении сквозь потенциальный барьер, в котором существует малое магнитное поле. Вторым пример – это внешние часы, определяющие время туннелирования с помощью так называемых барьерных часов, ход которых связывается с изменением энергии частицы, взаимодействующей с прямоугольным потенциальным барьером с высотой, очень медленно пульсирующей во времени [26]. Третий, заслуживающий внимания подход основывается на концепции, рассматривающей процесс туннелирования как стохастическое движение частицы, возникающее вследствие многократного отражения от границ барьера. В данном подходе длительность туннелирования определяется как усредненное



время, затрачиваемое частицей при подбарьерном движении по всевозможным «квазиклассическим» траекториям [27].

Следует также отметить важность рассматриваемой задачи с прикладной точки зрения. Так, в последнее время интерес к туннелированию обусловлен прогрессом в области нано электроники и разработкой новых устройств с рекордными параметрами, основанных на туннельном эффекте [28].

**Цель работы.** Хорошо известно, что динамика произвольной системы вне зависимости от характера осуществляемых внутренних и внешних взаимодействий во многом предопределяется начальным условием, которое должно быть задано в соответствии с физической постановкой задачи. Только лишь правильная, адекватная постановке задачи математическая запись начального состояния позволяет построить удовлетворительную картину эволюционного развития системы. Если для систем с одним или несколькими степенями свободы связь постановки задачи с начальным условием может считаться вполне прозрачной, то для систем со многими связанными между собой степенями свободы, например, волновое поле, проблема адекватной записи начального условия имеет место быть.

В отрыве от волнового уравнения удовлетворительная запись вида начального возбуждения может быть осуществлена разве что для волновых процессов, протекающих в однородной среде. Только лишь в данном случае известно как на основе гармонических во времени и в пространстве группы волн, а именно Фурье волн, составлять волновые пакеты с заранее известным эволюционным поведением, т.е. как будет выглядеть данное волновое возбуждение в последующий момент времени. Вместе с тем, в случае неоднородных сред, моделирование начального возбуждения на основе групп из Фурье волн может привести к нефизической эволюционной картине. Так, может проявиться следующая ситуация: прежде чем начальное возбуждение достигает неоднородной области может возникнуть отраженная волна.

Как вышесказанного следует что, для описания протекания в неоднородной среде волнового процесса, корректная постановка задачи должна быть выполнена посредством представления начального состояния в виде группы гармонических по времени волн, являющимися собственными волновыми модами для данной среды. В отличие от Фурье волн, гармоничных также по пространственной переменной, в общем случае пространственная зависимость собственных мод должна быть определена решением соответствующего стационарного волнового уравнения. Т.е. для рассмотрения или постановки нестационарной задачи решение стационарной задачи имеет принципиальное значение, т.к. только лишь в базисе собственных мод возможна запись начального условия, приводящего к адекватной физической постановке задачи эволюционной картине.

Целью данной работы являлось развитие общего подхода для описания эволюции волновых возбуждений в одномерных линейных средах, а также изучение возможности получения связанных волновых возбуждений (связанных состояний) как возможный результат эволюционирующих волновых процессов.

**Научная новизна.** Проведено обобщение многих результатов известных подходов описания одномерного волнового движения для случая материальных волн в поле комплексного потенциала произвольного вида и для электромагнитных волн в случае поглощающей среды. Выявлена, также связь между данными подходами.

Доказано, что связанные состояния волнового движения могут рассматриваться как волновые пакеты, получаемые в результате при определенной эволюции волновых процессов. Доказано, что в отличие от эволюционной задачи классической механики, для волнового процесса независимость уравнения движения, в данном случае волнового уравнения или уравнения распространения волны, от начальных условий, в данном случае

начального вида волнового возмущения, в определенной мере является условной.

### **Основные положения выносимые на защиту**

1. Показано при определённом выборе волновой функции и ее производной, задача решения уравнения Шредингера с комплексным потенциалом может быть заменена на задачу решения системы из двух линейных дифференциальных уравнений. Исследована связь асимптотических значений амплитудных функций с постановкой задачи.
2. Исследована связь между сходящимся и расходящимся решениями уравнения Шредингера. Показано, что данная связь имеет неалгебраический характер и в случае комплексного потенциала соответствующий переход осуществляется заменой знака волнового числа на противоположный.
3. В общем виде, для случая одномерного потенциала, решена проблема нормализации волновой функций непрерывного спектра. Доказано, что вне зависимости от выбора представления, значение константы нормировки волновой функции произвольного инфинитного движения совпадает со значением константы нормировки для свободного движения. Получена формула, определяющая связь нормировки волновой функции с асимптотическим поведением волновой функции.
4. Показано, что постоянная нормировки волновых функций рассеяния для потенциала произвольного вида при всех значениях волнового имеет одно и тоже значение. Доказано, что волновые функции левой и правой задач рассеяния при совпадающих значениях энергии ортогональны друг к другу. Получены связи между амплитудами отражения и прохождения задач рассеяния.
5. Для случая комплексного потенциала получены общие формулы выражающие связь элементов трансфер матрицы и матрицы рассеяния

с амплитудами отражения и прохождения левой и правой задач рассеяния. Посредством аппроксимации ультратонкими прямоугольными потенциалами получены зависимости, полученные амплитуд рассеяния от параметров рассеивающего потенциала.

6. Выявлена связь задачи связанных состояний с проблемой исследования аналитических свойств амплитуд рассеяния. Показано, что нули элемента один-один трансфер матрицы на положительной мнимой оси определяют уравнение для энергетического спектра связанных состояний, в то время как значение элемента один-два определяют постоянную ее нормировки.
7. Являющаяся в своей постановке граничная задача определения волновых функций рассеяния сведена к задаче с начальными условиями. Получена общая формула, выражающая значения волновой функции в произвольной точке от амплитуд рассеяния для частей потенциала левее и правее от данной точки.
8. Получены общие формулы для амплитуд рассеяния периодической слоистой структуры в зависимости от амплитуд рассеяния структурного элемента, а также количества слоев при наличии в среде поглощения. На примере нанокompозита проведено исследование спектрального поглощения, а также отражения и прохождения.
9. На примере системы из двух одинаковых, расположенных на некотором расстоянии друг от друга прямоугольных потенциалов получена эволюционная картина волнового процесса приводящего к образованию квазисвязанного состояния локализованного внутри ямы в области между потенциалами. Показано, что если несущая энергия волнового пакета, совпадает с энергией резонансного прохождения, то при неограниченном увеличении ширины прямоугольных барьеров,

время образования квазисвязанного состояния стремится к конечному пределу, в то время как время распада стремится к бесконечности.

**Апробации работы.** Результаты диссертационной работы докладывались на ежегодных конференциях ГИУА (Ереван 2014, 2016), International conference on Electron, Positron, Neutron and X-Ray Scattering under External Influences (Ереван 2016), также на семинарах кафедры физики ГИУА, кафедр общей физики и астрофизики, а также теоретической физики ЕГУ.

**Публикации.** Основное содержание диссертации опубликовано в 6 статьях и материалах тезисов докладов конференции.

**Структура и объём диссертации.** Диссертационная работа изложена на 119 печатных страницах. Она состоит из введения, четырех глав, одного приложения и заключения, содержит в себе 10 рисунка и список литературы из 106 наименований. В работе нумерация формул и рисунков проводится внутри каждой главы отдельно.

**Содержание работы.** Во *введении* обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована цель исследования, ее научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

В *первой главе* изложен подход, позволяющий с единой позиции охватить многие известные подходы для рассмотрения одномерной волновой проблемы. Кроме того, дано обобщение многих известных результатов для случая комплексного потенциала. §1 посвящен изложению основного результата метода комплексной амплитуды для случая реального потенциала, а так его обобщению для случая реального потенциала. Согласно данному результату, при определенном выборе волновой функции и ее производной, задача решения уравнения Шредингера может быть заменена на задачу решения системы из двух линейных дифференциальных уравнений. В §2 исследована связь асимптотических значений амплитудных функций с

постановкой задачи. §3 посвящен вопросу размерности волновых функции и амплитудных функций. Показано, для случаев импульсного и волнового представлений постоянная нормировки не зависит от индекса представления, в то время как в случае энергетического представления это не так. Доказано также, что в представлении волнового представлений волновые функции являются безразмерными. В §4 исследуются сходящимся и расходящимся решения уравнения Шредингера. Показано, что характер данной связи неалгебраический и в случае комплексного потенциала соответствующий переход осуществляется заменой знака волнового числа на противоположный. §5 посвящен проблеме нормализации волновой функций непрерывного спектра. Получена формула, определяющая связь нормировки волновой функции с асимптотическим поведением волновой функции. §6 посвящён рассмотрению левой и правой задач рассеяния. Произведена нормализация волновых функций рассеяния, а также исследован вопрос их ортогональности. Получены связи между амплитудами отражения и прохождения задач рассеяния.

**Вторая глава** посвящена задаче определения волновой функции одномерного движения для случая комплексного потенциала. §1 Для случая комплексного потенциала получены общие формулы выражающие связь элементов трансфер матрицы и матрицы рассеяния с амплитудами отражения и порождения левой и правой задач рассеяния. Посредством аппроксимации ультратонкими прямоугольными потенциалами получены зависимости, в §2 получены амплитуд рассеяния от параметров рассеивающего потенциала. В §3 исследуется вопрос определения волновой функции и их энергетического спектра связанных состояний. Выявлена связь задачи связанных состояний с проблемой исследования аналитических свойств амплитуд рассеяния. Показано, что нули элемента один-один трансферта матрицы на положительной мнимой оси определяют уравнение для энергетического спектра связанных состояний, в то время как значение элемента один-два определяют постоянную ее нормировки.

§4 посвящен известному методу фазовых функций, в частности, обсуждаются некоторые слабые стороны данного подхода. В §5 для произвольного комплексного потенциала на основе методов погружения и комбинации параметров рассеяния, являющаяся в своей постановке граничной задачей определения волновых функций рассеяния сведена к задаче с начальными условиями. В §6 представлена общая формула, выражающая зависимость значения волновой функции в произвольной точке от амплитуд рассеяния для частей потенциала левее и правее от данной точки.

**Третья глава** посвящена исследованию задачи прохождения электромагнитной волны сквозь неоднородный оптический слой с учетом диссипативных эффектов. В §1 выведены рекуррентные уравнения для амплитуд рассеяния слоистой структуры. §3 посвящен исследованию вопроса о подведении элементов трансфер матрицы при параллельном переносе слоя из одной области в другую. В §3 получена формула для амплитуд рассеяния периодической слоистой структуры в зависимости от амплитуд рассеяния структурного элемента, а также количества слоев при наличии в среде поглощения. Результат §3 применен в §4 для идеальной структуры из двух однородных слоев. В §5 рассмотрен конкретный пример нанокompозита (металлическая среда-диэлектрическая матрица), для которого проведено исследование спектрального поглощения, а также отражения и прохождения.

## ГЛАВА I.

### ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРОИЗВОЛЬНОГО ВИДА

С теоретической и прикладной точек зрения представляет большой интерес пространственное описание, так называемого, установившегося или повторяющегося во времени волнового процесса. Важным частным случаем повторяющегося процесса по праву может считаться гармонический процесс. Как известно, гармонический волновой процесс является наиболее простой формой волнового движения, при котором возмущение во всех точках пространства меняется во времени по гармоническому закону, причем с одинаковой частотой. Вследствие закона суперпозиции в линейных средах всякое сложное волновое движение может рассматриваться как наложение гармонических волновых процессов. Множество значений частот гармонических волн, одновременное существование которых образует наблюдаемый сложный волновой процесс, называется спектром данного процесса.

В связи с вышесказанным, обычно, волновую проблему изначально формулируют как задачу на собственные значения и собственные функции. Выявление собственных значений, означает нахождение спектра или множества возможных значений частот, только лишь при которых в данной среде возможен гармонический волновой процесс. Гармонические процессы со значениями частот вне данного спектра в среде неосуществимы.

Собственные функции иногда называют также волновыми модами или собственными модами. Каждому значению частоты спектра соответствует своя собственная функция, которая описывает пространственное распределение волнового возмущения при наличии в среде гармонического волнового процесса данной частоты. Если для данной спектральной частоты возможны



гармонические процессы с различным пространственным распределением возмущения, то она является вырожденной.

В однородной безграничной среде спектр частот простирается от нуля до бесконечности, что означает, что в такой среде возможно существование гармонического волнового процесса, в принципе, с произвольной частотой. Пространственное распределение этих волн также описывается гармоническим законом. Как показывает общее рассмотрение, если безграничная и в целом однородная среда, имеет внутри себя неоднородную пространственно ограниченную область, то в такой среде возможны гармонические процессы с различным характером пространственного распределения волнового возмущений. Такой волновой процесс может протекать по всему объему безграничной среды, являясь, так называемой, пространственно неограниченной волновой модой. Однако, в отличие от случая полностью однородной среды, пространственная зависимость волнового возмущения не может являться строго гармоничной во всем пространстве функцией.

В среде с локальной неоднородностью могут также реализовываться гармонические процессы, волновое возмущение которых сосредоточено, в основном внутри неоднородной области. При таких процессах, волновое возмущение быстро убывает по мере удаления от неоднородной области. Вследствие связанности области возмущения с неоднородностью, такие гармонические волновые процессы принято называть связанными модами или связанными состояниями.

Как показывает общее рассмотрение, между характером распределения частот внутри спектра и видом пространственного распределения волновых мод существует тесная связь. Так, обычно частоты значений связанных мод по величине оказываются меньшими по сравнению с частотами для пространственно неограниченных мод. Наиболее примечательным оказывается тот факт, что для неограниченных мод значения возможных частот оказываются непрерывно распределенными, в то время как для

пространственно связанных (ограниченных) мод значения частот отделены друг от друга некоторыми интервалами. Т.е. характер распределения частот в первом случае непрерывен, а во втором дискретен.

Единой количественной характеристикой распределения частот внутри спектрального диапазона является, так называемая, плотность собственных мод. Применительно к волновой проблеме для квантовой механики ее называют также плотностью состояний. Для малого интервала частот она указывает количество собственных мод содержащихся в нем в зависимости от того, в какой области спектра данный частотный интервал выбран. В непрерывной области спектра плотность собственных мод в зависимости от частоты является простой функцией, а для дискретной области она имеет  $\delta$ -образный характер.

Отдельного рассмотрения заслуживает вопрос о возможности существования гармонических во времени волн в безграничной среде, характеристики которой изменяются во всем пространстве. Наиболее изученными объектами этого вида, могут считаться безграничные периодические или упорядоченные системы. Хорошо известно, что в данном случае спектр мод имеет полосчатый (зонный) характер. Внутри всех полос распределение частот имеет непрерывный характер, а пространственное распределение возмущения гармонического волнового процесса описывается, так называемой, функцией Блоха, подчиняющейся универсальному трансляционному закону.

Другим, не менее важным объектом рассмотрения, являются безграничные неупорядоченные системы, пространственное изменение характеристик которых не поддается однозначному описанию, и поэтому такие системы обычно задаются статистически. Применительно, к таким системам, уже сама задача определения спектра мод и выявления вида пространственного распределения возмущений для каждой моды, требует дополнительных суждений. Обычно при рассмотрении безграничных неупорядоченных систем,

как характер самого спектра, так и вид собственных мод постулируется. Так, предполагается, что в не зависимости от размерности среды спектр мод всегда является непрерывным. Собственные моды для одномерных и двухмерных систем всегда являются пространственно локализованными функциями. Иногда это утверждение называют явлением полной локализации. В случае трехмерных неупорядоченных систем наряду с локализованными модами, существуют также пространственно не локализованные или, так называемые, делокализованные (охватывающие всю среду) моды. Предполагается также, что области спектра для локализованных и делокализованных мод не перекрываются [29].

Описанная выше в общих чертах волновая проблема имеет давнюю историю, но, несмотря на это, ее рассмотрение в двумерной и трехмерной постановках сопряжено с большими математическими трудностями. Невзирая на предпринимаемые вот уже много лет огромные усилия, можно утверждать, что до сих пор общие математические подходы для рассмотрения многомерной задачи далеки от завершения и во многих случаях даже приближенное рассмотрение задачи приходится выполнять исключительно численными методами.

Вместе с тем вот уже много лет волновая проблема рассматривается в одномерной постановке, и она до сих пор не утратила своей актуальности. Это в первую очередь связано с новейшими технологическими возможностями по созданию одномерных систем с произвольными, наперед заданными структурными и композиционными особенностями [30-32]. Кроме того, рассмотрение одномерных задач служит своеобразным полигоном для создания и апробирования новых методов применительно к волновой проблеме в ее двух и трехмерных постановках.

К настоящему времени для одномерной волновой проблемы известны несколько отличных друг от друга методов, а также их различные модификации, которые позволяют проводить рассмотрение задачи в наиболее

общем виде. Отметим некоторые из них: метод матриц переноса или трансфер матриц [33-35], метод теории возмущений [36], метод интегральных уравнений [37], метод погружения [38], метод фазовых функций [39], также метод комбинации параметров рассеяния [40-42].

В отличие от традиционного подхода, основанного на лобовом решении волнового уравнения, первый из перечисленных методов путем аппроксимации потенциала как системы из соприкасающихся потенциалов позволяет свести граничную задачу к вычислению произведения матриц. К методу интегральных уравнений, позволяющему рассматривать установившееся решение как суперпозицию вторичных волн, как и к методу теории возмущений, обычно прибегают при приближенном рассмотрении задачи. Последние четыре из вышеназванных методов, сводят решение волновой проблемы к задаче решения систем из дифференциальных уравнений первого порядка. В методах погружения и фазовых функций эти уравнения, в отличие от метода комбинации параметров рассеяния, являются нелинейными. Следует заметить, что метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния сводят волновую проблему к задаче эволюционного типа (задача Коши). Метод фазовых функций решает соответствующую систему при заданных граничных условиях.

В данной главе нами делается попытка с единой позиции охватить все до сих пор имеющиеся методы рассмотрения одномерной волновой проблемы, выявить их сильные и слабые стороны, а также в рамках одной схемы воспроизвести их основные результаты. Кроме того, в рамках развиваемого подхода удастся установить прозрачную связь между вышеизложенными методами, а их изложение уместить в одну единую схему. Предлагаемый ниже подход, близкой по своему духу к традиционному, может также рассматриваться как еще один возможный метод рассмотрения одномерной проблемы, дополняющий список уже существующих [43-44].

## §1. Об одном представлении решения одномерного стационарного уравнения Шредингера

Ниже мы будем исследовать одномерное движение квантовой частицы в потенциальном поле, когда временная зависимость волновой функции определяется экспоненциальным множителем вида  $\exp\{-iEt/\hbar\}$ , а ее пространственная зависимость определяется стационарным уравнением Шредингера

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (k^2 - u(x))\Psi(x) = 0, (1.1)$$

где

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad u(x) = 2mU(x)/\hbar^2 \quad (1.2)$$

и  $E$  и  $U(x)$  полная и потенциальная энергия частицы, соответственно.

Далее, для удобства, мы будем рассматривать потенциалы с асимптотическим поведением вида  $u(x) \rightarrow 0$ , когда  $x \rightarrow \pm\infty$ . Поэтому значения  $k^2 > 0$  будут соответствовать инфинитному движению частицы, а при значениях  $k^2 < 0$  характер движения будет финитный (см. Рис. I.1).

Для определенности, полагая, что  $k > 0$ , будем записывать решение уравнения (1.1) в виде следующей суммы:

$$\Psi(x) = a(x)\exp\{ikx\} + b(x)\exp\{-ikx\}. \quad (1.3)$$

Заметим, что представление решения в виде (1.3) фактически означает, что искомая функция  $\Psi(x)$  заменяется двумя другими неизвестными функциями  $a(x)$ ,  $b(x)$ , что в известной мере допускает определенную произвольность их выбора. Как будет показано ниже, функции  $a(x)$ ,  $b(x)$  всегда могут быть выбраны таким образом, чтобы производная волновой функции в любой точке пространства принимала вид:

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ik[a(x)\exp\{ikx\} - b(x)\exp\{-ikx\}] \quad (1.4)$$

для произвольно меняющейся от координаты  $x$  функции  $u(x)$ . На первый взгляд может показаться наделение функций  $a(x)$ ,  $b(x)$  (1.3) связью,

обеспечивающей для производной вид (1.4), не представляется возможным и что подобное может иметь место только лишь в областях с нулевым значением потенциала.

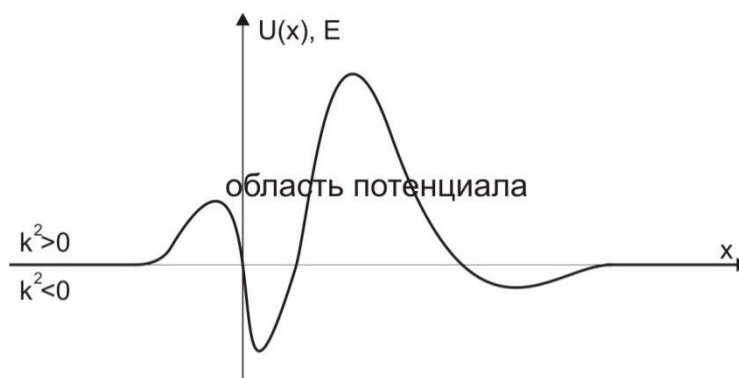


Рис. I.1 Области значений энергий для финитного и инфинитного движения.

Как мы покажем ниже, свойство производной волновой функции принимать вид (1.4) может быть обеспечено всегда, причем оно никоим образом не зависит от вида асимптотических условий налагаемых на волновую функцию. Представление волновой функции в виде (1.3), (1.4) позволяет ее отождествление со столбцом из элементов в виде амплитудных функций:

$$\Psi(x, k) \equiv \begin{pmatrix} a(x, k) \\ b(x, k) \end{pmatrix}, (1.5)$$

где верхний элемент определяет амплитуду волны распространяющейся слева на право, а нижний элемент определяет амплитуды для волны, распространяющейся в обратном направлении.

Для доказательства вышесказанного, воспользовавшись (1.3), (1.4) введем следующие две функции

$$a(x) = \frac{1}{2} \left[ \Psi(x) - \frac{i}{k} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \exp\{-ikx\}, (1.6)$$

$$b(x) = \frac{1}{2} \left[ \Psi(x) + \frac{i}{k} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] \exp\{ikx\}. (1.7)$$

Используя (1.6), (1.7) легко увидеть, что волновая функция выражается посредством функций формулой (1.3), а ее производная формулой (1.4).

Для представления  $d\Psi(x)/dx$  посредством  $a(x)$ ,  $b(x)$  рассмотрим производные первого порядка по переменной  $x$  равенств (1.6) и (1.7):

$$\frac{da(x)}{dx} = -\frac{i}{2k} \left[ k^2\Psi(x) + \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right] \exp\{-ikx\}, \quad (1.8)$$

$$\frac{db(x)}{dx} = \frac{i}{2k} \left[ k^2\Psi(x) + \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} \right] \exp\{ikx\}. \quad (1.9)$$

Определяя из уравнения (1.1) производную второго порядка волновой функции  $d^2\Psi(x)/dx^2$ , с последующей подстановкой в(1.8), (1.9) и учитывая (1.3) для функций  $a(x)$ ,  $b(x)$  получим следующую систему из двух однородных линейных дифференциальных уравнений первого порядка [45-46]:

$$\frac{da(x)}{dx} = -\frac{i u(x)}{2k} a(x) - \frac{i u(x)}{2k} b(x) \exp\{-i2kx\}, \quad (1.10)$$

$$\frac{db(x)}{dx} = \frac{i u(x)}{2k} b(x) + \frac{i u(x)}{2k} a(x) \exp\{i2kx\}. \quad (1.11)$$

Ниже, мы по мере необходимости, будем записывать функции  $a(x)$ ,  $b(x)$  с указанием из зависимости от волнового числа  $k$ , т.е. в виде  $a_k(x)$ ,  $b_k(x)$  или  $a(x,k)$ ,  $b(x,k)$ , тем самым, подчеркивая его важность как основного параметра определяющего характер волнового поля.

Как следует из полученного результата, для произвольной пары функций  $a(x)$ ,  $b(x)$ , удовлетворяющей системе уравнений (1.10), (1.11), составленная из них согласно формуле (1.3) функция удовлетворяет уравнению Шредингера (1.1). Данное утверждение верно всегда, вне зависимости от того, какому начальному или граничному условию удовлетворяют функции  $a(x)$ ,  $b(x)$ .

Из(1.10), (1.11) непосредственно следует следующее равенство:

$$\frac{da(x)}{dx} \exp\{ikx\} + \frac{db(x)}{dx} \exp\{-ikx\} = 0. \quad (1.12)$$

Используя (1.12), легко увидеть, что производная волновой выражается посредством функций  $a(x)$ ,  $b(x)$  согласно формуле (1.4), а условие сохранения

плотности потока вероятностей в случае реального потенциала будет выглядеть следующим образом:

$$\Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} = a(x)a^*(x) - b(x)b^*(x) = \text{const}, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где знак  $*$  означает комплексно сопряженная функция.

Важно отметить, что вывод формул (1.10), (1.11) не предполагал ограничений на асимптотическое поведение волновой функции. Из этого, в частности, следует, что представление волновой функции согласно формулам (1.3), (1.4) возможно всегда, вне зависимости от ее асимптотического поведения.

## §2. Амплитудные функции $a(x)$ , $b(x)$

Далее мы будем называть функции  $a(x)$ ,  $b(x)$  амплитудными функциями и чтобы оправдать это название обсудим связь граничных условий решения системы уравнений (1.10), (1.11), с тем или иным асимптотическим поведением волновой функции. Для этого рассмотрим инфинитное движение квантовой частицы в поле одномерного потенциала, достаточно быстро стремящегося к нулю при  $x \rightarrow +\infty$  и  $x \rightarrow -\infty$ . Асимптотическое поведение волновой функции в наиболее общей форме имеет вид:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_1 \exp\{ikx\} + B_1 \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2 \exp\{ikx\} + B_2 \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно (1.14) при условии  $k > 0$ , величины  $A_1, B_2$  являются амплитудами сходящихся к потенциалу волн, а  $A_2, B_1$  амплитудами расходящихся волн.

Волновая функция может считаться однозначно определенной во всем пространстве, если произвольные две из четырех величин  $A_1, B_1, A_2, B_2$  являются наперед заданными постоянными. Говоря иначе, волновая функция



определяется с точностью до двух произвольных постоянных. Заданными могут являться следующие пары  $(A_1, B_1)$ ,  $(A_2, B_2)$ ,  $(A_1, B_2)$ ,  $(A_2, B_1)$ . При этом каждой заданной паре будет соответствовать своя искомая пара. Для записанной выше очередности пар заданных амплитуд искомыми будут следующие пары  $(A_2, B_2)$ ,  $(A_1, B_1)$ ,  $(A_2, B_1)$ ,  $(A_1, B_2)$ , соответственно. Во всех четырех случаях между заданными и искомыми величинами существует линейная связь. Если заданными являются амплитуды по одну сторону, то их связь с амплитудами по другую сторону потенциала осуществляется посредством так называемой матрицы переноса или трансфер матрицей (transfermatrix):

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Для случаев, когда заданными являются амплитуды сходящихся, а искомыми расходящихся волн, т.е по разные стороны потенциала, то связь между ними осуществляется посредством, так называемой, матрицы рассеяния (scatteringmatrix):

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Выяснение свойств трансфер матрицы  $\hat{T}$  и матрицы рассеяния  $\hat{S}$  будет произведено ниже, однако, уже на данном этапе ясно, что знание одной из матриц, однозначным образом определяет другую. Заметим, что приведенное выше определение матрицы рассеяния не является единственно возможной.  $\hat{S}$  матрицу можно определить четырьмя различными способами. Вообще говоря, сказанное в полной мере можно отнести также к определению трансфер матрицы. Очень часто с  $\hat{S}$  матрицей ассоциируют матрицу, обеспечивающую связь:

$$\begin{pmatrix} B_2 \\ A_1 \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} B_1 \\ A_2 \end{pmatrix}.$$

Ниже, мы будем  $\hat{S}$  матрицу определять согласно (1.14).

Как следует из **Ошибка! Закладка не определена.** для асимптотического поведения волновой функции можно записать:

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ik \begin{cases} A_1 \exp\{ikx\} - B_1 \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2 \exp\{ikx\} - B_2 \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, (1.4) также имеем:

$$\Psi(x) = \begin{cases} a(-\infty) \exp\{ikx\} + b(-\infty) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ a(+\infty) \exp\{ikx\} + b(+\infty) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (1.15)$$

и

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ik \begin{cases} a(-\infty) \exp\{ikx\} - b(-\infty) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ a(+\infty) \exp\{ikx\} - b(+\infty) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (1.16)$$

Сравнивая **Ошибка! Закладка не определена.** с **Ошибка! Закладка не определена.**, а также **Ошибка! Закладка не определена.** с **Ошибка! Закладка не определена.**, получим следующую систему из четырех уравнений:

$$A_1 \exp\{ikx\} + B_1 \exp\{-ikx\} = a(-\infty) \exp\{ikx\} + b(-\infty) \exp\{-ikx\}, \quad (1.17)$$

$$A_1 \exp\{ikx\} - B_1 \exp\{-ikx\} = a(-\infty) \exp\{ikx\} - b(-\infty) \exp\{-ikx\}, \quad (1.18)$$

$$A_2 \exp\{ikx\} + B_2 \exp\{-ikx\} = a(+\infty) \exp\{ikx\} + b(+\infty) \exp\{-ikx\}, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$A_2 \exp\{ikx\} - B_2 \exp\{-ikx\} = a(+\infty) \exp\{ikx\} - b(+\infty) \exp\{-ikx\}. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Из данных уравнений непосредственно следует, что

$$A_1 = a(-\infty), \quad B_1 = b(-\infty), \quad A_2 = a(+\infty), \quad B_2 = b(+\infty). \quad (1.19)$$

Основываясь на вышеизложенном, а также сравнивая (1.14) с (1.3), легко увидеть какие условия интегрирования системы уравнений (1.10), (1.11) приводят к требуемому асимптотическому поведению для волновой функции. Так, интегрирование системы (1.10), (1.11) при условии, что

$$a(x \rightarrow -\infty) = A_1, \quad b(x \rightarrow -\infty) = B_1, \quad (1.20)$$

означает, что для получаемой из (1.3) волновой функции фиксированными будут амплитуды встречных волн распространяющихся левее потенциала. Когда интегрирование производится согласно условию

$$a(x \rightarrow +\infty) = A_2, \quad b(x \rightarrow +\infty) = B_2,$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

то для волновой функции фиксированным оказываются амплитуды встречных волн по правую сторону потенциала. Если требуется получить волновую функцию с заданными амплитудами для сходящихся к потенциалу волн, то систему (1.10), (1.11) следует интегрировать при условии, что

$$a(x \rightarrow -\infty) = A_1, \quad b(x \rightarrow +\infty) = B_2. \quad (1.21)$$

И наконец, условие, приводящие к волновой функции с заданными амплитудами для расходящихся волн имеет вид

$$a(x \rightarrow +\infty) = A_2, \quad b(x \rightarrow -\infty) = B_1. \quad (1.22)$$

Как следует из (1.20) и (1.26), при заданных амплитудах встречных волн по одну сторону потенциала, условия, налагаемые на систему уравнений для функций  $a(x)$ ,  $b(x)$  (1.10), (1.11) являются начальными. Когда, заданными являются амплитуды встречных волн по разные стороны потенциала, то согласно (1.21), (1.22) задача нахождения  $a(x)$ ,  $b(x)$  из (1.10), (1.11) является граничной.

Из (1.20) - (1.22) следует, что значения функций  $a(x)$ ,  $b(x)$  в  $+\infty$  и  $-\infty$  следует интерпретировать как амплитуды волн распространяющихся, соответственно в положительном и отрицательном направлениях. Как будет показано ниже, данное утверждение оказывается верным и для каждой внутренней точки  $x$ , и основывается оно на том, что при определении  $\Psi(x)$  на основе (1.3) и (1.10), (1.11) непрерывность производной волновой функции обеспечивается автоматически.

В конце отметим, что проведенное выше обсуждение связи условий налагаемых на функции  $a(x)$ ,  $b(x)$  с асимптотическим поведением волновой

функции относилось к случаю инфинитного движение. Что касается финитного движения, то исследование данного вопроса требует отдельного рассмотрения.

### §3. О размерности волновой функции непрерывного спектра

Одним из базовых положений квантовой механики является условие информированности волновой функции, которое, как известно, играет ключевую роль при описании вероятностного характера проявления свойств различных квантово-механических систем. Так, в зависимости от характера движения, происходит ли оно в конечной или бесконечной области пространства, волновая функция должна быть нормирована или на единицу или на delta-функцию, соответственно. Наше рассмотрение мы проводим для потенциала с нулевыми значениями на бесконечностях.

Очень часто, при рассмотрении одномерного стационарного квантово-механического движения место энергетической зависимости волновой  $\Psi_E(x)$ , отмечают ее зависимость от величины импульса  $p$  или от волнового числа  $k$ :  $\Psi_p(x)$ ,  $\Psi_k(x)$ . Заметим, что, в общем случае, направления импульса и волнового числа, в отличие от их значения, при движении не сохраняются.

Вне зависимости от типа представления три вида волновых функций  $\Psi_E(x)$ ,  $\Psi_p(x)$  и  $\Psi_k(x)$  удовлетворяют одному и тому же уравнению;

$$\frac{d^2\Psi_{E,p,k}(x)}{dx^2} + (k^2 - u(x))\Psi_{E,p,k}(x) = 0, \text{ Ошибка! Закладка не определена.}$$

где

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.23)$$

Легко увидеть, что уравнение Шредингера не определяет размерность волновой функции неопределенной. Уравнение (1.29) определяет только лишь координатную зависимость. Следовательно, размерность  $\Psi(x)$  должна быть определена из другого условия, коим является условие нормировки.

Действительно, согласно данному условию в случае непрерывного спектра можем записать:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_E(x) \Psi_{E'}^*(x) dx = \delta(E - E'), \quad (1.24)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p(x) \Psi_{p'}^*(x) dx = \delta(p - p'), \quad (1.25)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x) \Psi_{k'}^*(x) dx = \delta(k - k').$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Заметим, что размерность, которую мы далее будем отмечать фигурными скобками,  $\delta$  функции есть обратная размерность ее аргумента ( $[\delta(x)] = 1/[x]$ ). Следовательно, для размерности волновой функции для каждого из представлений можем записать:

$$[\Psi_E(x)] = 1/[\sqrt{Ex}],$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$[\Psi_p(x)] = 1/[\sqrt{px}],$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$[\Psi_k(x)] = 1/[\sqrt{kx}]. \quad (1.26)$$

Как видно из последнего равенства в  $k$  представлении волновая функция является величиной безразмерной.

Запишем волновую функцию непрерывного спектра посредством амплитудных функций (см. (1.3)), указывая при этом тип представления:

$$\Psi_{E,p,k}(x) = a_{E,p,k}(x) \exp\{ikx\} + b_{E,p,k}(x) \exp\{-ikx\}. \quad (1.27)$$

Из данного равенства однозначно вытекает, что размерности волновой функции и амплитудных функций совпадают;

$$[a_E(x)] = [b_E(x)] = [\Psi_E(x)],$$

$$[a_p(x)] = [b_p(x)] = [\Psi_p(x)],$$

$$[a_k(x)] = [b_k(x)] = [\Psi_k(x)].$$

Запишем также следующие очевидные равенства:

$$\delta(E - E') dE = \delta(p - p') dp = \delta(k - k') dk ,$$

из которых, в частности, следует, что

$$\delta(E - E') = \delta(p - p') \frac{dp}{dE} = \delta(k - k') \frac{dk}{dE}.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, а также **Ошибка! Закладка не определена.**-**Ошибка! Закладка не определена.** можем записать:

$$\Psi_E(x) = \sqrt{\frac{dk}{dE}} \Psi_k(x), \quad \Psi_p(x) = \sqrt{\frac{dE}{dp}} \Psi_E(x), \quad \Psi_k(x) = \sqrt{\frac{dp}{dk}} \Psi_p(x). \quad \text{Ошибка!}$$

**Закладка не определена.**

Воспользовавшись **Ошибка! Закладка не определена.** можем записать:

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1.28)$$

$$p(E) = \sqrt{2mE}, \quad p(k) = \hbar k, \quad (1.29)$$

$$k(E) = \sqrt{2mE} / \hbar, \quad k(p) = p / \hbar, \quad (1.30)$$

из которых легко определить:

$$\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}, \quad \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dk} = \hbar.$$

Используя данные равенства из(1.30) можем записать

$$\Psi_E(x) = \sqrt{\frac{m}{2E\hbar^2}} \Psi_k(x), \quad \Psi_p(x) = \sqrt{\frac{p}{m}} \Psi_E(x), \quad \Psi_k(x) = \sqrt{\hbar} \Psi_p(x). \quad (1.31)$$

Данные формулы определяют связь между размерностями волновой функции, определенными в различных представлениях.

Хорошо известно, что для случая свободного движения в представление волнового числа, нормированная на  $\delta(k - k')$  функцию волновая функция имеет вид:

$$\Psi_k(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \exp\{ikx\}. \quad (1.32)$$

Используя (1.32) для функций  $\Psi_p(x)$ ,  $\Psi_E(x)$  можем записать:

$$\Psi_p(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \exp\{ipx/\hbar\}, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$\Psi_E(x) = \sqrt{\frac{m}{2E}} \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left\{ i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right\}.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.** для первых двух случаев постоянная нормировки не зависит от индекса представления, в то время как в последнем случае энергетического представления это не так. Далее мы будем использовать только волновые функции в  $k$  представлении.

В конце заметим, что как следует из условия нормировки волновой функции состояний дискретного спектра;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_m^*(x) dx = \delta_{nm},$$

то в данном случае размерность волновой функции является однозначной и определяется как отрицательная степень корня квадратного размерности длины:  $[\varphi_n(x)] = [x]^{-1/2}$ .

#### **§4. Волновая функция инфинитного движения как суперпозиция расходящихся и сходящихся волн**

Будем рассматривать волновую функцию  $\Psi(x)$ , а также функции  $a(x)$ ,  $b(x)$  как функции волнового числа  $k$  (см. (1.3));

$$\Psi(x, k) = a(x, k) \exp\{ikx\} + b(x, k) \exp\{-ikx\}.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Для определенности предположим, что оно является сходящимся решением волнового уравнения (1.1), так что заданными для него могут считаться вид функций  $a(x, k)$  и  $b(x, k)$  при  $x \rightarrow -\infty$  и  $x \rightarrow +\infty$ , соответственно;

$$a(-\infty) = A_1, \quad b(+\infty) = B_2. \quad (1.33)$$

Согласно (1.33) мы предполагаем, что асимптотический вид амплитудных функций  $a(x, k)$  и  $b(x, k)$  в  $-\infty$  и  $+\infty$ , соответственно, не зависит от  $k$ . Однако это вовсе не означает, что данная зависимость у функций  $a(x, k)$  и  $b(x, k)$  в  $+\infty$  и  $-\infty$ , соответственно, отсутствует (см. выше).

Докажем теперь, что функция  $\Psi(x, -k)$ , получающаяся заменой в (1.47)  $k$  на  $-k$ , т.е. функция

$$\Psi(x, -k) = a(x, -k) \exp\{-ikx\} + b(x, -k) \exp\{ikx\}$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

также является решением уравнения Шредингера;

$$\frac{d^2\Psi(x, \pm k)}{dx^2} + (k^2 - u(x))\Psi(x, \pm k) = 0.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Далее мы будем называть решение  $\Psi(x, -k)$  сопряженным по отношению к  $\Psi(x, k)$  решением уравнения Шредингера.

Используя уравнения **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** простой заменой  $k$  на  $-k$  для функций  $a(x, -k)$  и  $b(x, -k)$  можем получить следующую систему уравнений:

$$\frac{da(x, -k)}{dx} = \frac{i u(x)}{2k} a(x, -k) + \frac{i u(x)}{2k} b(x, -k) \exp\{i2kx\},$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$\frac{db(x, -k)}{dx} = -\frac{i u(x)}{2k} b(x, -k) - \frac{i u(x)}{2k} a(x, -k) \exp\{-i2kx\}. \quad (1.34)$$

Сравнивая данные уравнения с уравнениями **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.**, легко увидеть, что пара функций  $a(x, -k)$ ,  $b(x, -k)$  удовлетворяет то же самой паре уравнений, что и пара функций  $a(x, k)$ ,  $b(x, k)$ . Действительно обозначая

$$a(x, -k) = b(x, k) \text{ и } b(x, -k) = a(x, k) \quad (1.35)$$

легко увидеть, что система уравнений **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** переходит в **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** Как следует из (1.33), а



также (1.35), если решать систему уравнений **Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена.** с граничным условием

$$a(+\infty) = A_1, \quad b(-\infty) = B_2, \quad (1.36)$$

то ее решение, т.е. будет определять функцию  $\Psi(x, -k)$ .

Из вышесказанного следует, что функция  $\Psi(x, -k)$  является решением уравнения **Ошибка! Закладка не определена.**, причем для нее заданными являются величины амплитуд расходящихся волн (см. (1.36)), в то время как для решения  $\Psi(x, k)$  заданными являются амплитуды сходящихся волн (см. (1.33)). Заметим, что амплитуды сходящейся и расходящейся волн решения  $\Psi(x, k)$ , совпадают с амплитудами расходящейся и сходящейся волн решения  $\Psi(x, -k)$ , соответственно. Отметим также, что в случае реального потенциала, для волновой функции замена знака волнового числа равносильна действию комплексного сопряжения, т.е.  $\Psi(x, -k) = \Psi^*(x, k)$ .

Далее мы будем рассматривать сходящиеся и расходящиеся решения уравнения Шредингера в наиболее общей форме, когда значения заданных для их определения амплитуд отличны друг от друга. Для отмеченных решений для волновой функции будем применять обозначения  $\Psi(x, k) \equiv \Psi^+(x, k)$  и  $\Psi(x, k) \equiv \Psi^-(x, k)$ , соответственно. В случае сходящегося решения будем принимать, что

$$a(x \rightarrow -\infty) = a_0^+, \quad b(x \rightarrow +\infty) = b_0^+, \quad (1.37)$$

а для расходящегося решения

$$a(x \rightarrow +\infty) = a_0^-, \quad b(x \rightarrow -\infty) = b_0^-, \text{ **Ошибка! Закладка не определена.**}$$

где  $a_0^+$ ,  $b_0^+$  и  $a_0^-$ ,  $b_0^-$  являются произвольными постоянными.

Заметим, что согласно **Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена.**, когда  $a_0^+ = b_0^-$  и  $a_0^- = b_0^+$  имеем  $\Psi^+(x, k) = \Psi^-(x, -k)$ . Ясно также, что в случае отсутствия рассеивающего потенциала ( $u(x) = 0$  для всех  $x$ ) решения  $\Psi^+(x, k)$ ,  $\Psi^-(x, k)$  имеют вид:

$$\Psi^+(x) = \Psi_0^+(x) = a_0^+ \exp\{ikx\} + b_0^+ \exp\{-ikx\}, \quad (1.38)$$

$$\Psi^-(x) = \Psi_0^-(x) = a_0^- \exp\{ikx\} + b_0^- \exp\{-ikx\}. \quad (1.39)$$

Рассмотрим потенциала произвольного вида, спадающий к нулю  $u(x) \rightarrow 0$  когда  $x \rightarrow \pm\infty$  (см. Рис. I.1). Несложно показать, что при условии (1.37) система дифференциальных уравнений **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** эквивалентна следующему интегральным уравнений:

$$a(x) = a_0^+ - \int_{-\infty}^x \frac{i u(x')}{2k} \Psi^+(x') \exp\{-ikx'\} dx', \quad (1.40)$$

$$b(x) = b_0^+ - \int_x^{+\infty} \frac{i u(x')}{2k} \Psi^+(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad (1.41)$$

Используя (1.38) из (1.40), (1.41) можем записать:

$$\begin{aligned} \Psi^+(x) = & \Psi_0^+(x) - \exp\{ikx\} \int_{-\infty}^x \frac{i u(x')}{2k} \Psi^+(x') \exp\{-ikx'\} dx' - \\ & - \exp\{-ikx\} \int_x^{+\infty} \frac{i u(x')}{2k} \Psi^+(x') \exp\{ikx'\} dx'. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Полученный результат является не чем иным, как интегральным уравнением для волновой функции, асимптотическое поведение которой, согласно (1.37), содержит расходящиеся от потенциала волны

$$\Psi^+(x) \sim \begin{cases} a_0^+ \exp\{ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ b_0^+ \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

т.е. заданными для данной волновой функции являются сходящиеся к потенциалу волны.

Путем введения обозначения

$$G_0^{(+)}(x, x') = \frac{1}{2ik} \exp\{ik|x - x'|\}, \quad (1.43)$$

уравнение (1.42) может быть записано в более компактной форме

$$\Psi^+(x) = \Psi_0^+(x) + \int_{-\infty}^{\infty} u(x') G_0^{(+)}(x, x') \Psi^+(x') dx'. \quad (1.44)$$

Заметим, что функция двух переменных  $G_0^{(+)}(x, x')$  является сходящейся функцией Грина уравнения Шредингера для свободного движения:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] G_0^{(+)}(x, x') = \delta(x - x'). \quad (1.45)$$

Важно отметить, что результат (1.44) может быть также воспроизведен известным методом Лапласа для решения линейных неоднородных уравнений. Как известно, в этом случае, уравнение (1.1) рассматривается как неоднородное, с неоднородной частью  $-u(x)\Psi(x)$ . Изложенный здесь вывод, может рассматриваться как альтернативный к нему. Не затрагивая аспектов методологического характера, можно утверждать, что представленный вывод позволяет наиболее полным образом высветить физическое содержание интегрального уравнения. Действительно, умножая уравнение (1.40) на множитель  $\exp\{ikx\}$  легко увидеть, что волна  $a(x)\exp\{ikx\}$  является суперпозицией первичной волны  $a_0^+ \exp\{ikx\}$  с распространяющимися в положительном направлении вторичными волнами, образованными в точках  $x' < x$ . Аналогично, умножая (1.41) на  $\exp\{-ikx\}$  можно заметить, что волна  $b(x)\exp\{-ikx\}$  является наложением первичной волны  $b_0^+ \exp\{-ikx\}$  с распространяющимися в отрицательном направлении вторичными волнами, образованными в точках  $x' > x$ .

Физически представляется очевидным, что в образовании распространяющейся в положительном направлении волны  $a(x)\exp\{ikx\}$  никоим образом не могут принимать вторичные волны, возбужденные в интервале  $(x, +\infty)$ . Также как и в распространяющемся в отрицательном направлении волновом процессе  $b(x)\exp\{-ikx\}$  не могут участвовать вторичные волны, исходящие из точек интервала  $(-\infty, x)$ .

Рассмотрим теперь решение системы **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** при граничном условии (1.56),

когда амплитуды волн, распространяющихся в положительном и отрицательном направлениях, считаются теперь заданными в  $+\infty$  и  $-\infty$ , соответственно. При данном условии система уравнений для амплитудных функций равносильна следующим интегральным уравнениям:

$$a(x) = a_0^- + \int_x^{\infty} \frac{i u(x')}{2k} \Psi^-(x') \exp\{-ikx'\} dx', \quad \text{Ошибка! Закладка не}$$

**определена.**

$$b(x) = b_0^- + \int_{-\infty}^x \frac{i u(x')}{2k} \Psi^-(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad (1.46)$$

Воспользовавшись (1.47) и (1.65), (1.46) получим следующее интегральное уравнение для волновой функции:

$$\Psi^-(x) = \Psi_0^-(x) + \exp\{ikx\} \int_x^{\infty} \frac{i u(x')}{2k} \Psi^-(x') \exp\{-ikx'\} dx' +$$

$$+ \exp\{-ikx\} \int_{-\infty}^x \frac{i u(x')}{2k} \Psi^-(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad \text{Ошибка! Закладка не}$$

**определена.**

Согласно (1.39) данному интегральному уравнению удовлетворяет волновая функция, для которой заданными являются расходящиеся от потенциала волны

$$\Psi^-(x) \sim \begin{cases} a_0^- \exp\{ikx\}, & x \rightarrow +\infty, \\ b_0^- \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty. \end{cases}$$

Введя обозначение

$$G_0^{(-)}(x, x') = \frac{i}{2k} \exp\{-ik|x - x'|\}, \quad (1.47)$$

легко увидеть, что уравнение (1.67) может быть записано в виде

$$\Psi^-(x) = \Psi_0^-(x) + \int_{-\infty}^{\infty} u(x') G_0^{(-)}(x, x') \Psi^-(x') dx'. \quad (1.48)$$

Заметим, что функция  $G_0^{(-)}(x, x')$ , является расходящейся функцией Грина, также удовлетворяет волновому уравнению для свободного движения:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] G_0^{(-)}(x, x') = \delta(x - x'). \quad \text{Ошибка! Закладка не}$$

Согласно формулам (1.45) и (1.47) между сходящейся и расходящейся функциями Грина  $G_0^{(+)}(x, x')$  и  $G_0^{(-)}(x, x')$  существует связь:

$$G_0^{(-)}(x, x') = \left( G_0^{(+)}(x, x') \right)^*.$$

Следует заметить, что хотя, формально, вид уравнения (1.44) и (1.48) (I.2.15) имеют схожий вид, вместе с тем удовлетворяющие им волновые функции подчинены различным асимптотическим повелениям. В конце отметим также, что возможны также построение интегральных уравнений, когда заданными являются амплитуды волн по одну стороны потенциала. Однако построение данных уравнений, как с физической, так и с методологической точек зрения не представляет особой ценности.

## §5. Нормализация волновых функций непрерывного спектра для одномерного потенциала произвольного вида

Как известно волновая функция непрерывного спектра определяется с точностью до двух произвольных постоянных. Как было отмечено выше, в случае  $\Psi_1(x, k) = \Psi_k^+(x)$  заданными являются амплитуды сходящихся волн, а в случае  $\Psi_2(x, k) = \Psi_k^-(x)$  заданными являются амплитуды расходящихся волн;

$$\Psi_k^+(x) = \begin{cases} A_1^+ \exp\{ikx\} + B_1^-(k) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2^-(k) \exp\{ikx\} + B_2^+(k) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

и

$$\Psi_k^-(x) = \begin{cases} A_1^-(k) \exp\{ikx\} + B_1^+(k) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2^+(k) \exp\{ikx\} + B_2^-(k) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где заданными являются  $A_1^+$ ,  $B_2^+$  и  $B_1^-$ ,  $A_2^-$ . Далее функции  $\Psi_k^+(x)$ ,  $\Psi_k^-(x)$  рассматриваются сопряжёнными по отношению друг к другу:

$$A_1^+ = B_1^-, B_2^+ = A_2^- \quad (1.49)$$

и соответственно

$$B_1(k) = A_1(-k), A_2(k) = B_2(-k). \quad (1.50)$$

Рассмотрим следующее выражение, составленное из сходящегося и расходящегося решений, а также их производных:

$$J = \Psi_k^+(x) \frac{d\Psi_k^-(x)}{dx} - \Psi_k^-(x) \frac{d\Psi_k^+(x)}{dx}. \quad (1.51)$$

Используя (1.51) и **Ошибка! Закладка не определена.** можно показать, что  $dJ/dx = 0$  или, что то же самое, что

$$\Psi_k^+(x) \frac{d\Psi_k^-(x)}{dx} - \Psi_k^-(x) \frac{d\Psi_k^+(x)}{dx} = const. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

В случае реального потенциала данное равенство выражает условие сохранения плотности потока вероятности:

$$\Psi_k(x) \frac{d\Psi_k^*(x)}{dx} - \Psi_k^*(x) \frac{d\Psi_k(x)}{dx} = const,$$

где введено обозначение  $\Psi_k^+(x) = \Psi_k(x)$ .

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** и рассматривая  $\Psi_k^+(x) = \Psi(x, k)$  (см. (1.47)) из **Ошибка! Закладка не определена.** можно получить:

$$a(x, k)a(x, -k) + b(x, k)b(x, -k) = const. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Из данного равенства, в частности, следует, что

$$a(-\infty, k)a(-\infty, -k) + b(-\infty, k)b(-\infty, -k) = a(+\infty, k)a(+\infty, -k) + b(+\infty, k)b(+\infty, -k)$$

или

$$a(+\infty, k)a(+\infty, -k) - b(-\infty, k)b(-\infty, -k) = a(-\infty, k)a(-\infty, -k) - b(+\infty, k)b(+\infty, -k). \quad (1.52)$$

Подставляя из (1.71) и (1.49), (1.50) соответствующие асимптотические значения амплитудных функций в(1.52) получим:

$$A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+ = A_2(-k') A_2(k) + B_1(-k') B_1(k). \quad (1.53)$$

Заметим, что в случае реального потенциала (1.53) выражает равенство интенсивностей приходящихся к потенциалу и расходящихся от потенциала волн.

Ниже мы исследуем интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^+(x) \Psi_{k'}^-(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x, k) \Psi_2(x, k') dx, \quad (1.54)$$

в частности, его зависимость от постоянных  $A_1^+$ ,  $B_2^+$  и  $B_1^-$ ,  $A_2^-$ . В случае реального потенциала данный интеграл принимает вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1(x, k) \Psi_2(x, k) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x) \Psi_{k'}^*(x) dx.$$

Воспользуемся следующим очевидным условием

$$\int_{-L}^L \Psi_k^+(x) \Psi_{k'}^-(x) dx = \frac{1}{k'^2 - k^2} \left[ \Psi_{k'}^-(x) \frac{d\Psi_k^+(x)}{dx} - \Psi_k^+(x) \frac{d\Psi_{k'}^-(x)}{dx} \right] \Bigg|_{-L}^L. \text{Ошибка! Закладка}$$

не определена.

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.**, а также рассматривая большие значения  $L$ , для **Ошибка! Закладка не определена.** можем получить:

$$\int_{-L}^L \Psi_k^+(x) \Psi_{k'}^-(x) dx = f_1(k, k') \frac{\sin\{(k - k')L\}}{k - k'} + f_2(k, k') \frac{i \cos\{(k - k')L\}}{k - k'} + \text{Ошибка!}$$

$$+ f_3(k, k') \frac{\sin\{(k + k')L\}}{k + k'} + f_4(k, k') \frac{i \cos\{(k + k')L\}}{k + k'},$$

**Закладка не определена.**

где

$f_1(k, k') = A_2(-k')A_2(k) + B_1(-k')B_1(k) + A_1^+A_1^+ + B_2^+B_2^+$ , **Ошибка! Закладка не определена.**

$f_2(k, k') = A_2(-k')A_2(k) + B_1(-k')B_1(k) - A_1^+A_1^+ - B_2^+B_2^+$ , **Ошибка! Закладка не определена.**

$f_3(k, k') = A_2(-k')B_2^+ + B_1(-k')A_1^+ + A_1^+B_1(k) + B_2^+A_2(k)$ , **Ошибка! Закладка не определена.**

$f_4(k, k') = A_2(-k')B_2^+ + B_1(-k')A_1^+ - A_1^+B_1(k) - B_2^+A_2(k)$  **Ошибка! Закладка не определена.**

Здесь мы представили выражения для функций  $f_j(k, k')$  ( $j=1, 2, 3, 4$ ) для случая, когда сопряженных решений (см. (1.49), (1.50))

Для реальных значений  $k$  и  $k'$  выражение **Ошибка! Закладка не определена.** содержит быстро осциллирующие множители следующего вида:

$$\frac{\sin\{yL\}}{y}, \quad \frac{\cos\{yL\}}{y}, \text{ **Ошибка! Закладка не определена.**}$$

где  $y = k - k'$  или  $y = k + k'$ . Заметим, что обе функции  $\sin\{yL\}/y$  и  $\cos\{yL\}/y$  при условии  $L \rightarrow \infty$  всегда стремятся к нулю, если только  $y \neq 0$  (см. Рис. I.2).

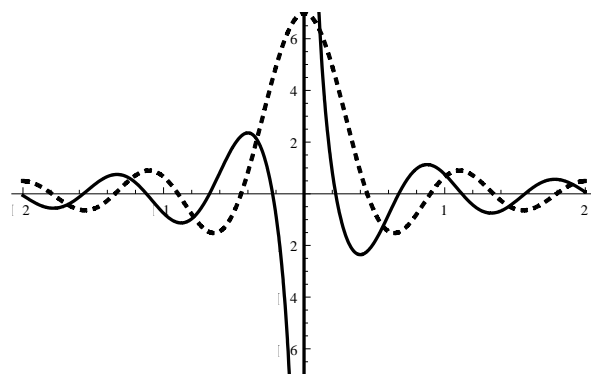


Рис. I.2 Функции  $\sin[yL]/y$  (пунктирная линия) и  $\cos[yL]/y$  (сплошная линия) для  $L = 7$ .



Функция  $\sin[yL]/y$  является четной функцией от  $y$  и при значении  $y=0$  когда  $L \rightarrow \infty$  она стремится к  $+\infty$ . Функция  $\cos[yL]/y$  является нечетной и ее значение при  $y=0$  является неопределенной. Когда  $y \rightarrow +0$  функция  $\cos[yL]/y$  стремится к  $+\infty$ , а для  $y \rightarrow -0$  данная функция стремится к  $-\infty$ . На основании следующих известных интегралов:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sin[yL]/y dy = \pi \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty} \cos[yL]/y dy = 0,$$

данные функции могут рассмотрены как обобщенные:

$$\sin[yL]/y = \pi\delta(y) \text{ и } \cos[yL]/y = 0. \quad (1.55)$$

Так как  $k, k' > 0$ , то величина  $y = k + k'$  не может быть равной нулю  $y \neq 0$  и следовательно в данном случае  $\sin[yL]/y = 0$  всегда. Из сказанного следует, что имеет смысл только рассмотрение случая  $y = k - k'$ ;

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(k - k')L}{k - k'} = \pi\delta(k - k'),$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\cos(k - k')L}{k - k'} = 0,$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(k + k')L}{k + k'} = 0,$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\cos(k + k')L}{k + k'} = 0.$$

Рассматривая разность  $dy = dk$  и используя **Ошибка! Закладка не определена.** для отдельных членов(1.82) можем записать:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L f_1(k, k') \frac{\sin\{(k - k')L\}}{k - k'} dk = \pi f_1(k', k'),$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L f_2(k, k') \frac{\cos\{(k - k')L\}}{k - k'} dk = 0, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L f_3(k, k') \frac{\sin\{(k + k')L\}}{k + k'} dk = 0, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L f_4(k, k') \frac{\cos\{(k + k')L\}}{k + k'} dk = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно **Ошибка! Закладка не определена.**-**Ошибка! Закладка не определена.**, в пределе  $L \rightarrow \infty$  отличным от нуля является только лишь первый член суммы **Ошибка! Закладка не определена.**, все остальные члены тождественно равны нулю. Следовательно для **Ошибка! Закладка не определена.**имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^+(x) \Psi_{k'}^-(x) dx = \pi f_1(k, k') \delta(k - k'). \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Рассматривая в **Ошибка! Закладка не определена.** и учитывая **Ошибка! Закладка не определена.** для  $f_1(k, k)$  можем записать:

$$f_1(k, k) = 2(A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+).$$

Подставляя данное выражение в **Ошибка! Закладка не определена.** получим:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k(x) \Psi_{-k'}(x) dx = 2\pi(A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+) \delta(k - k') \quad (1.56)$$

Данная формула выражает связь нормировки волновой функции с асимптотическим условием. Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.** данная связь не зависит от вида потенциала и выражается посредством суммы интенсивностей сходящихся к потенциалу волн.

Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.** если

$$(A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+) = \frac{1}{2\pi}, \quad (1.57)$$

то волновая функция будет нормирована на  $\delta$ -функцию. Таким образом, волновая функция непрерывного спектра вне зависимости от формы потенциала и вида асимптотического условия нормируется на  $\delta$ -функцию с точностью до определенного множителя. Действительно, согласно **Ошибка! Закладка не определена.** волновую функцию

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\Psi_k(x)}{\sqrt{A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+}}, \text{ Ошибка! Закладка не определена.}$$

где  $\Psi_k(x)$  имеет асимптотический вид **Ошибка! Закладка не определена.**, всегда нормирована на  $\delta$ -функцию;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(x) \psi_{-k'}(x) dx = \delta(k - k').$$

Как следует из **Ошибка! Закладка не определена.** и (1.57) следует, что для случая энергетического представления нормированная волновая функция выглядят следующим образом:

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{2E}} \frac{\Psi_E(x)}{\sqrt{A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+}},$$

а в импульсном представлении она имеет вид:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\Psi_p(x)}{\sqrt{A_1^+ A_1^+ + B_2^+ B_2^+}}$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_E(x) \psi_{-E'}(x) dx = \delta(E - E'), \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x) \psi_{-p'}(x) dx = \delta(p - p').$$

В конце отметим, что данные формулы имеют совершенно общий характер для комплексного потенциала произвольного вида.

## §6. Левая и правая задачи рассеяния

Процесс рассеяния частицы на потенциале соответствует инфинитному движению. Как известно в одномерном случае различают два типа рассеяния, когда волна падает на потенциал с лева на право (левая задача рассеяния) и когда волна падает с права налево (правая задача рассеяния). Каждому случаю соответствует своя волновая функция, для которых мы примем следующие обозначения:

$$\psi(x) = \psi_k^{left}(x) \text{ и } \psi(x) = \psi_k^{right}(x).$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Согласно **Ошибка! Закладка не определена.** обе функции  $\psi_k^{left}(x)$ ,  $\psi_k^{right}(x)$  являются сходящимися решениями волнового уравнения, т.к. в обеих случаях заданными являются амплитуды сходящиеся к потенциалу волн (см. Рис. 1.3). Асимптотические поведения волновых функций рассеяния имеют следующий вид:

$$\psi_k^{left}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp\{ikx\} + r(k)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ t(k)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

и

$$\psi_k^{right}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} s(k)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{-ikx\} + p(k)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

где  $r(k)$ ,  $t(k)$  и  $p(k)$ ,  $s(k)$  являются амплитудами отражения и прохождения для левой и правой задач рассеяния, соответственно. Отметим, что **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** являются асимптотическим условием для волновых функций рассеяния, если только  $k > 0$ .

В выражениях (1.98), (1.99) множитель  $1/\sqrt{2\pi}$  обеспечивает нормировку волновых функций рассеяния на  $\delta$ -функцию;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{left} \psi_{-k'}^{left}(x) dx = \delta(k - k'), \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{right} \psi_{-k'}^{right}(x) dx = \delta(k - k').$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Действительно, сравнивая (1.98), (1.99) с общим видом асимптотического поведения **Ошибка! Закладка не определена.** легко увидеть, что в случае левой задачи

$$A_1^+ = 1, B_2^+ = 0 \text{ и } A_2(k) = t(k), B_1(k) = r(k),$$

а для случая правой задачи

$$A_1^+ = 0, B_2^+ = 1 \text{ и } A_2(k) = p(k), B_1(k) = s(k). \quad (1.58)$$

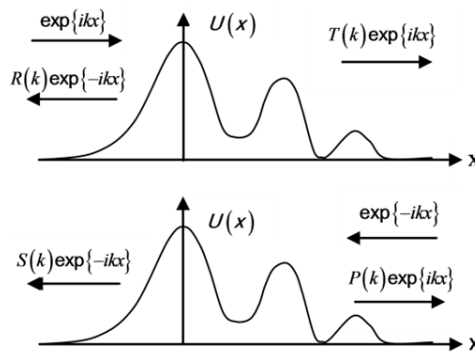


Рис. 1.3 Правая и левая задачи рассеяния

Легко убедиться, что в обоих случаях (1.101) и (1.58)обеспечивающее нормировку волновых функций условие (1.57).

Запишем асимптотическое поведение решений уравнения Шредингера сопряженных по отношению к волновым функциям рассеяния. Для этого произведём замену в(1.101), (1.58)  $k$  на  $-k$ ;

$$\psi_{-k}^{left}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \exp\{-ikx\} + r(-k)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ t(-k)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (59)$$

и

$$\psi_{-k}^{right}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} s(-k)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{ikx\} + p(-k)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (60)$$

Здесь, как и выше, следует рассматривать  $k > 0$ . Как отмечалось выше, в случае реального  $u(x)$ , между сопряжёнными решениями существует связь:

$$\psi_k^{left}(x) = (\psi_{-k}^{left}(x))^*, \quad \psi_k^{right}(x) = (\psi_{-k}^{right}(x))^*.$$

Ниже мы представляем простой и довольно прозрачный метод получения основных результатов теории трансфер матриц, а также обобщаем их для случая комплексного потенциала. Запишем вронскиан уравнения Шредингера для двух произвольных решений  $\psi_1(x, k)$  и  $\psi_2(x, k)$ :

$$W(x) = \psi_1(x, k) \frac{d\psi_2(x, k)}{dx} - \psi_2(x, k) \frac{d\psi_1(x, k)}{dx}. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Ниже мы будем записывать

$$W(x) = [\psi_1(x, k), \psi_2(x, k)]. \quad (1.61)$$

Хорошо известно, что величина вронскиан является постоянной  $W(x) = const$  и следовательно можем записать:

$$dW(x)/dx = 0.$$

Из последнего равенства, в частности, следует, что

$$W(x \rightarrow +\infty) - W(x \rightarrow -\infty) = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Будем рассматривать (1.107) для случаев, когда в (1.105) используются волновые функции рассеяния, а также сопряженные к ним решения уравнения Шредингера:

$$\psi_k^{left}(x), \psi_{-k}^{left}(x), \psi_k^{right}(x), \psi_{-k}^{right}(x).$$

В первом случае, мы рассматриваем

$$\psi_1(x, k) = \psi_k^{left}(x), \psi_2(x, k) = \psi_{-k}^{left}(x) \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

и в соответствии с (1.61) имеем

$$W(x) = [\psi_k^{left}(x), \psi_{-k}^{left}(x)]. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** для случая **Ошибка! Закладка не определена.** для значений вронскиана в бесконечностях можно получить:

$$W(x \rightarrow +\infty) = t(k)t(-k), \quad W(x \rightarrow -\infty) = 1 - r(k)r(-k). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Из **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** непосредственно следует, что

$$t(k)t(-k) + r(k)r(-k) = 1. \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Данное равенство в случае реального потенциала переходит в известную формулу  $t(k)t^*(k) + r(k)r^*(k) = 1$ , выражающую условие сохранения плотности потока вероятности для левой задачи рассеяния.

Далее рассмотрим случай, когда

$$\psi_1(x, k) = \psi_k^{\text{right}}(x), \quad \psi_2(x, k) = \psi_{-k}^{\text{right}}(x) \quad (1.62)$$

и

$$W(x) = [\psi_k^{\text{right}}(x), \psi_{-k}^{\text{right}}(x)]. \quad (1.63)$$

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** для асимптотических значений вронскиана **Ошибка! Закладка не определена.** получим:

$$W(x \rightarrow +\infty) = 1 - p(k)p(-k), \quad W(x \rightarrow -\infty) = s(k)s(-k)$$

и согласно **Ошибка! Закладка не определена.** можем записать:

$$s(k)s(-k) + p(k)p(-k) = 1. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Данное равенство в случае реального потенциала выражает условие сохранения плотности потока вероятности для правой задачи рассеяния.

Рассмотрим теперь случай, когда решениями уравнения Шредингера в(1.105) представляют собой

$$\psi_1(x, k) = \psi_k^{\text{right}}(x), \quad \psi_2(x, k) = \psi_k^{\text{left}}(x) \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

и соответственно

$$W(x) = [\psi_k^{right}(x), \psi_k^{left}(x)]. \quad (1.64)$$

Используя теперь (1.98), (59) для асимптотического поведения данного вронскиана можем записать:

$$W(x \rightarrow +\infty) = t(k), \quad W(x \rightarrow -\infty) = s(k). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно **Ошибка! Закладка не определена.** из **Ошибка! Закладка не определена.** имеем:

$$t(k) = s(k). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Данное равенство означает, что амплитуды рассеяния левой и правой задач рассеяния равны друг другу.

И наконец, последний четвёртый случай соответствует случаю, когда в качестве решений выбраны:

$$\psi_1(x, k) = \psi_{-k}^{right}(x), \quad \psi_2(x, k) = \psi_k^{left}(x) \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

и

$$W(x) = [\psi_{-k}^{right}(x), \psi_k^{left}(x)]. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

В этом случае асимптотические значения вронскиана определяются в соответствии с (1.98), (60).

$$W(x \rightarrow +\infty) = t(k)p(-k), \quad W(x \rightarrow -\infty) = -r(k)s(-k). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Из **Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена.** следует, что

$$p(-k)t(k) + r(k)s(-k) = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Данное равенство для случая реального потенциала принимает известный вид



$r(k) = -p(k)t(k)/s(k)$ . Согласно данному равенству амплитуды отражения и прохождения отличаются друг от друга фазовым множителем.

Покажем теперь, что волновые функции левой и правой задач рассеяния являются ортогональными функциями по отношению друг к другу. Для этого воспользуемся следующим очевидным равенством:

$$\int_{-L}^L \psi_k^{left}(x) \psi_{-k'}^{right}(x) dx = \frac{1}{k'^2 - k^2} \left[ \psi_{-k'}^{right}(x) \frac{d\psi_k^{left}}{dx} - \psi_k^{left} \frac{d\psi_{-k'}^{right}(x)}{dx} \right] \Big|_{-L}^L. \quad \text{Ошибка!}$$

**Закладка не определена.**

Используя (1.98), (1.99) можно показать, что

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L \psi_k^{left}(x) \psi_{-k'}^{right}(x) dx = 2\pi [p(-k')t(k) + r(k)s(-k')] \delta(k - k'). \quad (1.65)$$

Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.** данное выражение при  $k = -k'$  равно нулю. Следовательно имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^{left}(x) \psi_{-k'}^{right}(x) dx = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Данное равенство выражает ортогональность левой и правой функций рассеяния.

Таким образом, основываясь только лишь на свойстве вронскиана уравнения Шредингера, оставаясь постоянным во всем пространстве, мы для случая комплексного потенциала получили связи между амплитудами отражения и прохождения левой и правой задач рассеяния. Данный результат является обобщением хорошо известных результатов для случая реального потенциала.

## ГЛАВА II.

### МЕТОД УСЕЧЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА И ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ

Первая глава данной работы, по своей сути, представляла собой обобщение многих известных результатов различных подходов, развитых для описания одномерного квантово-механического движения для случая комплексного потенциала. Как было показано выше, многие известные подходы, такие как метод матриц переноса, метод функции рассеяния, метод интегральных уравнений, метод амплитудных функций и т.д. тесно связаны, и их изложение может быть уместно в одну единую схему. Отправной точкой для проведенного рассмотрения, послужило представление волновой функции в виде суммы амплитудных функций с соответствующими экспоненциальными множителями (см. (1.3), (1.4)):

$$\Psi(x) = a(x)\exp\{ikx\} + b(x)\exp\{-ikx\}, (2.1)$$

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ik[a(x)\exp\{ikx\} - b(x)\exp\{-ikx\}].$$
 **Ошибка! Закладка не определена.**

Вместе с тем, существуют много других, различных модификаций отмеченных выше методов. Так, волновая функция и ее производная может быть рассмотрена в виде [47-49]:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}(a(x)\exp\{iS(x)\} + b(x)\exp\{-iS(x)\}),$$
 **Ошибка! Закладка не определена.**

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = i\sqrt{p(x)}(a(x)\exp\{iS(x)\} - b(x)\exp\{-iS(x)\}),$$
 **Ошибка! Закладка не определена.**

где  $S(x)$  является классическим действием

$$S(x) = \int_{-\infty}^x p(z) dz \text{ и } p(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))}.$$

Известным также может считаться рассмотрение волновой функции и ее производной в виде: [50-51]

$$\Psi(x) = a(x)\exp\{ip(x)x\} + b(x)\exp\{-ip(x)x\},$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ip(x)[a(x)\exp\{ip(x)x\} - b(x)\exp\{-ip(x)x\}].$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Во всех трех случаях, искомыми являются функции  $a(x), b(x)$ , и для каждого из случаев для данных функций получается своя система уравнений. Так, в случае **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** для  $a(x), b(x)$  получается система уравнений (1.10), (1.11). С формальной математической точки зрения все три вида формы поиска волновой функции являются эквивалентными, т.к. в конечном счете, во всех трех случаях искомая функция и ее производная выражаются посредством двух других функций. Однако, форма рассмотрения волновой функции **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** имеет одно преимущество по сравнению с двумя другими. Как будет показано ниже, в зависимости от постановки задачи (вида асимптотического условия, накладываемого на волновую функцию) в **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** значения  $a(x)$  и  $b(x)$  представляются амплитудами отражения и прохождения обеих задач рассеяния от частей потенциала левее и правее от точки  $x$ .

## §1. Матрица рассеяния и трансфер матрица одномерного комплексного потенциала произвольного вида

Представим волновую функцию, с асимптотическим поведением общего вида, в виде линейной комбинации волновых функций рассеяния:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 \exp\{ikx\} + B_1(k) \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ A_2(k) \exp\{ikx\} + B_2 \exp\{-ikx\}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.2)$$

и

$$\psi(x, k) = (v_l \psi_k^{left}(x) + v_r \psi_k^{right}(x)), \quad (2.3)$$

где  $v_l(k), v_r(k)$  произвольные постоянные, которые могут быть также зависимыми от  $k$ .

Используя (1.100), (1.125) легко увидеть, что если

$$v_l^2 + v_r^2 = 1, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

то данная волновая функция нормирована на  $\delta$  функцию;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, k) \psi(x, -k') dx = \delta(k - k'), \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где

$$\psi(x, -k) = (v_l \psi_{-k}^{left}(x) + v_r \psi_{-k}^{right}(x)). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Рассматривая  $\psi(x, k)$  когда  $x \rightarrow +\infty$  и  $x \rightarrow -\infty$ , и используя (2.3), (2.9),

легко увидеть, что

$$\psi(x, k) = \frac{1}{\sqrt{A_1^2 + B_2^2}} (A_1 \psi_k^{left}(x) + B_2 \psi_k^{right}(x)). \quad (2.4)$$

Используя асимптотический вид волновых функций рассеяния в бесконечностях (см. (1,98), (1,99)) **Ошибка! Закладка не определена.** можно получить

$$A_2(k) = t(k)A_1 + p(k)B_2. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$B_1(k) = r(k)A_1 + s(k)B_2. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Рассматривая **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** как систему линейных уравнений, можем написать;

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{S} = \begin{pmatrix} t(k) & p(k) \\ r(k) & s(k) \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Таким образом, мы получили явный вид матрицы рассеяния от параметров рассеяния, для случая комплексного потенциала. Он точно совпадает с видом  $\hat{S}$  матрицы для реального потенциала.

Воспользовавшись ((2.13), (2.14), легко определить также матрицу переноса или трансфер матрицу рассматриваемой задачи, определяющую связь между амплитудами волн по разные стороны слоя;

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad \hat{M} = \begin{pmatrix} t(k) - \frac{p(k)r(k)}{t(k)} & \frac{p(k)}{s(k)} \\ -\frac{r(k)}{s(k)} & \frac{1}{t(k)} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Используя связи между амплитудами рассеяния (1.111), (1.114), (1.118), , (1.122) трансфер матрица (2.6) может быть также записана в виде:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 1 & -r(-k) \\ t(-k) & t(-k) \\ -r(k) & 1 \\ s(k) & t(k) \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

или

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{s(-k)} & \frac{p(k)}{s(k)} \\ \frac{p(-k)}{s(-k)} & \frac{1}{s(k)} \end{pmatrix}. \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Далее мы примем для элементов трансфер матрицы следующие обозначения:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \alpha(k) & \beta(k) \\ \gamma(k) & \delta(k) \end{pmatrix}, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где

$$\alpha(k) = \delta(-k) = \frac{1}{s(-k)} = t(k) - \frac{p(k)r(k)}{t(k)},$$
$$\beta(k) = \frac{p(k)}{s(k)} = \frac{-r(-k)}{t(-k)}, \quad \gamma(k) = \frac{p(-k)}{s(-k)} = \frac{-r(k)}{s(k)}.$$

Легко проверить, что

$$\alpha(k)\delta(k) - \beta(k)\gamma(k) = 1, \quad (2.8)$$

т.е. детерминант трансфер матрицы равен единице, т.е. она является унимодулярной.

## **§2. Аппроксимация произвольного непрерывного потенциала посредством ультратонких прямоугольных потенциалов**

Для вычисления свойств отражения и прохождения непрерывного потенциала произвольного вида, очень часто прибегают к его аппроксимации посредством ультратонких прямоугольных потенциалов, когда профиль

получаемой таким образом системы в целом повторяет вид рассматриваемого потенциала. Основой такого метода служит известное свойство трансфер матриц, согласно которому трансфер матрица всей системы равна произведению трансфер матриц отдельных ее частей взятых в определенном порядке. Ясно, что огибающий систему профиль путем увеличения количества прямоугольных потенциалов может быть сколь угодно точно приближен к форме всего потенциала.

Для определенности, будем рассматривать потенциал, с резко очерченными границами, координаты которых мы для определенности будем обозначать посредством  $x_1, x_{N+1}$ , так что весь потенциал будет аппроксимирован с помощью  $N$  прямоугольных потенциалов, с границами в точках  $x_j, x_{j+1}$  и значением потенциала  $u_j = u(x_j)$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ).

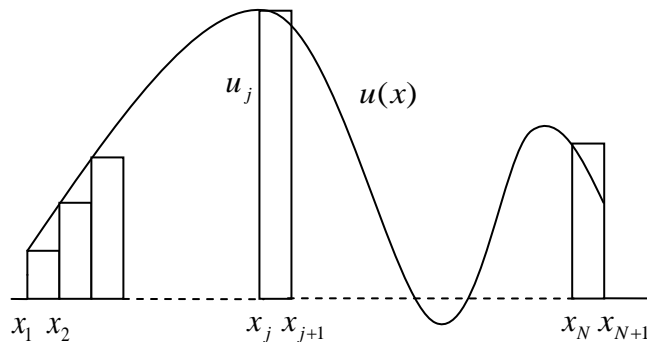


Рис. II.1 Непрерывный потенциал, аппроксимированный ультратонкими прямоугольными потенциалами.

Воспользовавшись уравнениями (1.10), (1.11) получим трансфер матрицу  $\Delta\hat{T}(x)$ , связывающую значения амплитудных функций в близких к друг другу точках  $x$  и  $x + \Delta x$ .

Ясно, что  $\Delta\hat{T}(x)$  будет трансфер матрицей прямоугольного потенциала малой толщины  $\Delta x$  и величины  $u(x)$  (постоянной внутри  $\Delta x$ ) с границами в точках  $x$  и  $x + \Delta x$ . Согласно определению трансфер матрицы (см.(2.6)), для произвольного решения она должна связывать амплитуды встречных волн в точках  $x$  и  $x + \Delta x$ , т.е.

$$\begin{pmatrix} a(x + \Delta x) \\ b(x + \Delta x) \end{pmatrix} = \Delta\hat{T}(x) \begin{pmatrix} a(x) \\ b(x) \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Рассматривая

$$da(x)/dx \approx (a(x + \Delta x) - a(x))/\Delta x, \quad db(x)/dx \approx (b(x + \Delta x) - b(x))/\Delta x$$

из (1.10), (1.11) можем записать

$$a(x + \Delta x) = \left(1 - \frac{i u(x) \Delta x}{2k}\right) a(x) - \frac{i u(x) \Delta x}{2k} b(x) \exp\{-i 2kx\}, \quad (2.10)$$

$$b(x + \Delta x) = \left(1 + \frac{i u(x) \Delta x}{2k}\right) b(x) + \frac{i u(x) \Delta x}{2k} a(x) \exp\{i 2kx\}. \quad (2.11)$$

Используя (2.10) - (2.11) для трансфер матрицы узкого слоя можем записать

$$\Delta\hat{T}(x) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i u(x) \Delta x}{2k} & \frac{-i u(x) \Delta x}{2k} \exp\{-i 2kx\} \\ \frac{i u(x) \Delta x}{2k} \exp\{i 2kx\} & 1 + \frac{i u(x) \Delta x}{2k} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

В соответствии с (2.12), для каждого прямоугольного потенциала (см. Рис. П.1) может быть рассмотрена своя трансфер матрица:



$$\Delta\hat{T}_j = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i u_j \Delta x}{2k} & \frac{-i u_j \Delta x}{2k} \exp\{-i 2k x_j\} \\ \frac{i u_j \Delta x}{2k} \exp\{i 2k x_j\} & 1 + \frac{i u_j \Delta x}{2k} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

где  $\Delta x_j = x_{j+1} - x_j$  - толщина  $j$ -ого прямоугольного потенциала и мы привели соответствующую формуле рассматривая  $\Delta x_j = \Delta x$  для всех  $j$ . Используя (2.13) между значениями амплитудных функций в точках  $x_j, x_{j+1}$  может быть установлена связь (см. (2.9)):

$$\begin{pmatrix} a(x_{j+1}) \\ b(x_{j+1}) \end{pmatrix} = \Delta\hat{T}_j \begin{pmatrix} a(x_j) \\ b(x_j) \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Из данного соотношения непосредственно следует, что

$$\begin{pmatrix} a(x_{N+1}) \\ b(x_{N+1}) \end{pmatrix} = \Delta\hat{T}_N \Delta\hat{T}_{N-1} \cdots \Delta\hat{T}_1 \begin{pmatrix} a(x_1) \\ b(x_1) \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Как было показано выше, амплитуды сходящихся к потенциалу и расходящихся от потенциала волн равны соответствующим асимптотическим значениям амплитудных функций (см. Глава I). Следовательно, можем записать:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(x_1) \\ b(x_1) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a(x_{N+1}) \\ b(x_{N+1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Из формул(2.15), (2.16) следует, что трансфер матрицу потенциала, аппроксимированного  $N$  прямоугольными потенциалами, можно представить в виде:

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{T}_N \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

где

$$\hat{T}_N = \Delta \hat{T}_N \Delta \hat{T}_{N-1} \cdots \Delta \hat{T}_2 \Delta \hat{T}_1 = \prod_{j=N}^1 \Delta \hat{T}_j \quad (2.18)$$

или

$$\hat{T}_N = \prod_{j=N}^1 \begin{pmatrix} 1 - \frac{i u_j \Delta x}{2k} & \frac{-i u_j \Delta x}{2k} \exp\{-i 2k x_j\} \\ \frac{i u_j \Delta x}{2k} \exp\{i 2k x_j\} & 1 + \frac{i u_j \Delta x}{2k} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Если устремить в (2.18) (см., также, (2.13)), то для трансфер матрицы исходного потенциала можем записать:

$$\hat{T} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \hat{T}_N. \quad (2.20)$$

Из равенства (2.18), очевидно, следует, что если система рассматривается как состоящая из нескольких частей, то трансфер матрица всей системы также равняется произведению трансфер матриц ее отдельных частей взятых справа налево. Так, если потенциал разбить на две части и обозначить трансфер матрицы первой (левой) и второй (правой) частей потенциала  $\hat{T}_1$ ,  $\hat{T}_2$ , то для трансфер матрицы всего потенциала можем записать  $\hat{T} = \hat{T}_2 \hat{T}_1$ .

Очень часто формула (2.18) используется в качестве базовой формулы для выполнения численных расчетов амплитуд отражения и прохождения потенциалов всевозможного вида. В частности, на ее основе задача определения амплитуд отражения и прохождения слоистой структуры из узких прямоугольных потенциалов может быть сведена к задаче решения некоторой системы разностных уравнений. Так, рассматривая количество прямоугольных потенциалов  $N$  как переменную величину с использованием формулы (2.18) можем записать:

$$\hat{T}_N = \Delta \hat{T}_N \hat{T}_{N-1}, \quad (2.21)$$

где  $\hat{T}_{N-1}$  является трансфер матрицей системы, состоящей только лишь из первых  $N-1$  прямоугольных потенциалов;

$$\hat{T}_{N-1} = \prod_{j=N-1}^1 \Delta \hat{T}_j. \quad (2.22)$$

В соответствии с общим видом трансфер матрицы(2.19), записанным для общего случая комплексного потенциала, для элементов трансфер матрицы слоистой структуры  $\hat{T}_N$  введем следующие обозначения:

$$\hat{T}_N = \begin{pmatrix} \alpha_N(k) & \beta_N(k) \\ \gamma_N(k) & \delta_N(k) \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Используя (2.13), (2.21) и (2.23) для определения элементов  $\alpha_N$ ,  $\beta_N$ ,  $\gamma_N$ ,  $\delta_N$  можем записать:

$$\begin{pmatrix} \alpha_N(k) & \beta_N(k) \\ \gamma_N(k) & \delta_N(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{i u_N \Delta x}{2k} & \frac{-i u_N \Delta x}{2k} \exp\{-i 2 k x_j\} \\ \frac{i u_N \Delta x}{2k} \exp\{i 2 k x_j\} & 1 + \frac{i u_N \Delta x}{2k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{N-1}(k) & \beta_{N-1}(k) \\ \gamma_{N-1}(k) & \delta_{N-1}(k) \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

где

$$\hat{T}_{N-1} = \begin{pmatrix} \alpha_{N-1}(k) & \beta_{N-1}(k) \\ \gamma_{N-1}(k) & \delta_{N-1}(k) \end{pmatrix}$$

является трансфер матрицей всего потенциала без последнего слоя.

Из матричного уравнения (2.24) можно получить следующие две системы из двух линейных разностных уравнений, причем первая система в качестве искомого содержит только величины  $\alpha_N$  и  $\gamma_N$ , а вторая  $\beta_N$  и  $\delta_N$ :

$$\alpha_N = \left(1 - \frac{i u_j \Delta x_j}{2k}\right) \alpha_{N-1} - \frac{i u_j \Delta x_j}{2k} \exp\{-i 2 k x_j\} \gamma_{N-1}, \quad (2.25)$$

$$\gamma_N = \left(1 + \frac{i u_j \Delta x_j}{2k}\right) \gamma_{N-1} + \frac{i u_j \Delta x_j}{2k} \exp\{i 2 k x_j\} \alpha_{N-1}, \quad (2.26)$$

с начальным условием

$$\alpha_0 = 1, \gamma_0 = 0 \quad (2.27)$$

и

$$\delta_N = \left(1 + \frac{i u_j \Delta x_j}{2k}\right) \delta_{N-1} + \frac{i u_j \Delta x_j}{2k} \exp\{i 2k x_j\} \beta_{N-1}, \quad (2.28)$$

$$\beta_N = \left(1 - \frac{i u_j \Delta x_j}{2k}\right) \beta_{N-1} - \frac{i u_j \Delta x_j}{2k} \exp\{-i 2k x_j\} \delta_{N-1}, \quad (2.29)$$

с начальным условием

$$\delta_0 = 1, \beta_0 = 0 \quad (2.30)$$

Заметим, что вид начальных условий (2.27) и (2.30) соответствует случаю отсутствия слоев;

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_0 \\ \gamma_0 & \delta_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_0 \\ \gamma_0 & \delta_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Используя полученные выше рекуррентные соотношения легко проследить переход

$$\alpha_N(k) = \delta_N(-k), \beta_N(k) = \gamma_N(-k), \quad (2.31)$$

который при реальных значениях  $u_j$  и  $k$  равносильно действию комплексного сопряжения  $\alpha_N(k) = \delta_N^*(k), \beta_N(k) = \gamma_N^*(k)$ .

Ясно, что хотя между решениями системы уравнений (2.25)-(2.27) и (2.28)-(2.30) существует простой переход и, в конечном счете, их решения равносильно вычислению произведения матриц (2.18). Вместе с тем, на их основе становится возможным получения явной зависимости элементов трансфер матрицы от параметров слоистой структуры  $\Delta x$  и  $u_j$ , ( $j=1, 2, \dots, N$ ).

Так, не вдаваясь детали соответствующих вычислений, из (2.25)-(2.30) можно получить

$$\delta_N(k) = 1 + \sum_{p=1}^N \sum_{1 \leq j_1 \dots < j_p} \frac{i u_{j_1}}{2k} \dots \frac{i u_{j_p}}{2k} \Delta x^p \prod_{l=1}^{p-1} (1 - \exp\{i2k(x_{l+1} - x_l)\}), \quad (2.32)$$

$$\beta_N(k) = - \sum_{p=1}^N \sum_{1 \leq j_1 \dots < j_p} \frac{i u_{j_1}}{2k} \dots \frac{i u_{j_p}}{2k} \Delta x^p \exp\{-2ikx_{j_p}\} \prod_{l=1}^{p-1} (1 - \exp\{i2k(x_{l+1} - x_l)\}). \quad (2.33)$$

Выражение для  $\alpha_N(k)$ ,  $\gamma_N(k)$  соответственно получаются из (2.32), (2.33), заменой  $k$  на  $-k$ . Устремляя в **Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена.**  $\Delta x \rightarrow 0$  и  $N \rightarrow \infty$ , так чтобы величина  $N\Delta x$  соответствовала области потенциала, можно осуществить переход между элементами трансфер матрицы аппроксимированного и гладкого потенциала (см.(2.19));

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta x \rightarrow 0}} \alpha_N(k) = \alpha(k), \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta x \rightarrow 0}} \beta_N(k) = \beta(k), \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta x \rightarrow 0}} \gamma_N(k) = \gamma(k), \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \Delta x \rightarrow 0}} \delta_N(k) = \delta(k). \text{Ошибка!}$$

**Закладка не определена.**

Несмотря на внешне кажущуюся сложность представленных для величин  $\alpha_N$ ,  $\beta_N$ ,  $\gamma_N$ ,  $\delta_N$  выражений (2.32), (2.33) они все же имеют довольно простую структуру, которую легко можно уяснить уже при значении  $N = 3$ . Так

$$\begin{aligned} \delta_3(k) = & 1 + \left[ \frac{i u_1}{2k} + \frac{i u_2}{2k} + \frac{i u_3}{2k} \right] \Delta x + \left[ \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_2}{2k} (1 - \exp\{i2k(x_2 - x_1)\}) + \right. \\ & \left. + \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_3}{2k} (1 - \exp\{i2k(x_3 - x_1)\}) + \frac{i u_2}{2k} \frac{i u_3}{2k} (1 - \exp\{i2k(x_3 - x_2)\}) \right] \Delta x^2 + \\ & + \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_2}{2k} \frac{i u_3}{2k} \Delta x^3 (1 - \exp\{i2k(x_2 - x_1)\})(1 - \exp\{i2k(x_3 - x_2)\}), \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\begin{aligned} \beta_3(k) = & - \left[ \frac{i u_1}{2k} \exp\{-2ikx_1\} + \frac{i u_2}{2k} \exp\{-2ikx_2\} - \frac{i u_3}{2k} \exp\{-2ikx_3\} \right] \Delta x \\ & - \left[ \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_2}{2k} \exp\{-2ikx_2\} (1 - \exp\{i2k(x_2 - x_1)\}) + \right. \\ & + \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_3}{2k} \exp\{-2ikx_3\} (1 - \exp\{i2k(x_3 - x_1)\}) + \\ & \left. + \frac{i u_2}{2k} \frac{i u_3}{2k} \exp\{-2ikx_3\} (1 - \exp\{i2k(x_3 - x_2)\}) \right] \Delta x^2 \\ & - \frac{i u_1}{2k} \frac{i u_2}{2k} \frac{i u_3}{2k} \Delta x^3 \exp\{-2ikx_3\} (1 - \exp\{i2k(x_2 - x_1)\})(1 - \exp\{i2k(x_3 - x_2)\}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Как видно из представленных выше выражений, элементы трансфер матрицы содержат в качестве слагаемых всевозможные произведения от величин  $i u_j \Delta x / 2k$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ), причем каждое такое произведение включает в себе определенный фазовый фактор, однозначным образом сочетающей в себе координаты соответствующих слоев. Заметим, что в случае  $\delta_3(k)$  фазовый фактор зависит только лишь от разности положений слоев  $x_n - x_m$  ( $n, m = 1, 2, \dots, N$  и  $n \neq m$ ) и остается неизменной при сдвиге рассеивающегося потенциала. В отличие от фазовых факторов в выражении  $\beta_N(k)$  помимо разностей  $x_n - x_m$ , содержат также экспоненты от координат отдельных слоев, причем сдвиг всех слоев системы на одинаковое расстояние (что то же самое, что сдвиг всего потенциала), приводит к появлению во всех слагаемых суммы одинакового фазового множителя.

Как непосредственно следует из (2.34), (2.35) в случае реального потенциала, когда волновое число  $k$  принимает чисто мнимое значение  $k = i\chi$ , то элемент трансфер матрицы

$$\alpha(i\chi), \beta(i\chi), \gamma(i\chi), \delta(i\chi)$$

являются действительными величинами. Данное обстоятельство является существенным при рассмотрении связанных состояний (см. ниже), основанном на аналитическом продолжении состояний непрерывного спектра.

### **§3. Волновые функции и спектральное уравнение связанных состояний для одномерного потенциала**

Важным частным случаем квантово-механического движения являются связанные состояния, которые описывают финитное движение частицы, при

котором, как известно, волновая функция спадает к нулю при удалении от некоторой области. Согласно вышесказанному, для связанных состояний

$$\Psi(x \rightarrow \pm\infty, k) \rightarrow 0. \quad (2.36)$$

Как следует из (2.1) и (2.36), если  $k$  реальная величина, то для связанных состояний функции  $a(x, k)$  и  $b(x, k)$  должны удовлетворять одному и тому же асимптотическому поведению;

$$a(x \rightarrow \pm\infty, k) = 0 \text{ и } b(x \rightarrow \pm\infty, k) = 0, \quad (2.37)$$

т.е. все амплитуды как для сходящихся, так и для расходящихся волн однозначным образом равны нулю:

$$a_0^+ = b_0^+ = a_0^- = b_0^- = 0.$$

Как легко убедиться, что в этом случае амплитудные функции и следовательно волновая функция тождественно равны нулю для всех точек пространства  $a(x, k) = 0$ ,  $b(x, k) = 0$  и  $\Psi(x, k) = 0$ .

Далее волновую функцию связанных состояний мы будем записывать как  $\Psi(x, k) \equiv \phi(x, k)$ . Рассмотрим случай, когда волновое число  $k$  принимает чисто мнимое значение  $k = i\chi$ , причем  $\chi > 0$ . В соответствии с этим, введем следующие обозначения:

$$\phi_\chi(x) = \phi(x, i\chi), \quad a_\chi(x) = a(x, i\chi), \quad b_\chi(x) = b(x, i\chi). \quad (2.38)$$

Согласно (2.1) и (2.38) имеем:

$$\phi_\chi(x) = a_\chi(x) \exp\{-\chi x\} + b_\chi(x) \exp\{\chi x\}, \quad (2.39)$$

где функции  $a_\chi(x)$ ,  $b_\chi(x)$  удовлетворяют системе уравнений:

$$\frac{da_\chi(x)}{dx} = -\frac{u(x)}{2\chi} a_\chi(x) - \frac{u(x)}{2\chi} b_\chi(x) \exp\{2\chi x\}, \quad (2.40)$$

$$\frac{db_{\chi}(x)}{dx} = \frac{u(x)}{2\chi} b_{\chi}(x) + \frac{u(x)}{2\chi} a_{\chi}(x) \exp\{-2\chi x\}. \quad (2.41)$$

Как видно из данной системы дифференциальных уравнений, для случая реального потенциала, она является реальной. Следовательно, если константы, фигурирующие в граничном условии к (2.40), (2.41) будут реальными, то функции  $a_{\chi}(x)$ ,  $b_{\chi}(x)$  также будут реальными.

Запишем асимптотическое поведение волновой функции в бесконечностях:

$$\phi_{\chi}(x \rightarrow -\infty) = a_{\chi}(-\infty) \exp\{-\chi x\} + b_{\chi}(-\infty) \exp\{\chi x\}, \quad (2.42)$$

$$\phi_{\chi}(x \rightarrow +\infty) = a_{\chi}(+\infty) \exp\{-\chi x\} + b_{\chi}(+\infty) \exp\{\chi x\}. \quad (2.43)$$

Легко увидеть, что в обеих асимптотиках решения присутствуют бесконечно возрастающие члены: в случае (2.42) это  $a_{\chi}(-\infty) \exp\{-\chi x\}$ , а в случае (2.43) это  $b_{\chi}(+\infty) \exp\{\chi x\}$ . Из вышесказанного следует, что для того чтобы  $\phi_{\chi}(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ , необходимо выполнение следующих условий:

$$a_{\chi}(-\infty) = 0, \quad b_{\chi}(+\infty) = 0, \quad (2.44)$$

в то время как величины  $a_{\chi}(+\infty)$  и  $b_{\chi}(-\infty)$  могут быть отличными от нуля:

$$a_{\chi}(+\infty) = a_{\chi}^+ \neq 0, \quad b_{\chi}(-\infty) = b_{\chi}^- \neq 0. \quad (2.45)$$

где  $a_{\chi}^+$ ,  $b_{\chi}^-$  постоянные величины.

Рассматривая в качестве граничного условия (2.44) и проведя интегрирование системы уравнений (2.40), (2.41) получим

$$a_{\chi}(x) = - \int_{-\infty}^x \frac{u(x')}{2\chi} \exp\{\chi x'\} \phi_{\chi}(x') dx', \quad (2.46)$$



$$b_{\chi}(x) = \int_x^{\infty} \frac{u(x')}{2\chi} \exp\{-\chi x'\} \phi_{\chi}(x') dx'. \quad (2.47)$$

Умножая первое уравнение на  $\exp\{-\chi x\}$ , второе на  $\exp\{\chi x\}$  получим интегральное уравнение для связанных состояний:

$$\phi_{\chi}(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} u(x') \frac{\exp\{-\chi|x-x'|\}}{2\chi} \phi_{\chi}(x') dx'. \quad (2.48)$$

Как видно одно является однородным и, следовательно, оно может иметь решение при определенном условии, накладываемом на значения  $\chi$ . Данное условие, как известно, называется спектральным уравнением, которому должен удовлетворять параметр  $\chi$ . Заметим также, что амплитуды вторичных волн исходящих из различных точек потенциала экспоненциальным образом спадают по мере удаления в бесконечности, т.е. когда  $|x-x'| \rightarrow \infty$ .

Используя (2.45), из (2.46) и (2.47) можем определить значения амплитуд функций  $a_{\chi}(x)$ ,  $b_{\chi}(x)$  в соответствующих асимптотиках:

$$a_{\chi}^{+} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x')}{2\chi} \exp\{\chi x'\} \phi_{\chi}(x') dx', \quad (2.49)$$

$$b_{\chi}^{-} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{u(x')}{2\chi} \exp\{-\chi x'\} \phi_{\chi}(x') dx'. \quad (2.50)$$

Здесь, как и в случае непрерывного спектра (см. (2.9)-(2.12)), между значениями функций  $a_{\chi}(x)$ ,  $b_{\chi}(x)$  в близких друг к другу точках  $x$  и  $x+\Delta x$  также может быть установлена связь. Действительно используя (2.40), (2.41) можем записать:

$$\begin{pmatrix} a_{\chi}(x+\Delta x) \\ b_{\chi}(x+\Delta x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{u(x)\Delta x}{2\chi} & \frac{-u(x)\Delta x}{2\chi} \exp\{2\chi x\} \\ \frac{u(x)\Delta x}{2\chi} \exp\{-2\chi x\} & 1 + \frac{u(x)\Delta x}{2\chi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\chi}(x) \\ b_{\chi}(x) \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Сравнивая матрицу в (2.51) с (2.12), легко увидеть, что она есть не что иное, как матрица  $\Delta\hat{T}(x, k)$ , когда волновое число  $k$  рассматривается чисто мнимым:  $i\chi$ . Из сказанного следует, что:

$$\begin{pmatrix} a_\chi(x + \Delta x) \\ b_\chi(x + \Delta x) \end{pmatrix} = \Delta\hat{T}(x, i\chi) \begin{pmatrix} a_\chi(x) \\ b_\chi(x) \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

Рассматривая потенциал как систему из соприкасающихся в точках  $x = j\Delta x$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) ультратонких слоев (см. выше) можем написать:

$$\begin{pmatrix} a_\chi(x_{N+1}) \\ b_\chi(x_{N+1}) \end{pmatrix} = \hat{T}_N(i\chi) \begin{pmatrix} a_\chi(x_1) \\ b_\chi(x_1) \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

где

$$\hat{T}_N(i\chi) = \prod_{j=1}^N \Delta\hat{T}(x_j, i\chi) \quad (2.54)$$

где

$$\Delta\hat{T}(x_j, i\chi) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{u_j \Delta x}{2\chi} & \frac{-u_j \Delta x}{2\chi} \exp\{2\chi x_j\} \\ \frac{u_j \Delta x}{2\chi} \exp\{-2\chi x_j\} & 1 + \frac{u_j \Delta x}{2\chi} \end{pmatrix}.$$

Используя (2.44), (2.45) легко увидеть, что в (2.53)

$$a_\chi(x_1) = 0, \quad b_\chi(x_1) = b_\chi^-, \quad a_\chi(x_{N+1}) = a_\chi^+, \quad b_\chi(x_{N+1}) = 0. \quad (2.55)$$

Далее мы будем обозначать  $\hat{T}_N(x, i\chi) = \hat{T}(i\chi)$  (2.54), предполагая при этом, что  $N \rightarrow \infty$  и  $\Delta x \rightarrow 0$ , так что их произведение стремится к некоторой величине длины, которая охватывает область потенциала;

$$\hat{T}(i\chi) = \begin{pmatrix} T_{11}(i\chi) & T_{12}(i\chi) \\ T_{21}(i\chi) & T_{22}(i\chi) \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

Используя (2.53), (2.55), (2.56) можем написать:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ b_{\chi}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(i\chi) & \beta(i\chi) \\ \delta(i\chi) & \alpha(-i\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\chi}^+ \\ 0 \end{pmatrix}.$$

из которого следует, что данного равенства:

$$0 = \alpha(i\chi)a_{\chi}^+, \quad b_{\chi}^- = \delta(i\chi)a_{\chi}^+. \quad (2.57)$$

Первое из данных равенств может быть выполнено, только лишь, если  $\alpha(i\chi) = 0$ . В свою очередь  $\alpha(i\chi) = 0$  может иметь место только для определенных значений  $\chi$ , которые мы будем обозначать  $\chi_n$ ;

$$\alpha(i\chi_n) = 0. \quad (2.58)$$

Ясно, что данное уравнение определяет спектр допустимых значений энергии, когда могут существовать связанные состояния. Таким образом, мы показали, что нули элемента  $T_{11}$  трансфер матрицы определяют спектр связанных состояний.

Как следует из (2.58), второе равенство (2.57), определяющее линейную связь между  $b_{\chi}^-$  и  $a_{\chi}^+$ , имеет смысл рассматривать только для допустимых значений  $\chi_n$ ;

$$b_n = T_{21}(i\chi_n)a_n, \quad (2.59)$$

где мы для  $\chi = \chi_n$  ввели обозначения

$$b_n = b_{\chi}^-, \quad a_n = a_{\chi}^+. \quad (2.60)$$

Волновую функцию  $\phi_{\chi}(x)$  и функции  $a_{\chi}(x)$ ,  $b_{\chi}(x)$  (см. (2.39)) связанных состояний, мы также будем нумеровать индексом  $n$ :

$$\phi_n(x) = a(x, \chi_n) \exp\{-\chi_n x\} + b(x, \chi_n) \exp\{\chi_n x\}, \quad (2.61)$$

которая удовлетворяет

$$\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2} + (-\chi_n^2 - u(x))\phi_n(x) = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно принятым обозначениям:

$$a(x \rightarrow \infty, \chi_n) = a_n \text{ и } b(x \rightarrow -\infty, \chi_n) = b_n. \quad (2.62)$$

Заметим, что при  $\chi_n$ , которые, как было отмечено выше определяются из спектрального уравнения (2.58), значений функций  $a(x, \chi_n)$  и  $b(x, \chi_n)$  в обратных к (2.62) асимптотиках принимают нулевые значения;

$$a(x \rightarrow -\infty, \chi_n) = 0 \text{ и } b(x \rightarrow +\infty, \chi_n) = 0. \quad (2.63)$$

Выясним теперь связь постоянных  $a_n$ ,  $b_n$  с условием нормировки волновой функции;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (2.64)$$

Ясно, что если одна из констант задана, то другая, согласно связи (2.59), определяется однозначным образом. Таким образом, задача сводится к определению значения одной из констант, например  $a_n$ , приводящей к выполнению условия (2.64).

Воспользуемся следующим тождеством:

$$\int_{-L}^L \phi_n(x)\phi_{n'}(x)dx = \frac{1}{\chi_{n'}^2 - \chi_n^2} \left[ \phi_n(x) \frac{d\phi_{n'}(x)}{dx} - \phi_{n'}(x) \frac{d\phi_n(x)}{dx} \right]_{-L}^L. \quad (2.65)$$

Рассматривая большие значения  $L$  и учитывая (2.62), (2.63) для (2.65) можем написать:

$$\int_{-L}^L \phi_n(x)\phi_{n'}(x)dx = \frac{1}{\chi_{n'}^2 - \chi_n^2} [a_n a_{n'} + b_n b_{n'}] \exp\{-2(\chi_n + \chi_{n'})L\}. \quad (2.66)$$

Данное выражение однозначным образом стремится к нулю при  $L \rightarrow +\infty$ , если только  $\chi_{n'} \neq \chi_n$ ;

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\chi_{n'} - \chi_n} \exp\{-2(\chi_n + \chi_{n'})L\} = 0.$$

В случае же  $\chi_{n'} = \chi_n$ :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\chi_{n'} - \chi_n} \exp\{-2(\chi_n + \chi_{n'})L\} = 2.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Как следует из **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n(x) \phi_{n'}(x) dx = [a_n a_{n'} + b_n b_{n'}] \delta_{nn'}. \quad (2.67)$$

Из данного равенства видно, что  $\phi_n(x)$  будет нормирована на единицу, если

$$a_n a_{n'} + b_n b_{n'} = 2. \quad (2.68)$$

Учитывая связь  $b_n = \delta(i\chi_n) a_n$  (см. **Ошибка! Закладка не определена.**) условие нормировки волновой функции связанного посредством может быть представлено в виде

$$a_n = \sqrt{\frac{2}{1 + \delta(i\chi_n)^2}} \quad \text{или} \quad b_n = \delta(i\chi_n) \sqrt{\frac{2}{1 + \delta(i\chi_n)^2}}. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Очень часто при рассмотрении связанных состояний различают левую и правую формы нормировки (так называемые функции Йоста);

$$\phi_n^{left}(x) = \begin{cases} \exp\{\chi_n x\}, & x \rightarrow -\infty, \\ a_n \exp\{-\chi_n x\}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad \phi_n^{right}(x) = \begin{cases} b_n \exp\{-\chi_n x\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{\chi_n x\}, & x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (2.69)$$

Из **Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена.** легко увидеть, что в первом случае  $a_n = 1/\delta(i\chi_n)$ , а во втором  $b_n = \delta(i\chi_n)$ , т.е. функции

$$\phi_n^{left}(x) = \begin{cases} \exp\{\chi_n x\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{-\chi_n x\} / \delta(i\chi_n), & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$\phi_n^{right}(x) = \begin{cases} \delta(i\chi_n) \exp\{\chi_n x\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{-\chi_n x\}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.70)$$

нормированы на единицу.

#### §4. Метод фазовых функций

В соответствии с представленным выше результатом задача определения пространственного распределения волнового возмущения может быть сформулирована как краевая задача для системы линейных дифференциальных уравнений (1.10), (1.11). Возможны два вида краевых условий, когда заданными являются значения амплитуд сходящихся к слою  $a(-\infty) = A_1$ ,  $b(+\infty) = B_2$  и когда заданными являются значения амплитуд расходящихся от слоя волн  $a(+\infty) = A_2$ ,  $b(-\infty) = B_1$ .

Краевая проблема для системы уравнений (1.10), (1.11) трудно поддается решению, как в плане получения аналитических результатов, так и для выполнения численных расчетов. Для численных расчетов принципиальная трудность заключается в том, что в обоих уравнениях неизвестные функции изначально заданы в различных областях, в то время как пошаговое определение каждой из функций требует знания значений для обеих функций в точке соответствующей предыдущему шагу.

Для преодоления вышеотмеченной трудности обычно поступают следующим образом, или производят удобную замену переменной, в результате

которой одно из уравнений содержит только лишь одну из искомым функций, или же меняют постановку задачи краевую проблему на начальную задачу. Первый из перечисленных выше подходов соответствует так называемому методу фазовых функций, а второй подход более известен под названием метода погружения.

Представляет определенный интерес воспроизведение основных результатов вышеперечисленных методов на основе представленного в данной работе рассмотрения. Далее мы будем проводить обсуждение на примере волновой функции левой задачи рассеяния, для которой согласно методу амплитудных функций можем записать:

$$\Psi_{left}(x, k) = a_l(x) \exp\{ikx\} + b_l(x) \exp\{-ikx\}, \quad (2.71)$$

где пара функций  $a_l(x)$ ,  $b_l(x)$  удовлетворяет системе уравнений

$$\frac{da_l(x)}{dx} = -\frac{i u(x)}{2k} a_l(x) - \frac{i u(x)}{2k} b_l(x) \exp\{-i2kx\}, \quad (2.72)$$

$$\frac{db_l(x)}{dx} = \frac{i u(x)}{2k} b_l(x) + \frac{i u(x)}{2k} a_l(x) \exp\{i2kx\}, \quad (2.73)$$

а также краевому условию

$$a_l(-\infty) = 1, \quad b_l(+\infty) = 0. \quad (2.74)$$

Амплитуды прохождения и отражения волны для левой задачи рассеяния будут определяться значениями функций  $a_l(x)$ ,  $b_l(x)$  на правой, соответственно и левой границе слоя:

$$a_l(x_2) = t(k), \quad b_l(x_1) = r(k). \quad (2.75)$$

Метод фазовых функций предполагает в качестве искомым функций рассмотреть функции

$$A(x) = a_l(x), \quad B(x) = b_l(x)/a_l(x). \quad (2.76)$$

Легко увидеть, что волновая функция (2.71) записанная посредством  $A(x)$ ,  $B(x)$  (2.76) имеет вид:

$$\Psi_{left}(x, k) = A(x)[\exp\{ikx\} + B(x)\exp\{-ikx\}]. \quad (2.77)$$

Используя (2.77) из(2.72)-(2.74) для определения функций  $A(x)$ ,  $B(x)$  можно получить следующую краевую задачу [52]:

$$\frac{dA(x)}{dx} = -\frac{iu(x)}{2k}A(x)[1 + B(x)\exp\{-i2kx\}], \quad (2.78)$$

$$\frac{dB(x)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k}[\exp\{ikx\} + B(x)\exp\{ikx\}]^2 \quad (2.79)$$

с краевым условием

$$A(-\infty) = 1, \quad B(+\infty) = 0. \quad (2.80)$$

Как видно из (2.78)-(2.80) значения функций  $A(x)$ ,  $B(x)$  в точках на противоположных границах слоя имеем:

$$A(x_2) = t(k), \quad B(x_1) = r(k). \quad (2.81)$$

Несмотря на то, что в отличие от системы уравнений (2.72), (2.73) система (2.78), (2.79) является нелинейной, в плане выполнения численных расчетов она обладает одним неоспоримым преимуществом. Так уравнений (2.79) содержит только лишь одну неизвестную функцию  $B(x)$ . В связи с этим формулировка проблемы в виде краевой задачи (2.78)-(2.80) допускает определения функции  $B(x)$  без необходимости определения  $A(x)$ . Легко увидеть, что функция  $B(x)$  определяется уравнением (2.79) при начальном условии  $B(+\infty) = 0$  (см. второе равенство (2.80)). Подставка найденной функции  $B(x)$  в уравнение (2.78) и ее решение при начальном условии  $A(-\infty) = 1$  (см. первое равенство (2.80)) дает вторую искомую функцию  $A(x)$ . Из вышесказанного следует, что граничная задача для системы из двух дифференциальных уравнений (2.78), (2.79)



фактически равносильна двум дифференциальным уравнениям со своими начальными условиями. Отметим также, что аналогичное (2.77)-(2.80) рассмотрение может быть также проведено для волновой функции правой задачи рассеяния;

$$\Psi_{right}(x, k) = a_r(x) \exp\{ikx\} + b_r(x) \exp\{-ikx\}, \quad (2.82)$$

где пара функций  $a_r(x)$ ,  $b_r(x)$  удовлетворяет системе уравнений

$$\frac{da_r(x)}{dx} = -\frac{iu(x)}{2k} a_r(x) - \frac{iu(x)}{2k} b_r(x) \exp\{-i2kx\}, \quad (2.83)$$

$$\frac{db_r(x)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k} b_r(x) + \frac{iu(x)}{2k} a_r(x) \exp\{i2kx\}, \quad (2.84)$$

а также краевому условию

$$a_r(-\infty) = 0, \quad b_r(+\infty) = 1. \quad (2.85)$$

Амплитуды прохождения и отражения волны для правой задачи рассеяния будут определяться значениями функций  $a_r(x)$ ,  $b_r(x)$  в обратных асимптотиках:  $a_r(+\infty) = p(k)$ ,  $b_r(-\infty) = s(k)$ .

## §5. Метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния

Главная идея метода погружения базируется на рассмотрении амплитуд рассеяния волн как функций от границ потенциала. Основные результаты данного подхода мы будем воспроизводить, следуя методу комбинации параметров рассеяния [53-54]. Выберем некоторую точку  $y$  внутри потенциала, относительно нее будем мысленно предполагать разделенным на две части (Рис. II.2). Разбиение потенциала на части носит совершенно

произвольный характер и, далее, мы будем относить индекс I к левой от точки разделения части, а индекс II к правой части;

$$u(x) = u_I(x)\theta(y-x) + u_{II}(x)\theta(x-y), \quad (2.86)$$

где  $\theta(x)$  ступенчатая функция.

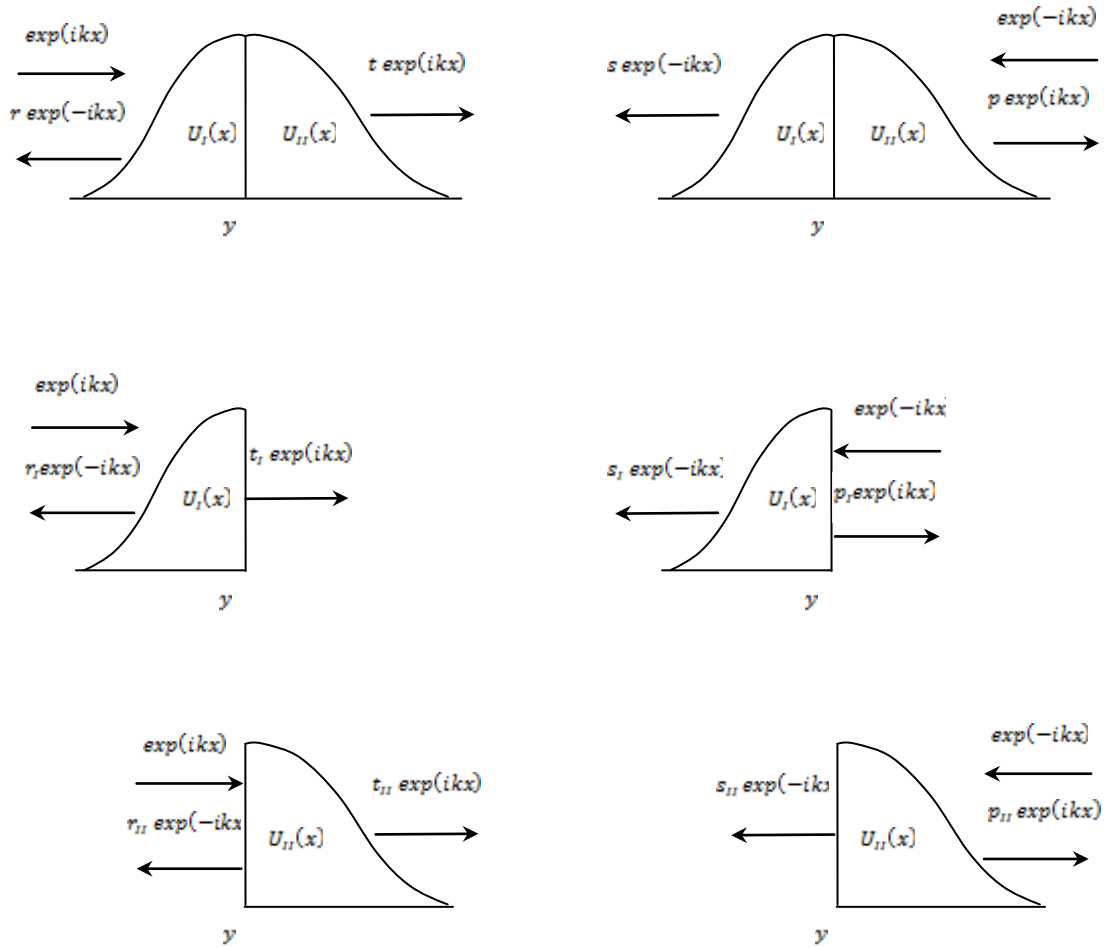


Рис. П.2. Амплитуды отражения левой и правой задач рассеяния для потенциала, а также для ее отдельных частей.

Наряду с амплитудами рассеяния потенциала  $t$ ,  $r$ ,  $p$ , введем также амплитуды рассеяния для ее отдельных частей, рассматривая каждую из которых как функцию от правой  $t_I(y)$ ,  $r_I(y)$ ,  $p_I(y)$  и, соответственно, левой границы  $t_{II}(y)$ ,  $r_{II}(y)$ ,  $p_{II}(y)$  (см. Рис. П.2). Еще раз заметим, что амплитуды

прохождения левой и правой задач рассеяния всегда равны друг другу и поэтому возможный процесс рассеивания может быть characterized тремя амплитудами.

Как следует из (1.20)-(1.23), а также (2.6) если систему уравнений (2.89), (2.90) интегрировать при начальном условии заданном в  $-\infty$ , то значения искомых функций в  $+\infty$   $a(+\infty) = A_2$ ,  $b(+\infty) = B_2$  будут связаны со значениями  $a(-\infty) = A_1$ ,  $b(-\infty) = B_1$  посредством матрицы переноса. Ясно, также, что если начальные значения для системы уравнений (2.78), (2.79) заданы в  $+\infty$ , т.е. известными являются  $a(+\infty) = A_2$ ,  $b(+\infty) = B_2$ , то искомые  $a(-\infty) = A_1$ ,  $b(-\infty) = B_1$  будут связаны с ними посредством обратной трансфер матрицы;

$$\begin{pmatrix} a(+\infty) \\ b(+\infty) \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} a(-\infty) \\ b(-\infty) \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} a(-\infty) \\ b(-\infty) \end{pmatrix} = \hat{M}^{-1} \begin{pmatrix} a(+\infty) \\ b(+\infty) \end{pmatrix}. \quad (2.87)$$

Рассматривая элементы трансфер матрицы посредством амплитуд рассеяния правой задачи рассеяния (см.(2.18)) для начального условия

$$a(-\infty) = 0, b(-\infty) = 1, \quad (2.88)$$

можем записать

$$a(+\infty) = \frac{p(k)}{t(k)} \text{ и } b(+\infty) = \frac{1}{t(k)}. \quad (2.89)$$

Записывая обратную матрицу переноса посредством амплитуд рассеяния левой задачи рассеяния

$$\hat{M}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t(k)} & \frac{r(-k)}{t(-k)} \\ \frac{r(k)}{t(k)} & \frac{1}{t(-k)} \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

Из (2.87) для случая заданного в начального условия

$$a(+\infty) = 1, b(+\infty) = 0 \quad (2.91)$$

имеем

$$a(-\infty) = \frac{1}{t(k)}, \quad b(-\infty) = \frac{r(k)}{t(k)}. \quad (2.92)$$

Из (2.78), (2.79) следует, что в случае слоя с переменной правой границей, точку  $y$  следует отождествлять с точкой  $x_2$ , а амплитуды рассеяния считать соответствующими первой части слоя;

$$a(y) = \frac{p_I(y)}{t_I(y)} \quad \text{и} \quad b(y) = \frac{1}{t_I(y)}. \quad (2.93)$$

Заметим, что при условии  $y \rightarrow -\infty$  толщина левой части равна нулю, т.е.  $p_I(y \rightarrow -\infty) = 0$  и  $t_I(y \rightarrow -\infty) = 1$ . Согласно этим равенствам для введенных согласно (2.93) функций  $a(y)$ ,  $b(y)$  условие  $a(x_1) = 0$ ,  $b(x_1) = 1$  автоматически имеет место. Ясно, также, что  $p_I(y \rightarrow -\infty) = p$  и  $t_I(y \rightarrow -\infty) = t$ .

В случае слоя с переменной левой границей амплитуды рассеяния следует считать равными амплитудам рассеяния для второй части слоя ;

$$a(y) = \frac{1}{t_{II}(y)} \quad \text{и} \quad b(y) = \frac{r_{II}(y)}{t_{II}(y)}. \quad (2.94)$$

Так как при значении  $y = +\infty$  толщина второго слоя равна нулю и, следовательно,  $t_{II}(+\infty) = 1$ ,  $r_{II}(+\infty) = 0$  то для функций  $a(y)$ ,  $b(y)$  (2.94) имеет место условие  $a(x_2) = 1$ ,  $b(x_2) = 0$  (см. (2.92)). Из сказанного, также следует, что  $r_{II}(-\infty) = r$  и  $t_{II}(-\infty) = t$ .

Подставляя **Ошибка! Закладка не определена.** **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** получим

$$\frac{d}{dy} \frac{1}{t_I(y)} = \frac{iu(y)}{2k} \frac{1}{t_I(y)} + \frac{iu(y)}{2k} \frac{p_I(y)}{t_I(y)} \exp\{i2ky\}, \quad (2.95)$$

$$\frac{d}{dy} \frac{p_I(y)}{t_I(y)} = -\frac{i u(y)}{2k} \frac{p_I(y)}{t_I(y)} - \frac{i u(y)}{2k} \frac{1}{t_I(y)} \exp\{-i2ky\}. \quad (2.96)$$

Обозначая  $y = x$  из (2.95), (2.96) для амплитуд рассеяния слоя с переменной правой границей получим следующую систему нелинейных дифференциальных уравнений

$$\frac{dt_I(x)}{dx} = -\frac{i u(x)}{2k} t_I(x) (1 + p_I(x) \exp\{i2kx\}), \quad (2.97)$$

$$\frac{dp_I(x)}{dx} = -\frac{i u(x)}{2k} (\exp\{-ikx\} + p_I(x) \exp\{ikx\})^2 \quad (2.98)$$

с начальным условием

$$t_I(-\infty) = 1 \text{ и } p_I(-\infty) = 0. \quad (2.99)$$

Условие (2.99) уместно назвать левой начальной задачей.

Аналогичным образом из (2.94) и (2.95), (2.96) следует, что

$$\frac{d}{dy} \frac{1}{t_{II}(y)} = -\frac{i u(y)}{2k} \frac{1}{t_{II}(y)} - \frac{i u(y)}{2k} \frac{r_{II}(y)}{t_{II}(y)} \exp\{-i2ky\}, \quad (2.100)$$

$$\frac{d}{dy} \frac{r_{II}(y)}{t_{II}(y)} = \frac{i u(y)}{2k} \frac{r_{II}(y)}{t_{II}(y)} + \frac{i u(y)}{2k} \frac{1}{t_{II}(y)} \exp\{i2ky\}. \quad (2.101)$$

Из данной системы уравнений для амплитуд левой задачи рассеяния как функций от левой границы слоя можем записать:

$$\frac{dt_{II}(x)}{dx} = \frac{i u(x)}{2k} t_{II}(x) (1 + r_{II}(x) \exp\{-i2kx\}), \quad (2.102)$$

$$\frac{dr_{II}(x)}{dx} = \frac{i u(x)}{2k} (\exp\{ikx\} + r_{II}(x) \exp\{-ikx\})^2 \quad (2.103)$$

с начальным условием

$$t_{II}(+\infty) = 1 \text{ и } r_{II}(+\infty) = 0. \quad (2.104)$$

Для удобства условие (2.104) целесообразно назвать правой начальной задачей.

Интересно заметить, что обе пары уравнений (2.97), (2.98) и (2.102), (2.103), метода погружения записаны для случаев, когда первичная волна падает на ту границу слоя, который считается переменным. Так, для волновой функции левой задачи рассеяния можем записать

$$\Psi_{left}(x, k) = t \left[ \frac{1}{t_{II}(x)} \exp\{ikx\} + \frac{r_{II}(x)}{t_{II}(x)} \exp\{-ikx\} \right], \quad (2.105)$$

замечая при этом, что  $t_{II}(+\infty) = 1$  и  $r_{II}(+\infty) = 0$ . Волновую функцию правой задачи рассеяния удобно представить посредством искомым решений системы уравнений (2.97), (2.98);

$$\Psi_{right}(x, k) = t \left[ \frac{1}{t_I(x)} \exp\{-ikx\} + \frac{p_I(x)}{t_I(x)} \exp\{ikx\} \right]. \quad (2.106)$$

Заметим, что  $t_I(-\infty) = 1$  и  $p_I(-\infty) = 0$ .

В конце отметим, что аналогичное рассмотрение может быть также проведено для случаев, когда первичная волна падает на слой с его фиксированной стороны.

## §6. Метод расслоения

В соответствии с методом погружения, а также методом комбинации параметров рассеяния задача нахождения волновой функций может быть сведена к задаче решения системы дифференциальных уравнений с заданными начальными условиями. Вообще говоря, при обсуждении задач рассеяния возможны четыре вида начальных условий. Две задачи Коши будут соответствовать волновой функции левой задачи рассеяния, когда та рассматривается как функция левой или же правой границ слоя. Ясно, что

остальные две задачи Коши будут соответствовать волновой функции правой задачи рассеяния также в зависимости от границ слоя.

Возможно также рассмотрение, когда волновая функция представляется посредством решений, соответствующих обоим задачам Коши. Иначе говоря, волновая функция может быть записана в виде, содержащем одновременно как амплитуды рассеяния слоя с переменной левой, так и с переменной правой границами. На первый взгляд может показаться, что привлечение для представления волновой функции решений обеих форм возможных задач Коши усложняет проблему и может представлять собой только лишь математический интерес. Однако, как будет показано ниже, такое рассмотрение позволяет наиболее полным образом раскрыть механизм формирования пространственного распределения волнового возмущения как результат эффекта многократных отражений. Данный подход известен под названием метода расслоения [55].

Рассмотрим для первой и второй частей слоя левую и правую задачи рассеяния

$$\Psi_{left}^I(x) = \begin{cases} \exp\{ikx\} + r_I(y)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ t_I(y)\exp\{ikx\}, & x > y, \end{cases} \quad (2.107)$$

$$\Psi_{right}^I(x) = \begin{cases} t_I(y)\exp\{-ikx\}, & x \rightarrow -\infty, \\ \exp\{-ikx\} + p_I(y)\exp\{ikx\}, & x > y, \end{cases} \quad (2.108)$$

и

$$\Psi_{left}^{II}(x) = \begin{cases} \exp\{ikx\} + r_{II}(y)\exp\{-ikx\}, & x < y, \\ t_{II}(y)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.109)$$

$$\Psi_{right}^{II}(x) = \begin{cases} t_{II}(y)\exp\{-ikx\}, & x < y, \\ \exp\{-ikx\} + p_{II}(y)\exp\{ikx\}, & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.110)$$

Тогда согласно (2.6) матрицы переноса каждой части слоя, записанные посредством амплитуд отражения и прохождения обеих задач рассеяния для части, будут иметь вид:

$$\hat{M}_I = \begin{pmatrix} t_I - \frac{p_I r_I}{t_I} & \frac{p_I}{t_I} \\ -\frac{r_I}{t_I} & \frac{1}{t_I} \end{pmatrix}, \quad \hat{M}_{II} = \begin{pmatrix} t_{II} - \frac{p_{II} r_{II}}{t_{II}} & \frac{p_{II}}{t_{II}} \\ -\frac{r_{II}}{t_{II}} & \frac{1}{t_{II}} \end{pmatrix}. \quad (2.111)$$

Используя(2.6), (2.111)из матричного соотношения  $\hat{M} = \hat{M}_{II}\hat{M}_I$  можем записать:

$$\begin{pmatrix} t - \frac{pr}{t} & \frac{p}{s} \\ -\frac{r}{s} & \frac{1}{t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{II} - \frac{p_{II} r_{II}}{t_{II}} & \frac{p_{II}}{t_{II}} \\ -\frac{r_{II}}{t_{II}} & \frac{1}{t_{II}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_I - \frac{p_I r_I}{t_I} & \frac{p_I}{t_I} \\ -\frac{r_I}{t_I} & \frac{1}{t_I} \end{pmatrix}, \quad (2.112)$$

из которого, в частности, следует, что амплитуды рассеяния всего слоя  $t$ ,  $r$ ,  $p$  могут быть выражены посредством амплитуд рассеяния отдельных ее частей  $t_I(x)$ ,  $r_I(x)$ ,  $p_I(x)$  и  $t_{II}(x)$ ,  $r_{II}(x)$ ,  $p_{II}(x)$  согласно следующим формулам:

$$t = \frac{t_I(y)t_{II}(y)}{1 - p_I(y)r_{II}(y)}, \quad (2.113)$$

$$r = r_I(y) + \frac{t_I(y)^2 r_{II}(y)}{1 - p_I(y)r_{II}(y)}, \quad (2.114)$$

$$p = p_{II}(y) + \frac{p_I(y)t_{II}(y)^2}{1 - p_I(y)r_{II}(y)}. \quad (2.115)$$

Таким образом, мы на основе метода трансфер матрицы воспроизвели классический результат метода расслоения, при этом обобщая его на случай сред с энергетическими потерями.

Представленный выше результат (2.113)- (2.115) имеет довольно прозрачный физический смысл, связанный с эффектом многократного



отражения волны внутри слоистой структуры. Разлагая выражение  $t$  (2.113) в ряд по степеням  $p_I r_{II}$  можем записать

$$t = t_I t_{II} + t_I (r_{II} p_I) t_{II} + t_I (r_{II} p_I)^2 t_{II} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} t_I (r_{II} p_I)^n t_{II}. \quad (2.116)$$

Легко увидеть, что первое слагаемое суммы (2.116) (член  $n=0$ ) представляет собой вклад в полную амплитуду прохождения амплитуды процесса, при котором отражение от слоев не происходит. Второе слагаемое соответствует амплитуде реализации процесса, при котором волна, прошедшая сквозь первый слой структуры отражается от его второго слоя и далее, отражаясь от первого слоя, волна уже проходит через второй слой. Ясно, что произвольный  $n$ -тый член суммы представляет процесс передачи волнового возмущения сквозь структуру, который сопровождается  $n$  кратным переотражением волны между слоями (см. Рис. П.3).

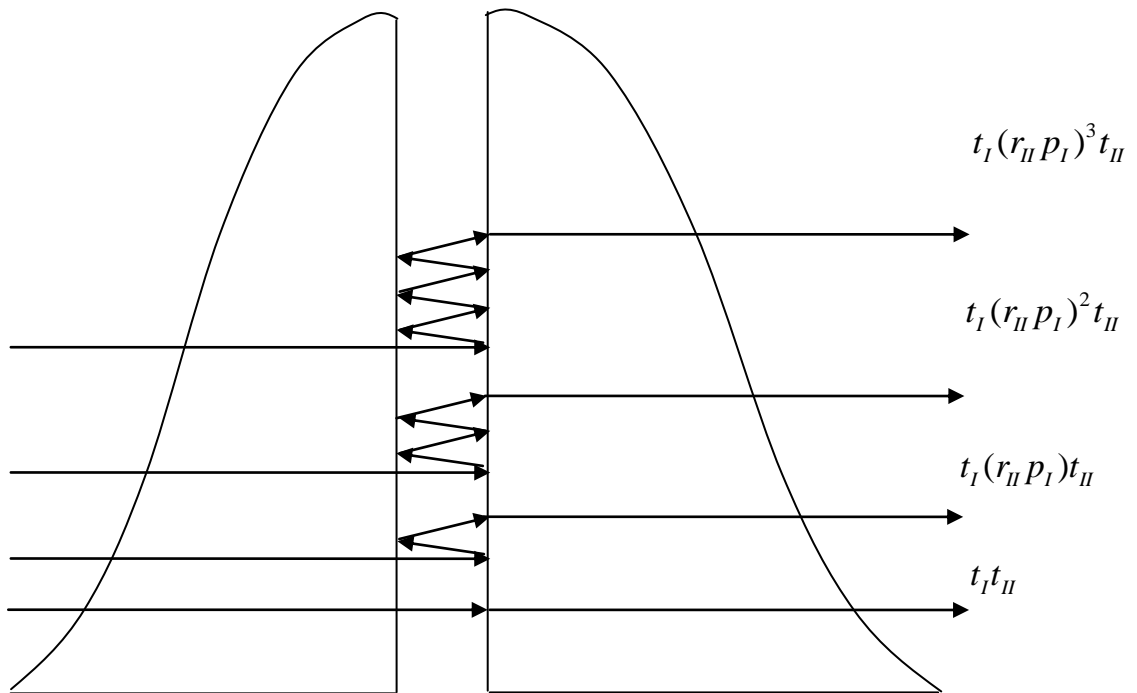


Рис. П.3. Схематическое представление амплитуды прохождения волны сквозь двухслойную структуру, как результат наложения процессов многократных отражений между слоями.

Полученный результат является не чем иным как аналогом континуального интеграла или интеграла по возможным траекториям Фейнмана для амплитуды вероятности реализации того или иного процесса [56]. В случае (2.116) таким процессом является процесс передачи волнового возмущения возникшего в области по одну сторону системы в область по другую сторону. Как известно в подходе Фейнмана базовым понятием является амплитуда вероятности осуществления или реализации события, для которого имеет место принцип суперпозиции: амплитуда вероятности события равна сумме амплитуд вероятностей для всевозможных альтернативных способов его осуществления. Для амплитуд вероятности имеет место также закон их умножения, согласно которому амплитуда вероятности сложного процесса равна произведению амплитуд вероятностей составляющих его элементарных процессов.

Воспользовавшись (2.105), (2.106), а также (2.113)-(2.115) для волновых функций левой и правой задач рассеяния слоя можем записать

$$\Psi_{left}(x) = \frac{t_I(x)}{1 - p_I(x)r_{II}(x)} \exp\{ikx\} + \frac{t_I(x)r_{II}(x)}{1 - p_I(x)r_{II}(x)} \exp\{-ikx\}, \quad (2.117)$$

$$\Psi_{right}(x) = \frac{t_{II}(x)p_I(x)}{1 - p_I(x)r_{II}(x)} \exp\{ikx\} + \frac{t_{II}(x)}{1 - p_I(x)r_{II}(x)} \exp\{-ikx\}. \quad (2.118)$$

Как легко заметить из (2.117) и (2.118), для левой задачи рассеяния отношение амплитуд встречных волн в каждой точке пространства определяется амплитудой отражения для части системы правее данной точки;

$$\frac{b(x)}{a(x)} = R_{II}(x), \quad (2.119)$$

в то время как для правой задачи рассеяния оно определяется амплитудой отражения части системы левее данной точки;

$$\frac{a(x)}{b(x)} = P_I(x). \quad (2.120)$$

Разлагая выражения для амплитуд встречных волн в ряд по степеням  $p_I(x)r_{II}(x)$  легко увидеть, что в каждой точке пространства волновое поле формируются в результате многократных отражений происходящих от частей системы левее и правее от данной точки. В конце отметим, что расчет волнового поля на основе эффекта многократного отражения, еще за долго Фейнмана, был предложен Амбарцумяном при расчётах прохождения света в мутных. Однако эффект использовался на основе сложения интенсивностей, а не амплитуд волн (см. Приложение I).

## ГЛАВА III.

### ПРОХОЖДЕНИЕ СВЕТА СКВОЗЬ ПОГЛОЩАЮЩИЙ ФОТОННЫЙ КРИСТАЛЛ

Как известно, фотонные кристаллы [57-61] представляют собой новый тип оптических материалов, как правило, создаваемых искусственным путем, с периодической модуляцией диэлектрической проницаемости в масштабах, сопоставимых с длиной электромагнитной волны в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах. Поведение фотонов в фотонных кристаллах кардинально отличается от их поведения в решетке обычного кристалла, узлы которого находятся друг от друга на расстоянии, много меньшем длины волны света. Вследствие периодичности среды, распространение излучения внутри фотонного кристалла становится схожим с движением квантовой частицы в поле периодического потенциала. Поэтому спектр электромагнитных мод в фотонных кристаллах имеет зонную структуру, а гармонический во времени волновой процесс аналогичен с блоховскими волнам, рассматриваемым в теории проводимости для обычных кристаллов.

Основной задачей теории на данный момент может считаться проблема выявления зависимости обусловленного периодичностью фотонного кристалла запрещенной зоны (спектральной области) от геометрических и структурных параметров фотонного кристалла, а также от свойств, входящих в композицию исходных материалов.

Фотонные кристаллы представляют интерес как с фундаментальной, так и с практической точек зрения. Так, наличие фотонного кристалла в квантово-электродинамических явлениях, позволяет во многом регулировать исход эксперимента, путем подавления одних и повешением вероятности реализации других процессов [62]. На основе фотонных кристаллов могут создаваться

различные оптические устройства, такие как антиотражающие и просветляющие покрытия, оптические детекторы и фильтры, волноводы, низкопороговые и беспороговые лазеры и т.д (см., например, [63]).

В зависимости от того, во скольких направлениях в фотонном кристалле подавлено распространение света, различают одномерные, двухмерные и трехмерные фотонные кристаллы. С технологической точки зрения наиболее разработанным как в плане контроля структурных параметров, так и в возможности композиции различных материалов, могут считаться одномерные фотонные кристаллы.

Многие фотонные кристаллы, создаваемые не так давно, были сделаны из двух диэлектрических материалов. Обычно запрещенная зона диэлектрического фотонного кристалла не столь велика, что обуславливает их практическую значимость в узкополосном применении. В последнее время резко возрос интерес к так называемым, металл-диэлектрик и полупроводник-диэлектрик фотонным кристаллам, структурный элемент которых сочетает в себе материалы с различным характером проводимости. Данный интерес в основном стимулируется экспериментальными усилиями по созданию упорядоченных материалов с запрещенной зоной в видимой части оптического спектра, так как в этой области некоторые материалы проявляют сильно выраженную зависимость диэлектрической проницаемости от частоты и обладают большой поглощающей способностью. Ниже мы применяем развитый общий подход для рассмотрения задачи прохождения монохроматичной во времени плоской электромагнитной волны сквозь слой, оптические характеристики которого произвольным образом меняются от точки к точке в направлении распространения волны.

## §1. Рекуррентные соотношения для расчета амплитуд рассеяния слоистой структуры

Ниже мы исследуем задачу описания гармонического во времени электромагнитного поля ( $\exp\{-i\omega t\}$ ), рассеивающегося на одномерной поглощающей структуре. Как известно, в случае, когда распространение волны происходит вдоль оси структуры, координатная зависимость электрического поля определяется согласно следующему уравнению:

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + (k^2 - u(x))E(x) = 0, \quad (3.1)$$

где

$$u(x) = V_1(x) + iV_2(x), \quad V_1 = k^2(1 - \varepsilon'(x)), \quad V_2 = -k^2\varepsilon''(x), \quad k^2 = \omega^2 / c^2 \quad (3.2)$$

и  $\varepsilon'(x)$ ,  $\varepsilon''(x)$  являются реальной и мнимой частями диэлектрической проницаемости слоя ( $\varepsilon(x) = \varepsilon'(x) + i\varepsilon''(x)$ ).

Как видно из (3.1), уравнение, определяющее координатную зависимость электрического поля идентично со стационарным уравнением Шредингера, с той лишь разностью, что в данном случае потенциал должен рассматриваться как комплексная величина. Это обстоятельство усложняет рассмотрение задачи, по сравнению со случаем реального  $u(x)$ , т.к. в данном случае линейно независимые решения уравнения (3.1) не могут быть выбраны как комплексно сопряженные друг к другу функции [64].

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  слоев, каждый из которых характеризуется своей трансфер матрицей. Трансфер матрица  $N$  слойной структуры  $\hat{M}_N$  будет являться произведением трансфер матриц отдельных слоев:

$$\hat{M}_N = \begin{pmatrix} \alpha_N & \beta_N \\ \gamma_N & \delta_N \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \gamma_1 & \delta_1 \end{pmatrix} = \prod_{n=N}^1 \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

Если рассматривать количество слоев  $N$  переменной величиной, то из матричного равенства (3.3) может быть получена определенная система рекуррентных разностных уравнений для определения элементов трансфер матрицы всей системы.

Далее мы будем выражать элементы трансфер матрицы посредством амплитуд рассеяния левой задачи рассеяния:

$$\hat{M}_N = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_N(-k)} & \frac{-R_N(-k)}{T_N(-k)} \\ \frac{-R_N(k)}{T_N(k)} & \frac{1}{T_N(k)} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_n(-k)} & \frac{-r_n(-k)}{t_n(-k)} \\ \frac{-r_n(k)}{t_n(k)} & \frac{1}{t_n(k)} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

где  $T_N(k)$ ,  $R_N(k)$  и  $t_n(k)$ ,  $r_n(k)$  являются амплитудами прохождения и отражения для всей структуры и для  $n$ -ого слоя структуры соответственно.

Используя (3.4) из (3.3) можем записать

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T_N(-k)} & \frac{-R_N(-k)}{T_N(-k)} \\ \frac{-R_N(k)}{T_N(k)} & \frac{1}{T_N(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_n(-k)} & \frac{-r_n(-k)}{t_n(-k)} \\ \frac{-r_n(k)}{t_n(k)} & \frac{1}{t_n(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T_{N-1}(-k)} & \frac{-R_{N-1}(-k)}{T_{N-1}(-k)} \\ \frac{-R_{N-1}(k)}{T_{N-1}(k)} & \frac{1}{T_{N-1}(k)} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

где  $T_{N-1}(k)$ ,  $R_{N-1}(k)$  являются амплитудами прохождения и отражения для первых  $N-1$  слоев структуры, т.е. когда в ней отсутствует только последний  $N$ -тый слой.

Из (3.5) легко увидеть, что задача определения  $T_N(k)$ ,  $R_N(k)$  приводится к следующей системе разностных уравнений

$$\frac{1}{T_N(k)} = \frac{1}{t_N(k)} \frac{1}{T_{N-1}(k)} + \frac{r_N(k)}{t_N(k)} \frac{R_{N-1}(-k)}{T_{N-1}(-k)}, \quad (3.6)$$

$$\frac{R_N(-k)}{T_N(-k)} = \frac{1}{t_N(-k)} \frac{R_{N-1}(-k)}{T_{N-1}(-k)} + \frac{r_N(-k)}{t_N(-k)} \frac{1}{T_{N-1}(k)}. \quad (3.7)$$

с начальными условиями  $T_0(k)=1$ ,  $R_0(-k)=0$ . Легко догадаться, что это начальное условие соответствует отсутствию в системе слоев. Из (3.5) следует также система уравнений для величин  $1/T_N(-k)$ ,  $R_N(k)/T_N(k)$ , которая может быть получена из (3.6), (3.7) простой заменой  $k$  на  $-k$ . Заметим, что разностные уравнения (3.6), (3.7) относительно величин  $1/T_N(k)$ ,  $R_N(-k)/T_N(-k)$  ( $1/T_N(-k)$ ,  $R_N(k)/T_N(k)$ ) являются линейными.

В конце отметим, что решение системы уравнений (3.6), (3.7) в общем виде представляет собой сложную математическую проблему, которую можно решить разве что для некоторых частных случаев. Как будет показано ниже, на основе выведенных в данном параграфе уравнений, можно решить задачу определения амплитуд рассеяния для структуры состоящей из конечного числа произвольных, но вместе с тем идентичных между собой, а также периодически расположенных слоев. Решение задачи, конечно же, предполагает, что трансфер матрица для единичного слоя структуры должна быть известной.

## **§2. Преобразование элементов трансфер матрицы при параллельном сдвиге рассеивающегося слоя.**

Отправной точкой для рассмотрения задачи рассеяния волны на слоистой структуре из идентичных и периодически расположенных слоев, служит задача определения характера изменений элементов трансфер матрицы при параллельном переносе слоя из одной области в другую. Определенно ясно, что смещения отдельного слоя в пространстве не может привести к изменению коэффициентов отражения, прохождения и поглощения. Соответственно, изменения могут претерпевать только лишь амплитуды соответствующих



величин, и то характер данных изменений должен проявляться лишь в виде некоторых фазовых множителей.

Рассмотрим слой с границами в точках  $x_1$  и  $x_2$ , для которого диэлектрическая проницаемость характеризуется функцией  $u(x)$ . Переместим этот слой параллельно самому себе на некоторое расстояние  $L$ . В результате для нового слоя границы будут определяться точками  $x_1 + L$  и  $x_2 + L$ . Если диэлектрическая проницаемость внутри перемещенного слоя определяется посредством функции  $u'(x)$ , то она связана с функцией  $u(x)$  исходного слоя, простым соотношением:

$$u(x) = u'(x + L) \text{ или } u'(x) = u(x - L). \quad (3.8)$$

Будем рассматривать решение волнового уравнения (3.1) используя систему уравнений (1.10), (1.11). Для удобства, мы будем рассматривать частное решение (1.101), (1.102) в соответствии с правой задачей рассеяния, записывая при этом волновое поле для случая перемещенного слоя в виде:

$$E'(x, k) = a'_k(x) \exp\{ikx\} + b'_k(x) \exp\{-ikx\}, \quad (3.9)$$

где  $a'_k(x)$ ,  $b'_k(x)$  удовлетворяют следующей системе уравнений

$$\frac{da'_k(x)}{dx} = -\frac{iu'(x)}{2k} a'_k(x) - \frac{iu'(x)}{2k} b'_k(x) \exp\{-i2kx\}, \quad (3.10)$$

$$\frac{db'_k(x)}{dx} = \frac{iu'(x)}{2k} b'_k(x) + \frac{iu'(x)}{2k} a'_k(x) \exp\{i2kx\} \quad (3.11)$$

с граничными условиями

$$a'_k(x_1 + L) = 1 \text{ и } b'_k(x_2 + L) = 0. \quad (3.12)$$

Заметим, что для уравнений (3.10), (3.11) область принимаемых значений  $x$  ограничена интервалом  $x_1 + L < x < x_2 + L$ . Однако, если заменить в (3.10), (3.11)  $x$

на  $x+L$ , то область значений для переменной  $x$  будет уже  $x_1 < x < x_2$ . Вводя функции

$$a_k(x) = a'_k(x+L), \quad b_k(x) = b'_k(x+L) \exp\{-i2kL\}, \quad (3.13)$$

можно показать, что функции  $a_k(x)$  и  $b_k(x)$  удовлетворяют системе уравнений (1.10), (1.11) с начальными условиями:

$$a_k(x_1) = 1 \text{ и } b_k(x_2) = 0. \quad (3.14)$$

Заметим, что волновое поле, рассеивающееся на исходном слое, диэлектрическая проницаемость которого задана функцией  $u(x)$ , определяется  $a_k(x)$ ,  $b_k(x)$  согласно формуле

$$E(x, k) = a_k(x) \exp\{ikx\} + b_k(x) \exp\{-ikx\}. \quad (3.15)$$

Следовательно, согласно (3.9), (3.13), волновое поле (3.15) при сдвиге слоя на дистанцию  $L$  преобразовывается следующим образом:

$$E'(x, k) = a_k(x-L) \exp\{ikx\} + b_k(x-L) \exp\{i2kL\} \exp\{-ikx\}.$$

Согласно формулам (2.17)-(2.19) элементы трансфер матрицы могут быть выражены посредством одного частного решения системы (2.113), (2.114). Будем рассматривать решения системы (2.113), (2.114) для исходного и перемещенного слоев исходя из начальных условий (3.12) и (3.14), соответственно. Тогда из (2.17)-(2.19) можем записать

$$\alpha = \frac{a_k(x_2)}{1 - b_k(x_1)b_{-k}(x_1)}, \quad \beta = -\frac{b_{-k}(x_1)a_k(x_2)}{1 - b_k(x_1)b_{-k}(x_1)}, \quad (3.16)$$

$$\gamma = -\frac{b_k(x_1)a_{-k}(x_2)}{1 - b_{-k}(x_1)b_k(x_1)}, \quad \delta = \frac{a_{-k}(x_2)}{1 - b_{-k}(x_1)b_k(x_1)}, \quad (3.17)$$

$$\alpha' = \frac{a'_k(x_2 + L)}{1 - b'_k(x_1 + L)b'_{-k}(x_1 + L)}, \quad \beta' = -\frac{b'_{-k}(x_1 + L)a'_k(x_2 + L)}{1 - b'_k(x_1 + L)b'_{-k}(x_1 + L)}, \quad (3.18)$$

$$\gamma' = -\frac{b'_k(x_1 + L)a'_{-k}(x_2 + L)}{1 - b'_{-k}(x_1 + L)b'_k(x_1 + L)}, \quad \delta' = \frac{a'_{-k}(x_2 + L)}{1 - b'_{-k}(x_1 + L)b'_k(x_1 + L)}. \quad (3.19)$$

Воспользовавшись (3.13), из (3.16)- (3.19) легко увидеть, что

$$\alpha' = \alpha, \quad \delta' = \delta \text{ и } \beta' = \beta \exp\{-i2kL\}, \quad \gamma' = \gamma \exp\{i2kL\}. \quad (3.20)$$

Как следует из данного результата, при сдвиге рассеивающего слоя на величину  $L$  элементы трансфер матрицы  $\alpha, \delta$  остаются неизменными, в то время как элементы  $\beta, \gamma$  приобретают фазовые множители, согласно последним двум равенствам (3.20).

### **§3. Рассеяние электромагнитной волны на идеальной слоистой структуре.**

Рассмотрим слоистую структуру из  $N$  идентичных и равноудаленных друг от друга слоев. На данном этапе рассмотрения мы не предполагаем, что одиночный слой структуры обязательно должен быть однородным или же что нам известны явные зависимости элементов трансфер матрицы от частоты падающего излучения и параметров рассеивающего слоя.

Для рассматриваемой слоистой структуры диэлектрическая проницаемость характеризуется следующей зависимостью

$$u(x) = \sum_{n=1}^N u_n(x), \quad (3.21)$$

где  $u_n(x)$  относится к  $n$ -тому слою структуры, которая выражается функцией  $u_1(x)$ , определяющей оптические свойства первого слоя, следующим соотношением:

$$u_n(x) = u_1(x - (n-1)L), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (3.22)$$

Обозначая значения координат границ первого слоя через  $y_1, y_2$  ( $y_1 < y_2$ ) можем записать

$$u_1(x) = \frac{\omega^2}{c^2} (1 - \varepsilon(x)) \theta(x - y_1) \theta(y_2 - x), \quad (3.23)$$

где  $\varepsilon(x) = \varepsilon'(x) + i\varepsilon''(x)$  диэлектрическая проницаемость первого слоя и  $\theta(x)$  - ступенчатая функция. Заметим, что возможные значения  $L$  должны рассматриваться, по крайней мере, больше ширины слоя ( $L \geq (y_2 - y_1)$ ), в противном случае будет иметь место “наложение” слоев.

Рассмотрим связь элементов трансфер матрицы  $n$ -ого слоя структуры с элементами трансфер матрицы первого слоя. Согласно (3.20) можем записать

$$\alpha_n = \alpha, \quad \delta_n = \delta, \quad \beta_n = \beta \exp\{-i2kL(n-1)\}, \quad \gamma_n = \gamma \exp\{i2kL(n-1)\}, \quad (3.24)$$

где мы для удобства приняли для элементов трансфер матрицы первого слоя, следующие обозначения:  $\alpha_1 = \alpha, \beta_1 = \beta, \gamma_1 = \gamma, \delta_1 = \delta$ .

Используя (3.24) из (3.6), (3.7) можем записать

$$\frac{1}{T_N(k)} = \frac{1}{t(k)} \frac{1}{T_{N-1}(k)} + \frac{r(k)}{t(k)} \exp\{i2kL(n-1)\} \frac{R_{N-1}(-k)}{T_{N-1}(-k)}, \quad (3.25)$$

$$\frac{R_N(-k)}{T_N(-k)} = \frac{1}{t(-k)} \frac{R_{N-1}(-k)}{T_{N-1}(-k)} + \frac{r(-k)}{t(-k)} \exp\{-i2kL(n-1)\} \frac{1}{T_{N-1}(k)}. \quad (3.26)$$

с начальными условиями

$$T_0(k) = 1, \quad R_0(-k) = 0. \quad (3.27)$$

Заметим, что в (3.25), (3.26) величины  $t(k)$  и  $r(k)$  являются амплитудами рассеяния первого слоя структуры  $\alpha = 1/t(-k), \gamma = -r(k)/t(k)$ .

Система уравнений (3.25), (3.26) может быть решена стандартными методами и ее решение для начального условия (3.27) имеет вид:

$$\frac{1}{T_N(k)} = \exp\{ikLN\} \left( \cos(\mu NL) + \frac{1}{2} \left( \frac{\exp\{-ikL\}}{t(k)} - \frac{\exp\{ikL\}}{t(-k)} \right) \frac{\sin(\mu NL)}{\sin(\mu L)} \right), \quad (3.28)$$

$$\frac{R_N(k)}{T_N(k)} = \exp\{ikL(N-1)\} \frac{r(k) \sin(\mu NL)}{t(k) \sin(\mu L)}, \quad (3.29)$$

где введено обозначение

$$\cos \mu L = \frac{1}{2} \left( \frac{\exp\{-ikL\}}{t(k)} + \frac{\exp\{ikL\}}{t(-k)} \right). \quad (3.30)$$

Заметим, что при отсутствии в среде поглощения формулы (3.28)-(3.30) переходят в соответствующий результат работы [65]. Отметим также, что ( $t(-k) = t^*(k)$ ) величина  $\mu$  может принимать либо действительное или же чисто мнимое значения, т.к. в данном случае правая часть (3.30) является реальной величиной:  $\cos \mu L = \text{Re}(\exp\{-ikL\}/t(k))$ .

Однако в общем случае она является комплексной величиной и как видно из (3.30) величина  $\mu$  как функция от  $k$  является четной ( $\mu(k) = \mu(-k)$ ).

Несмотря на то, что формулы (3.28), (3.29) выражают явную зависимость амплитуд рассеяния  $T_N$ ,  $R_N$  идеальной слоистой структуры от количества слоев и амплитуд рассеяния структурного элемента  $t$ ,  $r$ , их аналитическое исследование возможно разве что для некоторых частных случаев.

#### **§4. Идеальная периодическая среда со структурным элементом из двух однородных слоев.**

Далее мы будем рассматривать идеальную слоистую структуру с составным элементом в виде двух соприкасающихся друг с другом однородных

слоев, имеющих толщины  $a_1, a_2$ , соответственно. Предполагая, что составные элементы структуры также соприкасаются между собой, для периода структуры будем иметь  $L = a_1 + a_2$ .

Для определения амплитуд рассеяния  $t, r$  структурного двухслойного элемента, воспользуемся формулами (3.6), (3.7);

$$\frac{1}{t(k)} = \frac{1}{t^{(2)}(k)} \frac{1}{t^{(1)}(k)} + \frac{r^{(2)}(k) r^{(1)}(-k)}{t^{(2)}(k) t^{(1)}(-k)}, \quad (3.31)$$

$$\frac{r(-k)}{t(-k)} = \frac{1}{t^{(2)}(-k)} \frac{r^{(1)}(-k)}{t^{(1)}(-k)} + \frac{r^{(2)}(-k)}{t^{(2)}(-k)} \frac{1}{t^{(1)}(k)}, \quad (3.32)$$

где  $t^{(j)}, r^{(j)}$  ( $j=1,2$ ) являются амплитудами прохождения и отражения первого и второго слоев структурного элемента. Для определенности, предполагая, что начало структурного элемента совпадает с началом координат можем записать:

$$\frac{1}{t^{(j)}(k)} = \exp\{ika_j\} \left[ \cos[q_j a_j] - i \frac{q_j^2 + k^2}{2kq_j} \sin[q_j a_j] \right], \quad (j=1,2) \quad (3.33)$$

$$\frac{r^{(j)}(k)}{t^{(j)}(k)} = i \frac{q_j^2 - k^2}{2kq_j} \exp\{ikb_j\} \sin[q_j a_j], \quad (j=1,2) \quad (3.34)$$

где  $b_1 = a_1, b_2 = 2a_1 + a_2, q_j = k\sqrt{\varepsilon_j}, k = \omega/c$  и  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  являются диэлектрическими первого и второго слоев.

Подставляя (3.33), (3.34) в (3.31) из (3.30) получим:

$$\cos \mu L = \cos q_1 a_1 \cos q_2 a_2 - \frac{q_1^2 + q_2^2}{2q_1 q_2} \sin q_1 a_1 \sin q_2 a_2, \quad (3.35)$$

которая является известным выражением для квазиволнового числа, определяющего связь полного затухания волны в сверхрешетке с затуханием в каждом из слоев, образующих эту структуру (см., например, [66]).

Как видно из (3.28), (3.29) для исследования  $T_N(k)$ ,  $R_N(k)$  представляет интерес также знание явного вида следующего выражения:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\exp\{-ikL\}}{t(k)} - \frac{\exp\{ikL\}}{t(-k)} \right) = -i \left( \frac{q_1^2 + k^2}{2q_1 k} \cos q_2 a_2 \sin q_1 a_1 + \frac{q_2^2 + k^2}{2q_2 k} \cos q_1 a_1 \sin q_2 a_2 \right), \quad (3.36)$$

Выражения (3.28), (3.29) совместно с (3.35), (3.36) являются аналитическими выражениями амплитуд прохождения и отражения волны  $T_N(k)$ ,  $R_N(k)$  для  $N$  слойной идеальной системы со структурным элементом, состоящим из двух однородных слоев.

## §5. Однородный фотонный кристалл на основе нанокompозита

Ниже мы будем применять полученный результат (3.28), (3.29) для конкретной структуры, а именно, будем рассматривать одномерный фотонный кристалл на основе нанокompозита: металлические наночастицы – диэлектрическая матрица. Отметим, что композиционные среды с наночастицами благородных металлов представляют большой практический интерес при разработке различных оптических устройств [67-71]. Ясно, что оптические свойства таких сред определяются плазменными колебаниями в наночастицах и свойствами прозрачной матрицы.

Будем вычислять коэффициенты пропускания, отражения, поглощения для одномерного фотонного кристалла, состоящего из нанокompозита, содержащего металлические наночастицы, распределенные случайным образом в прозрачной матрице. Для определения диэлектрической проницаемости нанокompозита  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  будем использовать формулу Максвелла – Гарнета:

$$\frac{\varepsilon_{mix}(\omega) - \varepsilon_d}{\varepsilon_{mix}(\omega) + 2\varepsilon_d} = f \frac{\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_d}{\varepsilon_m(\omega) + 2\varepsilon_d}, \quad (3.37)$$

где  $f$  - относительный объем, занимаемый наночастицами,  $\varepsilon_m(\omega)$  - диэлектрическая проницаемость металла из которого изготовлены наночастицы,  $\varepsilon_d$  - диэлектрическая проницаемость матрицы, в которую погружаются наночастицы,  $\omega$  - частота излучения.

Используя (3.37) можем записать:

$$\varepsilon_{mix}(\omega) = \varepsilon_d \frac{\varepsilon_m(\omega)(1+2f) - \varepsilon_d(f-1)}{\varepsilon_m(\omega)(1-f) + \varepsilon_d(2+f)}, \quad (3.38)$$

из которого, в частности, следует, что при  $f = 1$  (весь объем матрицы занимают металлические наночастицы) имеет место равенство  $\varepsilon_{mix} = \varepsilon_m$ , а при  $f = 0$  (в объеме матрицы отсутствуют металлические наночастицы)  $\varepsilon_{mix} = \varepsilon_d$ . Диэлектрическую проницаемость металла наночастиц  $\varepsilon_m(\omega)$ , мы будем определять согласно модели Друде;

$$\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3.39)$$

где  $\varepsilon_0$  - постоянная величина,  $\omega_p$  - плазменная частота,  $\gamma$  - постоянная релаксации. В случае серебра  $\varepsilon_0 = 5$ ,  $\hbar\omega_p = 9 \text{ эВ}$ ,  $\hbar\gamma = 0.02 \text{ эВ}$ . Далее, во всех расчетах мы будем рассматривать наноккомпозит на основе серебра. Запишем  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  в виде

$$\varepsilon_{mix}(\omega) = \varepsilon'_{mix}(\omega) + i\varepsilon''_{mix}(\omega), \quad (3.40)$$

где  $\varepsilon'_{mix}(\omega)$ ,  $\varepsilon''_{mix}(\omega)$  являются действительной и мнимой частями диэлектрической проницаемости наноккомпозита.



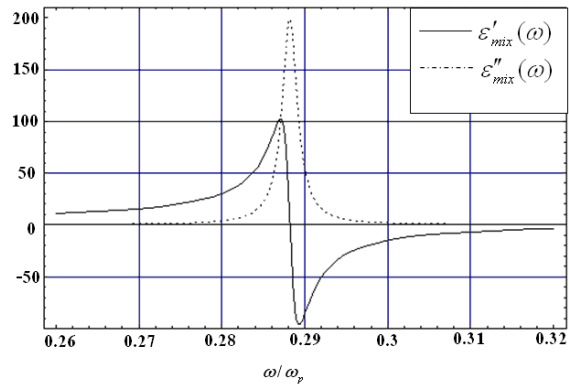


Рис. III.1 Зависимости  $\varepsilon'_{mix}(\omega)$ ,  $\varepsilon''_{mix}(\omega)$  безразмерной частоты  $\omega/\omega_p$ .

На Рис. III.1 мы представили зависимость  $\varepsilon'_{mix}(\omega)$ ,  $\varepsilon''_{mix}(\omega)$  от безразмерной частоты  $\omega/\omega_p$ . Как можно увидеть из рисунка, обе кривые имеют резонансный характер.

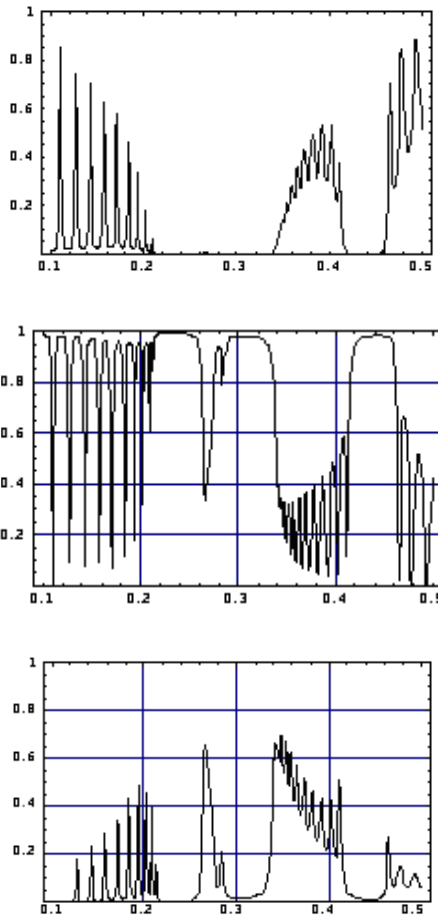


Рис. III.2 Зависимости коэффициентов пропускания, отражения и поглощения от безразмерной частоты  $\omega/\omega_p$ .

На Рис. III.2, мы привели графики зависимости коэффициентов прохождения, отражения и поглощения от приведенной частоты  $\omega/\omega_p$  для фононного кристалла из  $N=16$  элементных ячеек, каждая из которых состоит из композиционного слоя толщиной  $a_1$  с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_{mix}(\omega)$  и слоя толщиной  $a_2$  с диэлектрической проницаемостью равной единице. Значение фактора заполнения  $f$  было выбрано равным  $f=0.2$ . При выполнении расчетов размеры слоев отмечались в единицах плазменной длины волны ( $\lambda_p = 2\pi c/\omega_p$ ), толщины слоев были выбраны равными друг другу, а период структуры равным  $\lambda_p$  ( $L = a_1 + a_2$ ,  $a_1 = a_2$  и  $L = \lambda_p$ ).

Как видно из верхнего графика Рис. III.2 в рассматриваемой области частот существуют две зоны непропускания, причем с увеличением частоты ширина зон уменьшается. Заметим также, что не в одной точке коэффициент пропускания не принимает значение равное единице. Из этого, в частности, можно сделать вывод, что в неограниченной с обеих сторон, пространственно периодической поглощающей структуре не может существовать гармоничный во времени волновой процесс и, что любой волновой процесс в такой системе обречен на затухание. Как следует из среднего и нижнего графиков Рис. III.2, причинами непропускания могут служить как отражение, так и поглощение.

## ГЛАВА IV

### ЭВОЛЮЦИЯ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ ИЗ МАТЕРИАЛЬНЫХ ВОЛН В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Данная глава посвящена задаче описания эволюции волновых процессов на примере распространения материальных волн в поле одномерного потенциала произвольного вида. Показано, что в отличие от эволюционной задачи классической механики, для волнового процесса независимость уравнения движения, в данном случае волнового уравнения или уравнения распространения волны, от начальных условий, в данном случае начального вида волнового возмущения, в определенной мере является условной.

Хорошо известно, что динамика произвольной системы вне зависимости от характера осуществляемых внутренних и внешних взаимодействий во многом предопределяется начальным условием, которое должно быть задано в соответствии с физической постановкой задачи. Только лишь правильная, адекватная постановке задаче математическая запись начального состояния позволяет построить удовлетворительную картину эволюционного развития системы. Если для систем с одним или несколькими степенями свободы связь постановки задачи с начальным условием может считаться вполне прозрачной, то для систем со многими связанными между собой степенями свободы, например, волновое поле, проблема адекватной записи начального условия имеет место быть [72-81].

В отрыве от волнового уравнения удовлетворительная запись вида начального возбуждения может быть осуществлена разве что для волновых процессов протекающих в однородной среде. Только лишь в данном случае известно как на основе гармонических во времени и в пространстве группы волн, а именно Фурье волн, составлять волновые пакеты с заранее известным эволюционным поведением, т.е. как будет выглядеть данное волновое

возбуждение в последующий момент времени [82-94]. Вместе с тем, в случае неоднородных сред, моделирование начального возбуждения на основе групп из Фурье волн может привести к нефизической эволюционной картине. Так, может проявиться следующая ситуация: прежде чем начальное возбуждение достигает неоднородной области может возникнуть отраженная волна.

Для пропекающегося в неоднородной среде волнового процесса корректная постановка эволюционной задачи, также как для однородного случая, должна быть выполнена посредством представления начального состояния в виде группы гармонических по времени волн, являющимися собственными волновыми модами для данной среды. В отличие от Фурье волн, гармоничных также по пространственной переменной, в общем случае пространственная зависимость собственных мод должна быть определена решением соответствующего стационарного волнового уравнения [91-104]. Т.е. для рассмотрения или постановки нестационарной задачи решение стационарной задачи имеет принципиальное значение, т.к. только лишь в базисе собственных мод возможна запись начального условия, приводящего к адекватной физической постановке задачи эволюционной картине [105-106].

### **§1. Постановка эволюционной задачи и базис для его решения**

Как для материальных тел, так и в случае волновых процессов, временное развитие системы во многом определяется не только уравнениями движения, но и стартовыми условиями. Заметим, что в случае волновых процессов уравнениями движения являются волновые уравнения, а стартовые условия это вид начального возбуждения. Так, для материальных волн, эволюция которых происходит в соответствии с временным уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Phi(x,t),$$

Ошибка! Закладка не определена.

вследствие наличия только лишь первой производной по времени, начальное состояние задается одной функцией:

$$\Phi(x, 0) = \Phi_0(x), \quad (3.1)$$

где  $\hat{H}$  Гамильтониан системы, который для одной частицы в случае одномерного потенциала имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x),$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

где  $U(x)$  - потенциальная энергия.

Формально из **Ошибка! Закладка не определена.** временная функция  $\Phi(x, t)$  может быть получена из начального вида  $\Phi_0(x)$  в соответствии с формулой:

$$\Phi(x, t) = \exp\left[-i \frac{\hat{H}t}{\hbar}\right] \Phi_0(x).$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Следует заметить, что в случае, например, электромагнитных волн, где волновое уравнение содержит вторую производную во времени, начальное состояние волнового движения, в отличие от(3.1), уже должно задаваться двумя функциями. Отметим также, что для случая, когда  $U(x)$  является реальной функцией, как известно, имеет место сохранение во времени нормировки волновой функции;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(x, t) \Phi^*(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0(x) \Phi_0^*(x) dx = 1, \quad (3.2)$$

которую мы будем рассматривать равной единице.

Представляет интерес воспроизведение (3.4) на основе метода конечных разностей. Записывая в **Ошибка! Закладка не определена.** в виде  $\partial\Phi(x, t) / \partial t = [\Phi(x, t + \Delta t) - \Phi(x, t)] / \Delta t$ , для значения волновой функции в произвольный момент времени  $t = n\Delta t$  имеем:

$$\begin{aligned} \Phi(x, n\Delta t) &= \left(1 + \frac{\hat{H}}{i\hbar} \Delta t\right)^n \Phi(x, 0) = \\ &= \left(1 + C_1^n \frac{\hat{H}}{i\hbar} \Delta t + C_2^n \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} \Delta t\right)^2 + C_3^n \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} \Delta t\right)^3 + \dots + C_n^n \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} \Delta t\right)^n\right) \Phi(x, 0), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где  $C_m^n$  хорошо известные биномиальные коэффициенты:

$$C_m^n = \frac{n!}{(n-m)!m!}.$$

Заметим, что если  $t = n\Delta t$  является конечной величиной, то когда  $n \rightarrow \infty$ , то  $\Delta t \rightarrow 0$ . Рассматривая  $\Delta t = t/n$  из(3.3) можем записать:

$$\Phi(x, t) = \left(1 + \frac{C_1^n}{n} \frac{\hat{H}}{i\hbar} t + \frac{C_2^n}{n^2} \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} t\right)^2 + \frac{C_3^n}{n^3} \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} t\right)^3 + \dots + \frac{C_n^n}{n^n} \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar} t\right)^n\right) \Phi(x, 0). \quad (3.4)$$

Легко проверить, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{C_m^n}{n^m} = \frac{1}{m!}.$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

Учитывая **Ошибка! Закладка не определена.** легко увидеть, что  $n \rightarrow \infty$  **Ошибка! Закладка не определена.** переходит в **Ошибка! Закладка не определена.**

Ниже, мы будем исследовать проблему (3.1), (3.1)(1) на основе разложения волновой функции по некоторому базису ортогональной функции. Выберем в качестве последних волновые функций рассеяния;

$$\psi_l(x, k) \exp\left(-\frac{ik^2\hbar}{2m} t\right), \quad \psi_r(x, k) \exp\left(-\frac{ik^2\hbar}{2m} t\right). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где, функции  $\psi_l(x, k)$  и  $\psi_r(x, k)$  являются решениями стационарного уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{l,r}(x, k) + (k^2 - u(x)) \psi_{l,r}(x, k) = 0, \quad (3.5)$$

и имеют следующие асимптотические поведения:

$$\psi_l(x, k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} e^{ikx} + R(k) e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ T(k) e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.6)$$

и

$$\psi_r(x, k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} T(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ e^{-ikx} + P(k)e^{ikx}, & x \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (3.7)$$

где  $k > 0$  и введены обозначения  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ,  $u(x) = 2mU(x)/\hbar^2$ , и  $E$  - полная энергия, а функцию  $u(x)$ , мы для удобства, будем называть потенциалом. Как было показано выше, волновые функции левой и правой задач рассеяние, для потенциала произвольного вида  $u(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  ортогональны друг другу и нормированы на delta функцию;

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_r(x, k)\psi_l(x, -k')dx = 0, \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{l,r}(x, k)\psi_{l,r}(x, -k')dx = \delta(k - k'). \quad (3.8)$$

Рассмотрим волновой пакет, составленный на основе волн рассеяния (3.6), (3.7)

$$\Phi(x, t) = \int_0^{\infty} [v_l(k)\psi_l(x, k) + v_r(k)\psi_r(x, k)] \exp\left(-\frac{ik^2\hbar}{2m}t\right) dk, \quad \text{Ошибка! Закладка не}$$

**определена.**

где функции  $v_l(k)$ ,  $v_r(k)$  определяют спектральный состав пакета. Так как функции  $\psi_r(x, k)$ ,  $\psi_l(x, k)$  являются безразмерными, а  $\Phi(x, t)$  имеет размерность  $[1/\sqrt{x}] = [\sqrt{k}]$ , то согласно (3.14) величины  $v_l(k)$ ,  $v_r(k)$  имеют размерность  $[1/\sqrt{k}]$ .

Воспользовавшись (3.8) для спектральных коэффициентов  $v_l(k)$ ,  $v_r(k)$  легко получить:

$$v_l(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(x)\psi_l^*(x, k)dx, \quad v_r(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(x)\psi_r^*(x, k)dx. \quad (3.9)$$

Данные формулы являются аналогом Фурье преобразования, где в качестве базиса разложения, вместо гармонических по времени и по пространственной координате функций, используются волновые функции рассеяния.

## §2. Бездисперсионное рассеяние и причинность в процессе рассеяния.

Согласно **Ошибка! Закладка не определена.** нами рассматривается волновой процесс из двух волновых процессов, составленных на базе волновых функций для левой и правой задач рассеяния;

$$\Phi(x, t) = \Phi_l(x, t) + \Phi_r(x, t). \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Как легко увидеть из **Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена.** если выполняется (3.2), то

$$\int_0^{\infty} v_l(k)v_l^*(k) + v_r(k)v_r^*(k)dk = 1. \quad \text{Ошибка! Закладка не}$$

**определена.**

Будем предполагать, что потенциал отличен от нуля внутри некоторого интервала, вне которого он тождественно равен нулю;

$$u(x) = 0, \text{ когда } x < L_l \text{ и } x > L_r, (3.10)$$

Ясно, что  $L_l < L_r$ . Далее мы будем предполагать, что спектральные составы левых и правых волн отличаются фазовым множителем:

$$v_l(k) = v(k) \exp\{-ikL_l\}, \quad v_r(k) = v(k) \exp\{ikL_r\}, (3.11)$$

где

$$v(k) = \begin{cases} 0, & k < k_n - \Delta k_0, \\ \frac{1}{2\sqrt{\Delta k_0}}, & k_n - \Delta k_0 < k < k_n + \Delta k_0, \text{Ошибка! Закладка не определена.} \\ 0, & k > k_n + \Delta k_0. \end{cases}$$

Здесь  $k_n$  соответствует значению волнового числа в центре спектрального состава пакетов. Важно отметить, что вся эволюционная картина и, в частности, выбор в начальный момент времени формы и направления движения волнового процесса заключены в функциональной зависимости  $v(k)$ .

Используя **Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена., Ошибка! Закладка не определена.** для асимптотического вида волнового процесса можем записать: при  $x < L_l$



$$\Phi(x < L_l, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \cdot \int_{k_n - \Delta k_0}^{k_n + \Delta k_0} (\exp\{ik(x - L_l)\} + R(k) \exp\{-ik(x + L_l) + T(k) \exp\{-ik(x - L_r)\}) \exp\left\{\frac{-iE(k)t}{\hbar}\right\} dk, \quad (3.12)$$

и при  $x > L_r$

$$\Phi(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \cdot \int_{k_n - \Delta k_0}^{k_n + \Delta k_0} (T(k) \exp\{ik(x - L_l)\} + P(k) \exp\{ik(x + L_r)\} + \exp\{-ik(x - L_r)\}) \exp\left\{\frac{-iE(k)t}{\hbar}\right\} dk, \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

где

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Представленные выше интегралы, в общем случае, при наличии зависимости амплитуд рассеяния от  $k$  не поддаются аналитическому вычислению. Однако, они позволяют в общих чертах понять динамику процесса. Для этого в рассматриваемом спектральном интервале, учитывая его малость, пренебрежем зависимостью  $T(k)$ ,  $R(k)$ ,  $P(k)$  и будем полагать, что внутри них они принимают постоянные значения;

$$T(k) = T(k_n), R(k) = R(k_n), P(k) = P(k_n). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Отметим, что при  $\Delta k_0 \ll k_n$ , далее мы будем полагать, что имеет место равенство:

$$k^2 = (k_n + (k - k_n))^2 \approx k_n^2 + 2k_n(k - k_n). \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** для **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** можем написать;

$$\Phi(x < L_l, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \left( \exp\{ik_n(x - L_l - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x - L_l)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x - L_l)/u_g - t} + \right. \\ \left. + R(k_n) \exp\{-ik_n(x + L_l - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x + L_l)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x + L_l)/u_g - t} + \right. \\ \left. + T(k_n) \exp\{-ik_n(x - L_r + u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x - L_r)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x - L_r)/u_g - t} \right), \quad (3.13)$$

$$\Phi(x > L_r, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \left( \exp\{-ik_n(x - L_r + u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x - L_r)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x - L_r)/u_g - t} + \right. \\ \left. + P(k_n) \exp\{ik_n(x + L_r - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x + L_r)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x + L_r)/u_g - t} + \right. \\ \left. + T(k_n) \exp\{ik_n(x + L_r - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\frac{(x + L_l)/u_g - t}{u_g} \Delta k_0\right]}{(x + L_l)/u_g - t} \right), \text{Ошибка! Закладка не}$$

определена.

где

$$u_{ph} = \frac{\hbar k_n}{2m} = \sqrt{\frac{E_n}{2m}} = \frac{1}{\hbar} \frac{E(k_n)}{k_n}, \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$u_g = \frac{\hbar k_n}{m} = \sqrt{\frac{2E_n}{m}} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k_n)}{dk}, \quad (3.14)$$

а также введены обозначения  $E_n = E(k_n)$  и  $dE(k_n)/dk$  значение  $dE(k)/dk$  в точке  $k = k_n$ . Заметим, что различие между скоростями  $u_{ph}$  и  $u_g$  есть результат дисперсионного закона  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ , вследствие которого  $E/k \neq dE/dk$ .

Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** в обеих областях вне зоны потенциала имеются три волновых

пакета. Будем записывать волновое поле для каждой из областей в виде следующей суммы:

$$\Phi(x,t) = \Phi_l^{inc}(x,t) + \Phi_l^{ref}(x,t) + \Phi_l^{trn}(x,t), \quad x < L_l, \quad (3.15)$$

$$\Phi(x,t) = \Phi_r^{inc}(x,t) + \Phi_r^{ref}(x,t) + \Phi_r^{trn}(x,t), \quad x > L_r, \quad (3.16)$$

где

$$\Phi_l^{inc}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \exp\{ik_n(x - L_l - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x - L_l)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x - L_l)}{u_g} - t\right)u_g},$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$\Phi_l^{ref}(x,t) = \frac{R(k_n)}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \exp\{-ik_n(x + L_l - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x + L_l)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x + L_l)}{u_g} - t\right)u_g},$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

$$\Phi_l^{trn}(x,t) = \frac{T(k_n)}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \exp\{-ik_n(x - L_r + u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x - L_r)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x - L_r)}{u_g} - t\right)u_g}$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

и

$$\Phi_r^{inc}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \exp\{-ik_n(x - L_r + u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x - L_r)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x - L_r)}{u_g} - t\right)u_g}, \quad (3.17)$$

$$\Phi_r^{ref}(x,t) = \frac{P(k_n)}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} P(k_n) \exp\{ik_n(x + L_r - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x + L_r)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x + L_r)}{u_g} - t\right)u_g}, \quad (3.18)$$

$$\Phi_r^{trn}(x,t) = \frac{T(k_n)}{\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \exp\{ik_n(x + L_r - u_{ph}t)\} \frac{\sin\left[\left(\frac{(x + L_l)}{u_g} - t\right)u_g \Delta k_0\right]}{\left(\frac{(x + L_l)}{u_g} - t\right)u_g} \triangleright \quad (3.19)$$

Заметим, что  $\Phi_l^{inc}(x,t)$ ,  $\Phi_r^{inc}(x,t)$  являются падающими на барьер волновыми пакетами с его левой и правой сторон, соответственно. Функции  $\Phi_l^{ref}(x,t)$ ,

$\Phi_r^{ref}(x, t)$  соответствуют отраженным от барьера с лева и с справа волнам, которые являются следствием наличия падающих на обе стороны барьера волн. Удаляющийся в  $-\infty$  волновой пакет  $\Phi_l^{tun}(x, t)$  соответствует туннелировавшей в левую область от потенциала части пакета  $\Phi_r^{inc}(x, t)$ , а пакет распространяющийся в  $+\infty$  пакет  $\Phi_r^{tun}(x, t)$  является следствием туннелирования волны  $\Phi_l^{inc}(x, t)$ .

Все волновые пакеты (3.32)-(3.19), вследствие множителя вида  $\sin y / y$  представляют собой сгустки волнового возбуждения, сосредоточенного возле точки  $y = 0$  (см. Глава I, §2). Так, например,  $\Phi_l^{inc}(x, t)$  может считаться заметно отличным от нуля, если выполняется условие  $(x - L_l) / u_g - t = 0$ .

Будем прослеживать волновой процесс в точках  $x = L_l$  и  $x = L_r$ . Как видно из (3.32) - (3.34) в момент времени  $t = 0$  в точке  $x = L_l$  заметным от нуля является только значение функции  $\Phi_l^{inc}(x, t)$ , в то время как  $\Phi_l^{ref}(x, t)$  и  $\Phi_l^{tun}(x, t)$  близки к нулю;

$$\Phi_l^{inc}(L_l, 0) \neq 0, \quad \Phi_l^{ref}(L_l, 0) \approx 0, \quad \Phi_l^{tun}(L_l, 0) \approx 0. \quad (3.20)$$

Легко также заметить, что в точке  $x = L_l$  в момент времени

$$t = \tau_l^r = 2L_l / u_g \quad (3.21)$$

отличным от нуля становится  $\Phi_l^{ref}(x, t)$ , в то время как  $\Phi_l^{inc}(x, t)$  и  $\Phi_l^{tun}(x, t)$  при условии в момент времени близки к нулю;

$$\Phi_l^{inc}(L_l, \tau_l^r) \approx 0, \quad \Phi_l^{ref}(L_l, \tau_l^r) \neq 0, \quad \Phi_l^{tun}(L_l, \tau_l^r) \approx 0. \quad (3.22)$$

Используя (3.32) - (3.34) для момента времени

$$t = \tau_l^{tun} = (L_r - L_l) / u_g, \quad (3.23)$$

в  $x = L_l$  получим;

$$\Phi_l^{inc}(L_l, \tau_l^{tun}) \approx 0, \quad \Phi_l^{ref}(L_l, \tau_l^{tun}) \approx 0, \quad \Phi_l^{tun}(L_l, \tau_l^{tun}) \neq 0. \quad (3.24)$$

Аналогичное рассуждение может также быть проведено для волновых пакетов в области правее от потенциала в точке  $x = L_r$ ;

$$\Phi_r^{inc}(L_r, 0) \neq 0, \Phi_r^{ref}(L_r, 0) \approx 0, \Phi_r^{tun}(L_r, 0) \approx 0, (3.25)$$

$$\Phi_r^{inc}(L_r, \tau_l^r) \approx 0, \Phi_r^{ref}(L_r, \tau_l^r) \neq 0, \Phi_r^{tun}(L_r, \tau_l^r) \approx 0, (3.26)$$

$$\Phi_r^{inc}(L_r, \tau_r^{tun}) \approx 0, \Phi_r^{ref}(L_r, \tau_r^{tun}) \neq 0, \Phi_r^{tun}(L_r, \tau_r^{tun}) \approx 0, (3.27)$$

где

$$\tau_l^r = 2L_r/u_g, \tau_r^{tun} = (L_r - L_l)/u_g. \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Как видно из **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** в недисперсионном случае при условии  $L_r = L_l$  максимумы падающих и туннелированных волн по обе стороны потенциала совпадают, и процесс туннелирования происходит с групповой скоростью. Заметим также время отражения всегда больше времени туннелирования. Таким образом, согласно выше изложенному, между волновыми процессами  $\Phi_l^{inc}(x, t)$ ,  $\Phi_r^{inc}(x, t)$  и  $\Phi_l^{ref}(x, t)$ ,  $\Phi_l^{tun}(x, t)$ ,  $\Phi_r^{ref}(x, t)$ ,  $\Phi_r^{tun}(x, t)$  существует причинно-следственная связь. Волновой процесс  $\Phi_l^{inc}(x, t)$  порождает  $\Phi_l^{ref}(x, t)$  и  $\Phi_r^{tun}(x, t)$ , а процесс  $\Phi_r^{inc}(x, t)$  приводит к  $\Phi_r^{ref}(x, t)$ ,  $\Phi_r^{tun}(x, t)$ .

### §3. Квазисвязанные состояния

Выше мы рассмотрели процесс рассеяния волновых пакетов для случая, когда пренебрегалась зависимость амплитуд рассеяния от волнового числа. Однако, во многих отношениях это является грубым приближением, позволяющий только лишь в общих деталях описание картины процесс. Далее мы будем исследовать эволюционную волновую задачи, когда дисперсионную зависимость амплитуд рассеяния рассматривается в некотором приближение.

Запишем амплитуды рассеяния в следующем виде:

$$T(k) = \exp \{ \ln |T(k)| + i\Phi_T(k) \}, \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$R(k) = \exp \left\{ \ln |R(k)| + i\Phi_R(k) \right\}, \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$P(k) = \exp \left\{ \ln |P(k)| + i\Phi_P(k) \right\}, \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Разлагая модули и фазы амплитудных функций в ряд Тейлора в окрестности центра пакета, и ограничиваясь только линейными членами, можем написать;

$$T(k) \approx T(k_n) \exp \left\{ \left( \frac{\partial \ln |T(k_n)|}{\partial k} + i \frac{\partial \Phi_T(k_n)}{\partial k} \right) (k - k_n) \right\}, \text{Ошибка!}$$

Закладка не определена.

$$R(k) \approx R(k_n) \exp \left\{ \left( \frac{\partial \ln |R(k_n)|}{\partial k} + i \frac{\partial \Phi_R(k_n)}{\partial k} \right) (k - k_n) \right\}, \text{Ошибка!}$$

Закладка не определена.

$$P(k) \approx P(k_n) \exp \left\{ \left( \frac{\partial \ln |P(k_n)|}{\partial k} + i \frac{\partial \Phi_P(k_n)}{\partial k} \right) (k - k_n) \right\}. \text{Ошибка! Закладка не}$$

определена.

Далее мы будем рассматривать случай, когда группа волн составлена с центром при значении  $k_n$  соответствующему резонансному прохождению. В этом случае

$$R(k_n) = P(k_n) = 0 \text{ и } |T(k_n)| = 1, \text{Ошибка! Закладка не}$$

определена.

и следовательно амплитуда прохождения определяется только лишь своей фазой:

$$T(k) \approx \exp \left\{ i \frac{\partial \Phi_T(k_n)}{\partial k} (k - k_n) \right\}. \text{Ошибка! Закладка не}$$

определена.

Используя **Ошибка! Закладка не определена.**, **Ошибка! Закладка не определена.** для **Ошибка! Закладка не определена.** и **Ошибка! Закладка не определена.** можем написать:

$$\Phi(x < L_l, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \cdot \int_{k_n - \Delta k_0}^{k_n + \Delta k_0} (\exp\{ik(x - L_l)\} + \exp\left\{i \frac{\partial \Phi_T(k_n)}{\partial k} (k - k_n)\right\} \exp\{-ik(x - L_l)\}) \exp\left\{\frac{-iE(k)t}{\hbar}\right\} dk, \quad (3.28)$$

$$\Phi(x > L_r, t) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi \Delta k_0}} \cdot \int_{k_n - \Delta k_0}^{k_n + \Delta k_0} \left( \exp\left\{i \frac{\partial \Phi_T(k_n)}{\partial k} (k - k_n)\right\} \exp\{ik(x - L_l)\} + \exp\{-ik(x - L_r)\} \exp\left\{\frac{-iE(k)t}{\hbar}\right\} \right) dk, \quad (3.29)$$

Ниже данные формулы мы использовать для рассмотрения процесса рассеяния на двойном барьере из прямоугольных потенциалов.

Рассмотрим симметричный двойной барьер из двух прямоугольных потенциалов. Для удобства предположим, что барьер симметричен относительно начала координат;

$$u(x) = \begin{cases} 0, & x < -a, \\ V, & -a < x < -a + d, \\ 0, & -a + d < x, a - d \\ 0, & x > a. \end{cases} \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно (3.57)  $d$  есть ширина барьеров.

В соответствии с формулами (2.130)- (2.132) выразим амплитуды рассеяния для двойной структуры, через амплитуды прохождения и отражения левой и правой задач рассеяния для первого и второго барьеров  $t_I, r_I, p_I$  и  $t_{II}, r_{II}, p_{II}$ . Учитывая, что барьеры являются идентичными, имеем:

$$t_I = t_{II} = t(k), \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$r_I = r(k) \exp\{2ik(a - d/2)\}, \quad r_{II} = r(k) \exp\{-2ik(a - d/2)\}, \quad (3.30)$$

$$p_I = p(k) \exp\{-2ik(a - d/2)\}, \quad p_{II} = p(k) \exp\{2ik(a - d/2)\}, \quad (3.31)$$

где

$$\frac{1}{t(k)} = \exp\{ikd\} \left[ \cos\{qd\} - i \frac{k^2 + q^2}{2kq} \sin\{qd\} \right], \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

$$r(k) = p(k) = \frac{i \frac{q^2 - k^2}{2kq} \sin\{qd\}}{\cos\{qd\} - i \frac{k^2 + q^2}{2kq} \sin\{qd\}} \exp\{-ikd\},$$

**Ошибка! Закладка не определена.**

где  $q = \sqrt{V - k^2}$ .

Используя данные формулы, для амплитуд рассеяния двойной структуры из (2.130)- (2.132);

$$T(k) = \frac{t^2(k)}{1 - r^2(k) \exp\{-4ik(a - d/2)\}}, \quad (3.32)$$

$$R(k) = P(k) = r(k) \left[ \exp\{2ik(a - d/2)\} + \frac{t^2(k) \exp\{-2ik(a - d/2)\}}{1 - r^2(k) \exp\{-4ik(a - d/2)\}} \right]. \quad (3.33)$$

Согласно условию резонансного прохождения, величины  $k_n$  (значения волновых чисел при которых имеет место резонансное прохождение) определяются уравнением:



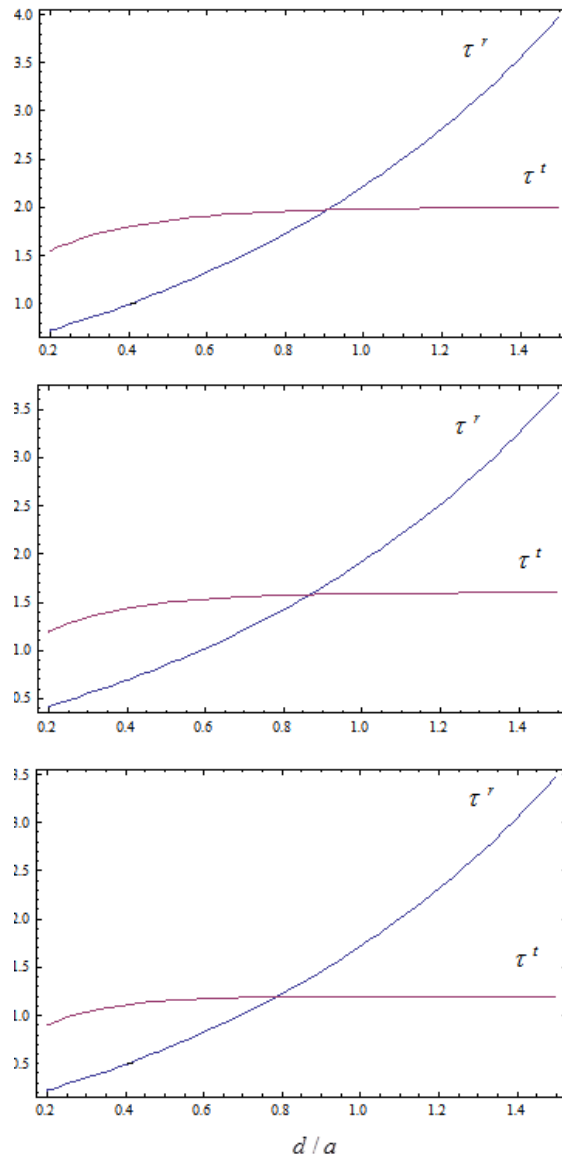


Рис. IV.1  $\tau^r u_g / a$  и  $\tau^t u_g / a$  от ширины барьеров  $d/a$  для трех различных значений  $k_n$  резонансного прохождения ( $Va^2 = 7$ , при  $d/a = 0.2$  имеются три резонанса).

$$\exp\{2ik_n(a-d/2)\} + \frac{t^2(k_n)\exp\{-2ik_n(a-d/2)\}}{1-r_n^2(k)\exp\{-4ik(a-d/2)\}} = 0, \quad (3.34)$$

которое следует из условия:

$$P(k_n) = 0. \quad \text{Ошибка! Закладка не определена.}$$

Согласно (3.66)  $|P(k_n)| = 0$ , вместе с тем фаза (3.48) (или (3.49)), остается неопределенной. Ниже мы будем связывать время распада связанного

состояния с поведением фазы амплитуды отражение, а именно временем появления  $\tau^r$  максимума отраженной волны.

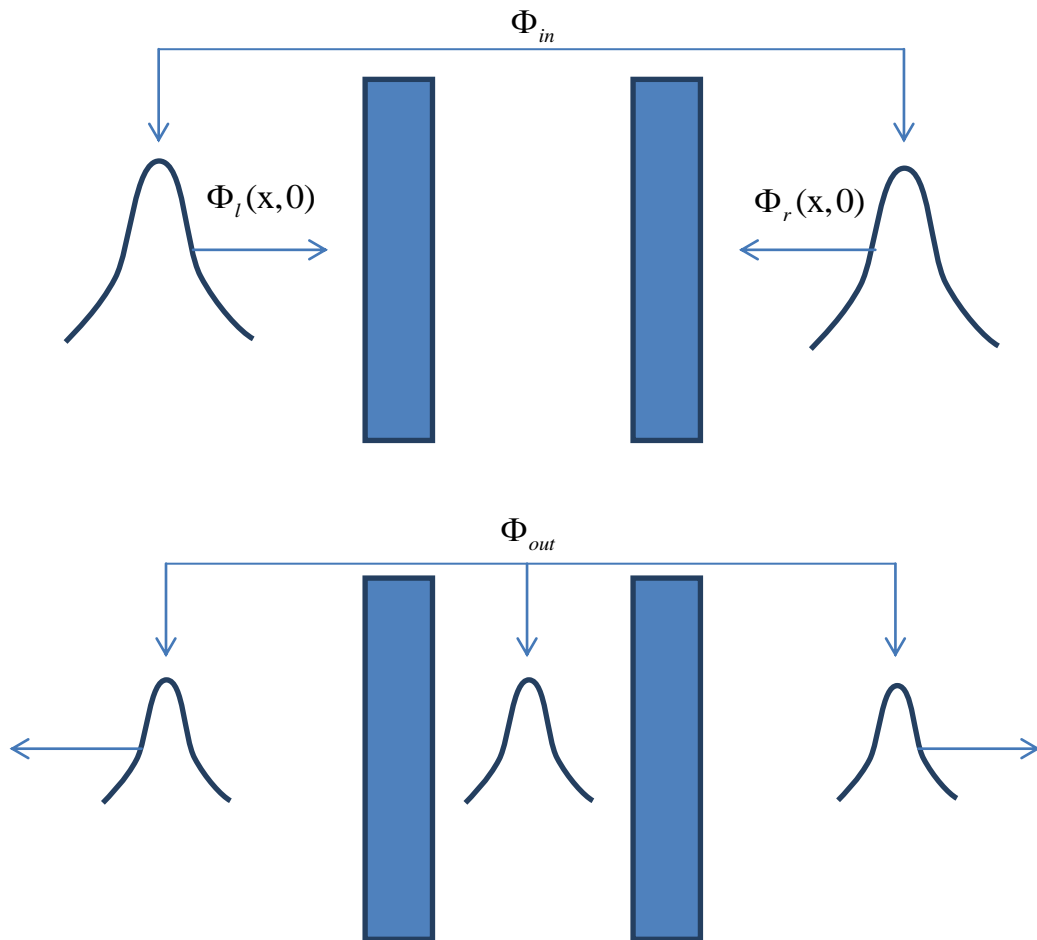


Рис. IV.2. Схематическое представление процесса образования квазисвязанного состояния.

Так как потенциал симметричный, то в точке  $\tau_i^r = \tau_p^r = \tau^r$  и  $\tau_i^l = \tau_p^l = \tau^l$ . Далее, мы будем измерять времена туннелирования и распада в единицах  $d/u_g$ , а длину в единицах  $a$ . На рисунке Рис. IV.1 представлены зависимости времени отражения и времени туннелирования от ширины барьеров. Рисунки сверху вниз соответствуют от меньшего значения  $k_n$  к большему. Параметры потенциала выбраны таким образом, чтобы начиная с некоторой ширины потенциала, имелись три резонанса. Как видно из представленных графиков,

во всех трех случаях время туннелирование стремится к конечному пределу, в то время как время отражения стремится к бесконечности. Последнее означает, что внутри барьера образовалось связанное состояние.

Конечность времени образования квазисвязанного состояния тесным образом связана с так называемым эффектом Хартмана, согласно которому для достаточно широкого барьера время прохождения сквозь него волнового возмущения не зависит от его ширины [19,24]. Бесконечность времени распада квазисвязанного состояния однозначно указывает на то, что оно уже является связанным, из чего, в частности следует, что связанные состояния могут рассматриваться как результат эволюции волновых процессов (см. Рис. IV.2).

## ПРИЛОЖЕНИЕ I

Важно отметить, что замена в принципе суперпозиции словосочетания амплитуда вероятности на вероятность делает его утверждение созвучным с утверждением принципа инвариантного погружения Амбарцумяна. Как известно долгое время принцип погружения являлся основным инструментом для описания различных процессов переноса в случайно-неоднородных средах, когда правомочна или удовлетворительна замена волнового поля неким средним полем интенсивности. Применительно к нашей задаче для случая среды без энергетических потерь принцип инвариантного погружения приводит к следующему результату:

$$\tau = \frac{\tau_I \tau_{II}}{1 - \rho_I \rho_{II}}, \quad \rho = \rho_I + \frac{\tau_I^2 \rho_{II}}{1 - \rho_I \rho_{II}}, \quad (\text{P. 1.1})$$

где величины  $\tau$ ,  $\tau_I$ ,  $\tau_{II}$  и  $\rho$ ,  $\rho_I$ ,  $\rho_{II}$  представляют собой усредненные по случайным параметрам среды коэффициенты прохождения и отражения волны для слоя, а также для его первой и второй частей, соответственно. Заметим, что для среды без энергетических потерь коэффициенты отражения левой и правой задач рассеяния равны друг другу.

Ясно, что формулы (P. 1.1) могут иметь место только лишь в случае некогерентного рассеяния, когда фазовым вкладом рассеянных от различных областей среды возбуждений в интенсивности отраженной и прошедших волн пренебрегается. Заметим, что при учете набега фаз замкнутые по отношению к интенсивности волн уравнения не имеют место, т.е. уравнения амплитуд проявляется также наличие. Из формул (P. 1.1) также следует, что если величины характеризующие свойства отражения и прохождения отдельных слоев системы подчиняются условию нормировки, т.е.

$$\tau_I + \rho_I = 1, \quad \tau_{II} + \rho_{II} = 1, \quad (\text{P. 1.2})$$

то соответствующие величины для всей системы также подчиняются данному условию;

$$\tau + \rho = 1. \quad (\text{Р. 1.3})$$

В соответствии с принципом инвариантного погружения, формирующийся в результате многократных отражений процесс переноса излучения может быть для случайно-неоднородных сред описан на основе вероятностных законов. В указанном выше смысле принцип суперпозиции для амплитуд вероятности является, по сути, обобщенным принципом инвариантного погружения. Амплитуды вероятности переходов, аналогично вероятностям в случае принципа инвариантного погружения, также подчиняются законам сложения и умножения для альтернативных и сложных событий.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере материальных волн в наиболее общей форме проведено исследование стационарного одномерного движения в поле комплексного потенциала произвольного вида. Исследовалось как финитное, так и инфинитное движение. Показано, что данная, являющаяся в своей постановке краевая задача, может быть переформулирована в виде начальной задачи для определенной системы уравнений. Данное обстоятельство представляется особенно важным в плане выполнения численных расчетов.

Установлена связь условия нормировки волновой функций непрерывного спектра с ее асимптотическим значением. Доказано, что вне зависимости от выбора представления, значение константы нормировки волновой функции произвольного инфинитного движения совпадает со значением константы нормировки для свободного движения. Получена общая формула, выражающая значения волновой функции в произвольной точке от амплитуд рассеяния для частей потенциала левее и правее от данной точки.

Получена связь элементов трансфер матрицы и матрицы рассеяния с амплитудами отражения и порождения левой и правой задач рассеяния для комплексного потенциала произвольного вида. Показано, что задача определения связанных состояний связана с проблемой исследования аналитических свойств амплитуд рассеяния, в частности их значения на положительной мнимой оси.

Для амплитуд рассеяния периодической системы, при наличии в среде поглощения, найдены общие формулы в зависимости от амплитуд рассеяния структурного элемента, а также количества слоев. Исследован пример нанокompозита на предмет спектральных свойств поглощения, отражения и прохождения. На примере системы из двух одинаковых прямоугольных потенциалов исследована динамика волнового процесса, приводящего к образованию квазисвязанного состояния локализованного внутри ямы в области между потенциалами. Показано, что при неограниченном увеличении

ширины прямоугольных барьеров, когда неизменной толщине разделяющей их потенциальной ямы остается неизменной, время образования квазисвязанного состояния стремится к конечному пределу, в то время как время распада стремится к бесконечности. Из данного положения, в частности, следует, что связанные состояния по своей сути являются волновыми пакетами.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. Honl, A. W. Maue, K. Westpfahl. Theorie der beugung. Berlin: Springer – Verlag (1961).
2. D. Bohm. Quantum Theory. NY: Prentice-Hall (1989).
3. M. B. Vinogradova, O. V. Rudenko, A. P. Sukhorukova. The Theory of Waves. Nauka, Moscow (1979).
4. M. Jalal IhsanShatah, Michael Struwe. The linear wave equation. American Mathematical Society Bookstore. pp. 37 ff. ISBN 0-8218-2749-9.
5. A. E. Kaplan, I. Marzoli, W. E. Lamb, W. P. Schleich. Highly regular pattern formation in quantum wave-packet evolution. Phys. Rev. A, vol. 61, Issue 3 (2000).
6. DimitrieCulcer, Yugui Yao, Qian Niu. Coherent wave-packet evolution in coupled bands. Phys. Rev. B **72**, 085110 (2005).
7. Sheng Zhang, Bing Hu, Patrick Sebbah, Azriel Z. Genack. Speckle Evolution of Diffusive and Localized Waves. Phys. Rev. Lett. **99**, 063902 (2007).
8. P. Yeh, Optical Waves in Layered Media (Wiley,1988).
9. A. Yariv, P. Yeh, Optical Waves in Crystals (Wiley,1984).
- 10.J. S. Bell. Speakable and Unspeakable In Quantum Mechanics. Cambridge: CambridgeUniversityPress, 2004.
- 11.R. Y. Chiao. Superluminal (but causal) propagation of wave packets in transparent media with inverted atomic populations. Phys. Rev. A, **48**, R34 (1993).
- 12.V. A. Ambartsumyan. The invariance principle and its application (M. A. Mnatsakanyan, O. V. Pikuchyan, etc.). Proc. All-union Symp. Devoted to the 40-th anniversary of the introduction of the invariance principle in the theory of radiation transfer, Byurakan (1981).
- 13.P. Erdos, R. C. Herndon. Theories of electrons in one-dimensional disordered systems. Adv. Phys., 31, 65 (1982).



- 14.P. L. Roe, D. Sidilkover. Optimum positive linear schemes for advection in two and three dimensions. *J. Number. Anal.*, 29, 1542-1568 (1992)
- 15.A. B. Shvartsburg. Tunneling of electromagnetic waves: paradoxes and prospects. *Usp. Fiz. Nauk*, **177**, 43 (2007).
- 16.G. Nimtz, A. A. Stahlhofen. Universal tunneling time for all fields. *Ann. Phys.*, **17**, 374 (2008).
- 17.A. M. Steinberg, P. G. Kwiat, R. Y. Chiao. Measurement of the single-photon tunneling time. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 708 (1993).
- 18.R. Y. Chiao, A. M. Steinberg. Tunneling times and superluminality. *Prog. Opt.* **37**, 345–405, (1997).
- 19.H. G. Winful. Tunneling time, the Hartman effect, and superluminality: a proposed resolution of an old paradox. *Phys. Rep.* 436, 1 (2006).
- 20.D. M. Pozar. *Microwave and RF Design of Wireless Systems*. John Wiley & Sons, Hoboken N.J. (2001).
- 21.A. Stuart Rice. *Advances in Chemical Physics*. John Wiley & Sons. Singapore N. J. (1983).
- 22.Y. Aharonov, N. Erez, B. Reznik. Superoscillations and tunneling times. *Phys. Rev. A*, 65, 052124 (2002).
- 23.C. R. Leavens, G. C. Aers. Dwell time and phase times for transmission and reflection. *Phys. Rev. B* **39**, 1202 (1989).
- 24.T. E. Hartman. Tunneling of a wave packet. *J. Appl. Phys.* **33**, 3427 – 3430 (1962).
- 25.H. M. Krenzlin, J. Budczies, K. W. Kehr. Larmor clock for tunneling times. *Phys. Rev. A* **53**, 3749 (1996).
- 26.E. H. Hauge, J. A. Stövneng. Tunneling times: a critical review. *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- 27.V. S. Olkhovsky, E. Recami. Recent developments in the time analysis of tunneling processes. *Phys. Rep.* 214, 339 (1992).

28. S. L. Konsek, T. P. Pearsall. Dynamics of electron tunneling in semiconductor nanostructures. *Phys. Rev. B* **67**, 045306 (2003).
29. A. Enders, G. Nimtz. On superluminal barrier traversal. *J. Phys. I* **2**, 1693 (1992).
30. Van Vledder, G. Ph. The WRT method for the computation of non-linear four-wave interactions in discrete spectral wave models. *Coastal Eng.*, **53**, 223–242 (2006).
31. S. Khorasani, K. Mehrany. Differential transfer matrix method for solution of one dimensional linear nonhomogeneous optical structures. *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 91-96 (2003).
32. M. Y. Azbel. Eigenstates and properties of random systems in one dimension at zero temperature. *Phys. Rev.*, **B28**, 4106 (1983).
33. A. Zh. Khachatryan. A method of generalized transfer matrix for a problem of electromagnetic wave propagation through an arbitrary one-dimensional absorbing medium. *ARMENIAN JOURNAL OF PHYSICS*, vol. 3, issue 3 (2010).
34. N. L. Chuprikov. The transfer matrices of the self-similar fractal potentials on the Cantor set. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **33**, 4293 (2000).
35. S. Khorasani, B. Rashidian. Modified transfer matrix method for conducting interfaces. *J. Opt. A pure Appl. Opt.* **4**, 251-256 (2002).
36. R. P. Feynman, A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. New York: McGraw Hill, 1965.
37. В.Ф. Зайцев., А.Д. Полянин. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*. М.: Физматлит, (2001).
38. В. И. Кляцкин. *Метод погружения в теории распространения волн*. -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 256 с. (1986).
39. E.P. Wigner. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).

- 40.E. Pollak, W.H. Miller. New physical interpretation for time in scattering theory. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 115 (1984).
- 41.D.M. Sedrakian, A.Zh. Khachatryan. On the problem of an electron scattering in an arbitrary one-dimensional potential field. *Phys.Lett. A* **265**, 294 (2000).
- 42.A. I. Baz', Ya. B. Zel'dovich, A. M. Perelomov. *Scattering Reactions and Decay in Nonrelativistic Quantum Mechanics*. Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations, 1969.
- 43.A. Zh. Khachatryan, V. A. Khoetsyan, N. A. Aleksanyan, D. R. Voskanyan. The orthogonality of the wave functions of the left and right scattering problems for an arbitrary one dimensional field. *Bulletin of State Engineering University of Armenia (Polytechnik)*, Collection of scientific and methodical papers, part 1, Yerevan, 2014, p. 55-61.
- 44.D. R. Voskanyan. Matter wave evolution for one dimensional potential. *Armenian Journal of Physics*, Yerevan, Yerevan, 2016, Vol. 9, issue 1, p. 44-53.
- 45.V. I. Arnold. *Supplementary Chapters on the Theory of Ordinary Differential Equations*. Nauka, Moscow (1978).
- 46.V. I. Arnold. *Supplementary Chapters on the Theory of Ordinary Differential Equations*.– Moscow: Nauka, 1978.
- 47.J.Dalibard, Y. Castin, K.Molmer. Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 580 (1992).
- 48.A. Zh. Khachatryan, V.A. Khoecyan, N. A. Aleksanyan, D.R.Voskanyan. Wave functions of the left and right scattering problems as a basis for description of a wave process evolution.*ARMENIAN JOURNAL OF PHYSICS*, vol. 7, issue 3, 127-135 (2014).
- 49.A. Zh. Khachatryan, Al. G. Aleksanyan, V.A. Khoecyan, N. A. Aleksanyan. The normalization and the boundary condition of a particle wave function moving in a field of an arbitrary one-dimensional potential. *AIJRSTEM* **5**, 5-11 (2014).

- 50.L. D. Fadeev. Properties of the S-matrix of the one-dimensional Schrödinger equation. Tr. MIAN SSSR **73**, 314 (1964).
- 51.M. Born, E. Wolf. Principles of Optics, Nauka, Moscow (1973).
- 52.L.A. MacColl. Note on the transmission and reflection of wave packets by potential barriers. Phys. Rev. **40**, 621 (1932).
- 53.D. Sokolovski, L.M. Baskin. Traversal time in quantum scattering. Phys. Rev. A **36**, 4604 (1987).
- 54.J.L. Agudin. Time delay of scattering processes. Phys. Rev. **171**, 1385 (1968).
- 55.В. К. Игнатович. Рассеяние нейтронов на несимметричном одномерном периодическом потенциале. ОИЯИ Р4-11135, Дубна (1978).
- 56.Р.жФейнман, А. Хибс. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 384 с. (1968).
- 57.A. Hache, L. Poirier. Long-rangesuperluminalpulsepropagationinacoaxialphotoniccrystal. Appl. Phys. Lett. **80**, 518 (2002).
- 58.S. Longhi, P. Laporta, M. Belmonte, E. Recami. Measurement of superluminal optical tunneling times in double-barrier photonic band gaps. Phys. Rev. E **65**, 046610 (2002).
- 59.J.K. Tomfohr, O.F. Sankey, S. Wang. Rapid tunneling transit times for electrons and photons through periodic fragments. Phys. Rev. B **66**, 235105 (2002).
- 60.Ch. Spielmann, R. Szipöcs, A. Stingl, F. Krausz. Tunneling of optical pulses through photonic band gaps. Phys.Rev. Lett.**73**, 2308(1994).
- 61.R. Endo, R. Saito.Tunneling time of an optical pulse in a photonic bandgap. JOSA B **28**, 2537-2542 (2011).
- 62.M. Marthaler, G. Schön, A. Shnirman. Photon-number squeezing in circuit quantum electrodynamics, Phys. Rev. Lett. **101**, 147001 (2008).

- 63.G. D'Aguanno, N. Mattiucci, M. Scalora, M.J. Bloemer, A.M. Zheltikov. Density of modes and tunneling times in finite one-dimensional photonic crystals: a comprehensive analysis. *Phys. Rev. E* **70**, 016612 (2004).
- 64.D. R. Voskanyan. A simple method to receive the relations between the transmission and reflection amplitudes of the left and right scattering problems. *Bulletin of State Engineering University of Armenia (Polytechnik), Collection of scientific and methodical papers, part 1, Yerevan, 2016, p. 52-56.*
- 65.A.Zh. Khachatryan, GerdRoepke, D. H. Badalyan, D. M. Sedrakian. Electron transmission through one-dimensional chains of randomly spaced identical potentials *Phys. Rev. B* **62**, 13501 (2000).
- 66.A. Ярив, П. Юх. *Оптические волны в кристаллах*, 617 с. (1987).
- 67.V.S. Gasparian, M. Ortuño, G. Schön, U. Simon. Tunneling time in nanostructures. H.S. Nalwa (Ed.), *Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology*, vol. 2, Academic Press, New York, 513 (2000).
- 68.Z. L. Wang. *Nanowires and Nanobelts: Materials, Properties and Devices*. Netherlands: Kluwer Academic Publishers (2003).
- 69.E. Comini, G. Faglia, G. Sberveglieri, Z. W. Pan, Z. L. Wang. Stable and highly sensitive gas sensors based on semiconducting oxidenanobelts. *Applied Physics Letters*, **81**, 1869–1871 (2002).
- 70.M. Law, L. E. Greene, J. C. Johnson, R. Saykally, P. Yang. Nanowire dye-sensitized solar cells. *Nature Materials*, **4**, 455-459 (2005).
- 71.M. D. Kelzenberg, D. B. Turner-Evans, B. M. Kayes, M. A. Filler, M. C. Putnam, N. S. Lewis, H. A. Atwater. Photovoltaic measurements in single-nanowire silicon solar cells. *Nano Letters*, **8**, 710-714 (2008).
- 72.D.Bohm. *Quantum Theory*. NJ: Prentice-Hall, Chaps.3 and 11 (1951).
- 73.A.Zh.Khachatryan, Al. G.Alexanyan, V. A.Khoetsyan, N. A.Alexanyan. Evolution of a wave packet scattered by a one-dimensional potential. *Quantum Electronics*, vol.43, Number 6 (2013).

- 74.R. Bellman, G. M. Wing. An introduction to Invariant Imbedding (John Wiley & Sons, Inc. 1975).
- 75.F.R. Di Napoli, R.L. Deavenport. Theoretical and numerical Green's function solution in a plane layered medium. *J. Acoust. Soc. Am.* **67**, 92-105 (1980).
- 76.P.G. Bergmann. The wave equation in a medium with a variable index of refraction. *J. Acoust. Soc. Am.* **17**, 329-333 (1946).
- 77.G. Barton. Elements of Green's Functions and Propagation. Oxford, U.K.:Clarendon Press, 1989.
- 78.S. He, S. Strom, V. H. Weston. Time domain wave splitting and inverse problems. Oxford: Oxford University Press, 1998.
- 79.D. R. Voskanyan. A simple method to receive the relations between the transmission and reflection amplitudes of the left and right scattering problems. *Bulletin of State Engineering University of Armenia (Polytechnik)*, Collection of scientific and methodical papers, part 1, Yerevan, 2016, p. 52-56.
- 80.S. Chandrasekhar. Radiative transfer. New York: Dover Publ. (1960).
- 81.A.Zh. Khachatryan. Propagation of electromagnetic wave through an one-dimensional layer with an arbitrary complex refractive index. *Electromagnetic waves and electronic systems* **15**, 49-65 (2010).
- 82.D.M. Sedrakian, A. H. Gevorgyan, A.Zh. Khachatryan. Reflection of a plane electromagnetic wave obliquely incident on a one-dimensional isotropic dielectric medium with an arbitrary refractive index. *Opt. Comm.* **192**, 135(2001).
- 83.F. N. Xia, T. Mueller, R. Golizadeh-Mojarad, Y. M. Lin, A. Valdes-Garcia, P. Avouris. Photocurrent imaging and efficient photon detection in a graphene transistor. *Nano Letters*, **9**, 1039-1044 (2009).
- 84.C. Hutter, A. Shnirman, Yu. Makhlin, G. Schön. Tunable coupling of qubits: nonadiabatic corrections. *Europhys. Lett.* **74**, 1088-1097 (2006).
- 85.A. A. Kleshchev. Hydroacousticscatterers. Saint – Petersburg: Prima(2012).

- 86.M. Buttiker, R. Landauer. Traversal Time for Tunneling. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739-1742 (1982).
- 87.N. L. Chuprikov. From a 1D completed scattering and double slit diffraction to the quantum-classical problem for isolated systems. *Foundations of Physics***41**, 1502-1520 (2011).
- 88.G. Gehring, A. Liapis, R. Boyd. Tunneling delays in frustrated total internal reflection. *Phys. Rev. A* **85**, 032122 (2012).
- 89.M. F. Schubert, E. F. Schubert. Effect of heterointerface polarization charges and well width upon capture and dwell time for electrons and holes above GaInN/GaN quantum wells. *Appl. Phys. Letters* **96**, 131102 (2010).
- 90.M. Mojahedi, E. Schamiloglu, K. Agi, K. J. Malloy. Frequency-domain detection of superluminal group velocity in a distributed Bragg reflector. *IEEE Journal of Quantum Electronics* **36**, 418-427 (2000).
- 91.N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. *Solid state physics*. Books/Cole Cengage Learning, Inc. (1976).
- 92.A. E. Bernardini, S. D. Leo, P. Rotelli. Above barrier potential diffusion. *Mod. Phys. Lett. A*, **19**, 2717 (2004).
- 93.K. A. Matveev, Y. Dongxiao, L. I. Glazman. Tunneling in one-dimensional non-Luttinger electron liquid. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 3351 (1993).
- 94.A. M. Steinberg. How Much Time Does a Tunneling Particle Spend in the Barrier Region. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 2405 (1995).
- 95.S. D. Leo, P. Rotelli. Above barrier Dirac multiple scattering and resonances *Eur. Phys. J. C*, **46**, 551 (2006).
- 96.V. K. Ignatovich. Ultracold neutrons - discovery and research. *Usp. Fiz. Nauk*, **166**, 303 (1996).
- 97.P. Bokes. Time operators in stroboscopic wave-packet basis and the time scales in tunneling. *Phys. Rev. A*, **83**, 032104 (2011).
- 98.R. Landauer, Th. Martin. Barrier interaction time in tunneling. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 217 (1994).

99. N. G. Basov, R. V. Ambartsumyan, V. S. Zuev, P. G. Kryukov, V. S. Letokhov. Non linear amplification of light pulses. Zh. Eksp. Teor. Fiz., **50**, 23 (1966).
100. A. N. Oraevskii. Superluminal waves in amplifying media. Usp. Fiz., **168**, 1311 (1998).
101. P. Eckle, A. N. Pfeiffer, C. Cirelli, A. Staudte, R. Dorner, H. G. Muller, M. Buttiker, U. Keller. Attosecond Ionization and Tunneling Delay Time Measurements in Helium, Science, **322**, 1525 (2008).
102. V. I. Klyatskin. The Method of Invariant Embedding in the Theory of Wave Propagation, Nauka, Moscow (1986).
103. A. Zh. Khachatryan, D.R.Voskanyan, A.I. Soghomonyan. Evolution of wave packets constructed based on the scattering wave functions for one-dimensional potential. ARMENIAN JOURNAL OF PHYSICS, vol. 8, issue 4, 152-165 (2015).
104. J. C. Fisher, I. Giaever. Tunneling Through Thin Insulating Layers. J.Appl.Phys. **32**, 172 (1961).
105. A. Zh. Khachatryan, V. A. Khoetsyan, D. R. Voskanyan. Derivation of evolution wave packets based on scattering wave functions for one dimensional potential. Journal of Applied Physical Science International, 2015, Vol.: 5, Issue.: 4, p. 229-240.
106. D. R. Voskanyan. Life period of wave packet located in quantum well formed by two similar rectangular potentials. Proceeding of the International Conference on Electron, Positron, Neutron and X-Ray Scattering Under External Influences, ISBN 978-9939-1-0275-7, Yerevan, 2016, p. 263-266.