Стационарное движение квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида

© А.Ж. Хачатрян[1], Д.М. Седракян[2], В.А. Хоецян[2]

[1] Государственный инженерный университет Армении,
Ереван, Армения
[2] Ереванский государственный университет,
Ереван, Армения
E-mail: ashot.khachatrian@gmail.com, vladimir.khoetsyan@gmail.com, dsedrak@www.physdep.r.am

(Поступила в Редакцию 3 августа 2009 г.)

Развит последовательный подход к задаче описания стационарного движения квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида. Доказано, что волновая функция инфинитного движения может быть с точностью до двух произвольных постоянных выражена с помощью одного частного решения некоторой системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Показано, что в основе многих известных методов, таких как метод интегральных уравнений, метод матриц переноса, метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния, лежит одно общее свойство решений уравнения Шредингера. В рамках предлагаемого подхода связь между упомянутыми выше методами становится более прозрачной, а их изложение может быть умещено в единую схему.

1. Введение

Как известно, задача описания стационарного движения квантовой частицы в поле потенциала произвольного вида всегда вызывала большой теоретический и практический интерес. Несмотря на то что данная проблема имеет давнюю историю, ее рассмотрение в двумерной и трехмерной постановках сопряжено с большими математическими трудностями. Невзирая на предпринимаемые уже много лет многочисленные усилия, можно утверждать, что до сих пор общие математические подходы к решению многомерной задачи находятся в стадии разработки. Во многих случаях даже приближенное рассмотрение задачи приходится выполнять исключительно численными методами [1]. Вместе с тем для одномерного случая известно несколько отличных друг от друга методов, а также их различные модификации, позволяющие проводить рассмотрение задачи в общем виде. Наиболее примечательными из них являются метод матриц переноса или трансфер-матриц [2,3], метод интегральных уравнений [4–6], метод погружения или метод фазовых функций [6–9], а также метод комбинации параметров рассеяния [10,11].

В отличие от традиционного подхода, основанного на лобовом решении уравнения Шредингера, первый из перечисленных методов позволяет путем аппроксимации потенциала системой соприкасающихся узких прямоугольных потенциалов свести граничную задачу к вычислению произведения матриц. Последние два метода позволяют свести граничную задачу к задаче эволюционного типа (задача Коши). Заметим, что в отличие от метода погружения в методе комбинации параметров рассеяния предлагаемые для интегрирования уравнения являются линейными [10].

В настоящей работе предлагается новый общий подход к рассмотрению движения квантовой частицы в одномерном потенциальном поле. Сразу следует оговориться, что многие получаемые в рамках излагаемого подхода уравнения в том или ином виде фигурируют в упомянутых выше методах. Однако в отличие от этих методов, базирующихся в конечном счете на идее выявления закона изменения волновой функции или параметров рассеяния в зависимости от вариаций того или иного параметра потенциала (например, его границы), предлагаемый подход является более последовательным в том плане, что он основан непосредственно на одном общем свойстве решения уравнения Шредингера. Кроме того, в рамках развиваемого подхода, который по своему духу близок к традиционному подходу, связь между упомянутыми выше методами становится более прозрачной, а их изложение умещается в единую схему.

Далее мы исследуем одномерное стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \big(k^2 - u(x)\big)\Psi(x) = 0, \tag{1}$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $u(x) = 2mU(x)/\hbar^2$, а E и $U(x)$ — полная и потенциальная энергия частицы соответственно. Представим его общее решение в виде следующей суммы:

$$\Psi(x) = a(x)\exp\{ikx\} + b(x)\exp\{-ikx\}. \tag{2}$$

Заметим, что представление решения в виде (2) 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 показано далее, функции $a(x)$, $b(x)$ всегда могут быть выбраны таким образом, чтобы производная решения в любой точке пространства принимала вид

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} = ik[a(x)\exp\{ikx\} - b(x)\exp\{-ikx\}] \tag{3}$$

для произвольно зависящей от координаты x функции $u(x)$.

Как мы увидим далее, данное общее свойство решений уравнения Шредингера интересно не только в методологическом плане. В частности, оно позволяет выработать целостный подход к рассмотрению задачи одномерного стационарного движения и уместить все известные методы решения данной проблемы в единую схему. Кроме того, представление волновой функции в виде (2), (3) позволяет придать определенный физический смысл функциям $a(x)$ и $b(x)$. Так, только лишь при выполнении условия (3) значения функций $a(x)$ и $b(x)$ могут быть интерпретированы как амплитуды сходящихся в точке x встречных волн, распространяющихся соответственно в положительном и отрицательном направлениях.

Изложение материала построено следующим образом. В разделе 2 доказывается одно общее свойство решений одномерного стационарного уравнения Шредингера. В разделе 3 в рамках излагаемого подхода выводится интегральное уравнение для волновой функции. Раздел 4 посвящен описанию инфинитного движения, а также в рамках излагаемого подхода воспроизведению основных результатов теории матриц переноса. В разделе 5 выводятся дифференциальные уравнения для элементов матрицы переноса как функций от границ усеченного потенциала. Обсуждается также связь предлагаемого подхода с методом погружения. В разделе 6 устанавливается связь волновой функции с элементами матриц переноса усеченных потенциалов. Раздел 7 посвящен установлению соотношений между амплитудами отражения и прохождения для левой и правой задач рассеяния, а также воспроизведению некоторых известных результатов теории фазовых функций и метода комбинации параметров рассеяния.

2. Об одном свойстве решения одномерного стационарного уравнения Шредингера

Покажем теперь, что равенства (2), (3) одновременно будут иметь место, если функции $a(x)$, $b(x)$ выбраны в виде

$$a(x) = \frac{1}{2}\left[\Psi(x) - \frac{i}{k}\frac{d\Psi(x)}{dx}\right]\exp\{-ikx\}, \tag{4}$$

$$b(x) = \frac{1}{2}\left[\Psi(x) + \frac{i}{k}\frac{d\Psi(x)}{dx}\right]\exp\{ikx\}. \tag{5}$$

Легко увидеть, что из (4), (5) непосредственно следует равенство (2). Для представления $d\Psi(x)/dx$ посредством функций $a(x)$ и $b(x)$ рассмотрим производные первого порядка функций (4), (5)

$$\frac{da(x)}{dx} = -\frac{i}{2k}\left[k^2\Psi(x) + \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}\right]\exp\{-ikx\}, \tag{6}$$

$$\frac{db(x)}{dx} = \frac{i}{2k}\left[k^2\Psi(x) + \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}\right]\exp\{ikx\}. \tag{7}$$

Используя уравнение (1), а также (2), из уравнений (6), (7) для функций $a(x)$, $b(x)$ получим следующую систему двух однородных линейных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\frac{da(x)}{dx} = -\frac{iu(x)}{2k}a(x) - \frac{iu(x)}{2k}b(x)\exp\{i2kx\}, \tag{8}$$

$$\frac{db(x)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k}b(x) + \frac{iu(x)}{2k}a(x)\exp\{i2kx\}. \tag{9}$$

Из (8), (9) следует равенство

$$\frac{da(x)}{dx}\exp\{ikx\} + \frac{db(x)}{dx}\exp\{-ikx\} = 0. \tag{10}$$

Используя (10), легко увидеть, что при выборе функций $a(x)$, $b(x)$ в виде (4), (5) производная волновой функции записывается в виде (3). Следует заметить, что условие сохранения плотности потока вероятности, записанное посредством функций $a(x)$, $b(x)$, выглядит следующим образом: $a(x)a^*(x) - b(x)b^*(x) = \text{const}$.

3. Метод интегрального уравнения для волновой функции

Для построения интегрального уравнения, используя (2), запишем систему уравнений (8), (9) в следующем виде:

$$\frac{da(x)}{dx} = -\frac{iu(x)}{2k}\Psi(x)\exp\{-ikx\}, \tag{11}$$

$$\frac{db(x)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k}\Psi(x)\exp\{ikx\}. \tag{12}$$

Рассмотрим решение (11), (12) с асимптотическими условиями, заданными для функций $a(x)$ и $b(x)$ соответственно, на $-\infty$ и $+\infty$:

$$a(-\infty) = a_0, \quad b(+\infty) = b_0. \tag{13}$$

Легко увидеть, что при условии (13) для потенциала вида $u(x) \to 0$ при $x \to \pm\infty$ система уравнений (11), (12) эквивалентна следующей системе интегральных уравнений:

$$a(x) = a_0 - \int\limits_{-\infty}^{x}\frac{iu(x')}{2k}\Psi(x')\exp\{ikx'\}dx', \tag{14}$$

$$b(x) = b_0 - \int\limits_{x}^{+\infty}\frac{iu(x')}{2k}\Psi(x')\exp\{ikx'\}dx'. \tag{15}$$

Как показано далее, полученный результат позволяет однозначным образом интерпретировать функции $a(x)$, $b(x)$ как значения амплитуд встречных волн, приходящих в точку x.

Используя (14), (15), а также (2), можем записать

$$\Psi(x) = a_0 \exp\{ikx\} + b_0 \exp\{-ikx\} - \exp\{ikx\} \int_{-\infty}^{x} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{ikx'\} dx' - \exp\{-ikx\} \int_{x}^{+\infty} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad (16)$$

Полученный результат является не чем иным, как интегральным уравнением для волновой функции. Путем введения обозначения

$$G_0^{(+)}(x, x') = \frac{1}{2ik} \exp\{ik|x - x'|\} \quad (17)$$

уравнение (16) может быть записано в более компактной форме:

$$\Psi(x) = a_0 \exp\{ikx\} + b_0 \exp\{-ikx\} + \int_{-\infty}^{\infty} u(x') G_0^{(+)}(x, x') \Psi(x') dx'. \quad (18)$$

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

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right] G_0^{(+)}(x, x') = \delta(x - x'). \quad (19)$$

Важно отметить, что результат (18) может быть также воспроизведен методом Лапласа для решения линейных неоднородных уравнений [12]. Как известно, в этом случае уравнение (1) рассматривается как неоднородное уравнение, с неоднородной частью $-u(x)\Psi(x)$. Изложенный в настоящей работе вывод, на наш взгляд, имеет преимущество по сравнению с упомянутым выше. Не затрагивая аспектов методологического характера, можно утверждать, что представленный вывод позволяет наиболее полным образом высветить физическое содержание интегрального уравнения. Действительно, умножая (14) 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 (15) на $\exp\{-ikx\}$, можно заметить, что волна $b(x)\exp\{-ikx\}$ является суперпозицией первичной волны $b_0 \exp\{-ikx\}$ и распространяющихся в отрицательном направлении вторичных волн, образованных в точках $x' > x$.

Физически представляется очевидным, что в образовании распространяющейся в положительном направлении волны $a(x)\exp\{ikx\}$ никоим образом не могут принимать участие 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 (11), (12) с другим, отличным от (13), граничным условием, когда амплитуды волн, распространяющихся в положительном и отрицательном направлениях, считаются заданными на $+\infty$ и $-\infty$ соответственно:

$$a(+\infty) = a_0, \quad b(-\infty) = b_0. \quad (20)$$

При условии (20) система уравнений (11), (12) равносильная следующим интегральным уравнениям:

$$a(x) = a_0 + \int_{x}^{\infty} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{-ikx'\} dx', \quad (21)$$

$$b(x) = b_0 + \int_{-\infty}^{x} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad (22)$$

Воспользовавшись (21), (22) и (2), получим следующее интегральное уравнение для волновой функции:

$$\Psi(x) = a_0 \exp\{ikx\} + b_0 \exp\{-ikx\} + \exp\{ikx\} \int_{x}^{\infty} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{-ikx'\} dx' + \exp\{-ikx\} \int_{-\infty}^{x} \frac{iu(x')}{2k} \Psi(x') \exp\{ikx'\} dx'. \quad (23)$$

Введя обозначение

$$G_0^{(-)}(x, x') = \frac{i}{2k} \exp\{-ik|x - x'|\}, \quad (24)$$

можно записать уравнение (23) в виде

$$\Psi(x) = a_0 \exp\{ikx\} + b_0 \exp\{ikx\} + \int_{-\infty}^{\infty} u(x') G_0^{(-)}(x, x') \Psi(x') dx'. \quad (25)$$

Заметим, что функция $G_0^{(-)}(x, x')$ также удовлетворяет уравнению (19) и является сходящейся функцией Грина для свободного движения.

Отметим, что хотя формально уравнения (18) и (25) имеют схожий вид, удовлетворяющие им волновые функции подчинены различным асимпотическим условиям на бесконечности. Однако физически обоснованное, подчиняющееся условию причинности решение следует лишь из (18).

4. Инфинитное движение и метод матриц переноса

Как известно, система двух однородных дифференциальных уравнений первого порядка обладает двумя линейно независимыми решениями, так что общее решение системы (8), (9) может быть представлено в виде

$$C_1\big(a_1(x)+b_1(x)\big)+C_2\big(a_2(x)+b_2(x)\big), \qquad (26)$$

где C_1 и C_2 — произвольные константы, а функции $a_1(x)$, $b_1(x)$ и $a_2(x)$, $b_2(x)$ соответствуют первому и второму частным решениям. Из системы уравнений (8), (9) можно увидеть, что если известно одно частное решение, то второе может быть выбрано в соответствии со следующими равенствами:

$$a_1(x)=b_2^*(x) \text{ и } b_1(x)=a_2^*(x), \qquad (27)$$

где знак * обозначает комплексно-сопряженное значение.

Используя (27), (2) и вводя обозначение $a_1(x)=a(x)$ и $b_1(x)=b(x)$, можно записать наиболее общее решение уравнения Шредингера (1) в следующем виде:

$$\Psi(x)=\big(C_1a(x)+C_2b^*(x)\big)\exp\{ikx\} + \big(C_1b(x)+C_2a^*(x)\big)\exp\{-ikx\}. \qquad (28)$$

Как видно из (28), волновая функция в общем виде может быть выражена с помощью одного частного решения системы уравнений (8), (9) с точностью до двух произвольных постоянных.

Предположим теперь, что потенциал отличен от нуля только в ограниченном промежутке, заключенном между точками x_1 и x_2,

$$u(x)=\begin{cases}0, & x<x_1,\\ u(x), & x_1<x<x_2,\\ 0, & x>x_2.\end{cases} \qquad (29)$$

Будем рассматривать волновую функцию в областях с нулевым значением потенциала в виде суммы встречных плоских волн

$$\Psi(x)=\begin{cases}A_1\exp\{ikx\}+B_1\exp\{-ikx\}, & x<x_1,\\ \big(C_1a(x)+C_2b^*(x)\big)\exp\{ikx\} & \\ \quad+\big(C_1b(x)+C_2a^*(x)\big)\exp\{-ikx\}, & x_1<x<x_2,\\ A_2\exp\{ikx\}+B_2\exp\{-ikx\}, & x>x_2,\end{cases} \qquad (30)$$

где пара функций $a(x)$, $b(x)$ является частным решением системы уравнений (8), (9), определяемым из начального условия, заданного в точке $x=x_1$ в виде пары произвольных чисел $a(x_1)$, $b(x_1)$.

Из условия непрерывности волновой функции (30) и ее производной в точках x_1, x_2, а также из равенства (10) можем получить следующую систему четырех линейных алгебраических уравнений:

$$A_1=C_1a(x_1)+C_2b^*(x_1),\ \ B_1=C_1b(x_1)+C_2a^*(x_1), \qquad (31)$$

$$A_2=C_1a(x_2)+C_2b^*(x_2),\ \ B_2=C_1b(x_2)+C_2a^*(x_2). \qquad (32)$$

Из этих уравнений легко увидеть, что между амплитудами A_1, B_1 и A_2, B_2 существует линейная связь. Так, из (31) следует, что

$$C_1=\frac{a^*(x_1)A_1}{J_0}-\frac{b^*(x_1)B_1}{J_0},\ \ C_2=\frac{a(x_1)B_1}{J_0}-\frac{b(x_1)A_1}{J_0} \qquad (33)$$

где

$$J_0=a(x_1)a^*(x_1)-b(x_1)b^*(x_1). \qquad (34)$$

Используя (33), из (34), (32) получим

$$\begin{pmatrix}A_2\\ B_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha(x_1,x_2) & \beta(x_1,x_2)\\ \beta^*(x_1,x_2) & \alpha^*(x_1,x_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_1\\ B_1\end{pmatrix}, \qquad (35)$$

где

$$\alpha(x_1,x_2)=\frac{a^*(x_1)a(x_2)-b(x_1)b^*(x_2)}{a(x_1)a^*(x_1)-b(x_1)b^*(x_1)},$$

$$\beta(x_1,x_2)=\frac{a(x_1)b^*(x_2)-b^*(x_1)a(x_2)}{a(x_1)a^*(x_1)-b(x_1)b^*(x_1)}. \qquad (36)$$

Используя (36) и (34), легко проверить, что детерминант трансфер-матрицы тождественно равен единице:

$$\alpha(x_1,x_2)\alpha^*(x_1,x_2)-\beta(x_1,x_2)\beta^*(x_1,x_2)=1, \qquad (37)$$

что в свою очередь соответствует условию сохранения потока плотности вероятности. Действительно, из (35) и (37) легко получить, что

$$|A_2|^2-|B_2|^2=|A_1|^2-|B_1|^2.$$

Отметим также, что система (35) представляет собой основу теории трансфер-матриц.

Используя (35), легко увидеть, что [2,3]

$$\alpha(x_1,x_2)=\frac{A_1^*A_2-B_1B_2^*}{A_1A_1^*-B_1B_1^*},$$

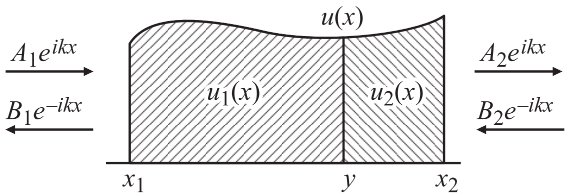
$$\beta(x_1,x_2)=\frac{A_1B_2^*-B_1^*A_2}{A_1A_1^*-B_1B_1^*}. \qquad (38)$$

Как следует из изложенного выше (см. (30)–(36)), волновая функция одномерного стационарного инфинитного движения может быть выражена с помощью одного произвольного частного решения системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка (8), (9) с точностью до двух произвольных постоянных.

Из (35), (36) легко заметить, что

$$\begin{pmatrix}a(x_2)\\ b(x_2)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha(x_1,x_2) & \beta(x_1,x_2)\\ \beta^*(x_1,x_2) & \alpha^*(x_1,x_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(x_1)\\ b(x_1)\end{pmatrix}. \qquad (39)$$

Это означает, что при выборе постоянных A_1, B_1 равными начальным условиям для системы уравнений (8), (9), т. е. $A_1=a(x_1)$ и $B_1=b(x_1)$, метод матриц переноса приводит к тождеству.



Волновая функция одномерного инфинитного движения и потенциал $u(x)$, приведенный в виде прилегающих друг к другу усеченных потенциалов.

5. Элементы матрицы переноса как функции от границ усеченного потенциала

Представим потенциал $u(x)$ (29) как систему из двух граничащих в некоторой точке y потенциалов. Причем один из них совпадает с потенциалом $u(x)$ во всех точках левее точки y и тождественно равен нулю правее ее. Второй потенциал совпадает с потенциалом $u(x)$ правее точки y и равен нулю левее ее (см. рисунок). Будем называть определенные таким образом потенциалы усеченными в точке y по отношению к $u(x)$ соответственно с правой и левой сторон. Согласно указанному выше, потенциал $u(x)$ рассматривается в виде суммы следующих двух потенциалов:

$$u(x) = u_1(x) + u_2(x), \tag{40}$$

где

$$u_1(x) = \begin{cases} 0, & x > y, \\ u(x), & x < y, \end{cases} \quad u_2(x) = \begin{cases} u(x), & x > y, \\ 0, & x < y. \end{cases} \tag{41}$$

Заметим, что, согласно (29), при условии $y = x_2$ $u_1(x) = u(x)$ и $u_2(x) = 0$ для всех значений x, а при выполнении равенства $y = x_1$ $u_1(x) = 0$ и $u_2(x) = u(x)$ также для всех значений x.

Далее мы покажем, что волновая функция для потенциала $u(x)$ может быть выражена с помощью элементов матриц переноса для потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$.

Будем рассматривать элементы матрицы переноса $\alpha(x_1, x_2)$, $\beta(x_1, x_2)$ (35) как функции от координат границ потенциала $u(x)$, при этом полагая, что когда изменяется его правая граница, то $u(x)$ совпадает с $u_1(x)$ при $u_2(x) = 0$, а в случае изменяющейся левой границы $u(x)$ совпадает с $u_2(x)$ при $u_1(x) = 0$. В соответствии с указанным выше, рассматривая значения y на промежутке $x_1 < y < x_2$, из (35), (36) получим

$$\alpha(x_1, y) = \frac{a^*(x_1)a(y) - b(x_1)b^*(y)}{a(x_1)a^*(x_1) - b(x_1)b^*(x_1)},$$

$$\beta(x_1, y) = \frac{a(x_1)b^*(y) - b^*(x_1)a(y)}{a(x_1)a^*(x_1) - b(x_1)b^*(x_1)}, \tag{42}$$

$$\alpha(y, x_2) = \frac{a^*(y)a(x_2) - b(y)b^*(x_2)}{a(x_2)a^*(x_2) - b(x_2)b^*(x_2)},$$

$$\beta(y, x_2) = \frac{a(y)b^*(x_2) - b^*(y)a(x_2)}{a(x_2)a^*(x_2) - b(x_2)b^*(x_2)}, \tag{43}$$

где $a(y)$, $b(y)$ для случая (42) должны быть определены из (8), (9) при начальном условии, заданном в точке $y = x_1$,

$$a(y = x_1) = a(x_1), \quad b(y = x_1) = b(x_1), \tag{44}$$

а для случая (43) $a(y)$, $b(y)$ определяются при начальном условии, заданном в точке $y = x_2$,

$$a(y = x_2) = a(x_2), \quad b(y = x_2) = b(x_2). \tag{45}$$

Из (42) легко заметить, что при выборе $a(x_1) = 1$, $b(x_1) = 0$ имеем

$$\alpha(x_1, y) = a(y), \quad \beta(x_1, y) = b^*(y). \tag{46}$$

При выборе $a(x_2) = 1$, $b(x_2) = 0$ из (43) получаем

$$\alpha(y, x_2) = a^*(y), \quad \beta(y, x_2) = -b^*(y). \tag{47}$$

Как видно из (8), (9) и (42), (43), величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ как функции y удовлетворяют разным системам дифференциальных уравнений. Так, для $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ имеем

$$\frac{d\alpha(x_1, y)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\alpha(x_1, y) - \frac{iu(y)}{2k}\beta^*(x_1, y)\exp\{-2iky\}, \tag{48}$$

$$\frac{d\beta(x_1, y)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\beta(x_1, y) - \frac{iu(y)}{2k}\alpha^*(x_1, y)\exp\{-2iky\} \tag{49}$$

с начальным условием в точке $y = x_1$

$$\alpha(x_1, x_1) = 1, \quad \beta(x_1, x_1) = 0, \tag{50}$$

а для $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$

$$\frac{d\alpha(y, x_2)}{dy} = \frac{iu(y)}{2k}\alpha(y, x_2) - \frac{iu(y)}{2k}\beta(y, x_2)\exp\{2iky\}, \tag{51}$$

$$\frac{d\beta(y, x_2)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\beta(y, x_2) + \frac{iu(y)}{2k}\alpha(y, x_2)\exp\{-2iky\}, \tag{52}$$

с начальным условием в точке $y = x_2$

$$\alpha(x_2, x_2) = 1, \quad \beta(x_2, x_2) = 0. \tag{53}$$

Заметим, что для системы уравнений (48), (49) решение рассматривается справа от точки, в которой задается начальное условие ($x_1 < y < \infty$), в то время как для системы (51), (52) решение следует рассматривать слева от нее ($-\infty < y < x_2$).

Как следует из изложенного выше, величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ никоим образом не зависят от выбора начальных условий $a(x_1)$, $b(x_1)$ и $a(x_2)$, $b(x_2)$ (см. (42), (43)), используемых для определения $a(y)$, $b(y)$, а зависят только от вида самого потенциала. Данное обстоятельство позволяет утверждать, что величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ являются не чем иным, как элементами матриц переноса для потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$ соответственно.

6. Волновая функция и метод усеченного потенциала

Приступим теперь к построению волновой функции (30), выбирая в качестве произвольных постоянных константы A_1 и B_2. Такой выбор обусловлен тем, что при значениях $A_1 = 1$ и $B_2 = 0$ волновая функция описывает движение частицы, падающей на потенциал с левой стороны, в то время как при условии $A_1 = 0$ и $B_2 = 1$ она соответствует частице, падающей на барьер справа. Как мы покажем далее, волновая функция может быть явным образом выражена через элементы матриц переноса (42), (43) для потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$, получающихся посредством усечения $u(x)$.

Для этого, заменяя в (42), (43) y на x, прежде всего заметим, что имеет место следующее тождество:

$$\begin{pmatrix} \alpha(x_1,x_2) & \beta(x_1,x_2) \\ \beta^*(x_1,x_2) & \alpha^*(x_1,x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(x,x_2) & \beta(x,x_2) \\ \beta^*(x,x_2) & \alpha^*(x,x_2) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \alpha(x_1,x) & \beta(x_1,x) \\ \beta^*(x_1,x) & \alpha^*(x_1,x) \end{pmatrix}, \tag{54}$$

из которого, в частности, следует, что

$$\alpha(x_1,x_2) = \alpha(x_1,x)\alpha(x,x_2) + \beta^*(x_1,x)\beta(x,x_2), \tag{55}$$

$$\beta(x_1,x_2) = \beta(x_1,x)\alpha(x,x_2) + \alpha^*(x_1,x)\beta(x,x_2). \tag{56}$$

Используя (31)–(34), можно записать

$$B_1 = -\frac{\beta^*(x_1,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} A_1 + \frac{1}{\alpha^*(x_1,x_2)} B_2, \tag{57}$$

$$A_2 = \frac{1}{\alpha^*(x_1,x_2)} A_1 + \frac{\beta(x_1,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} B_2. \tag{58}$$

Как можно увидеть из (30)–(34) и (41), амплитуды встречных волн $C_1 a(x) + C_2 b^*(x)$ и $C_1 b(x) + C_2 a^*(x)$ в произвольной точке x могут быть выражены через постоянные A_1 и B_1 посредством элементов матрицы переноса, которая соответствует усеченному в данной точке потенциалу с правой стороны:

$$\begin{pmatrix} C_1 a(x) + C_2 b^*(x) \\ C_1 b(x) + C_2 a^*(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(x_1,x) & \beta(x_1,x) \\ \beta^*(x_1,x) & \alpha^*(x_1,x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \tag{59}$$

Из (55)–(57) можем получить

$$\begin{pmatrix} C_1 a(x) + C_2 b^*(x) \\ C_1 b(x) + C_2 a^*(x) \end{pmatrix} = \frac{1}{\alpha^*(x_1,x_2)} \begin{pmatrix} \alpha(x,x_2) & \beta(x_1,x) \\ -\beta^*(x,x_2) & \alpha^*(x_1,x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \tag{60}$$

Используя (57), (58) и (60), найдем $\Psi(x)$ (30) в виде

$$\Psi(x) = A_1 \left[\exp\{ikx\} - \frac{\beta^*(x_1,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{-ikx\} \right] + B_2 \frac{1}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{-ikx\} \ \text{при } x < x_1, \tag{61}$$

$$\Psi(x) = A_1 \left[\frac{\alpha^*(x,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{ikx\} - \frac{\beta^*(x,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{-ikx\} \right] + B_2 \left[\frac{\beta(x_1,x)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{ikx\} + \frac{\alpha^*(x_1,x)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{-ikx\} \right] \ \text{при } x_1 < x < x_2, \tag{62}$$

$$\Psi(x) = A_1 \frac{1}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{ikx\} + B_2 \left[\exp\{-ikx\} + \frac{\beta(x_1,x_2)}{\alpha^*(x_1,x_2)} \exp\{ikx\} \right] \ \text{при } x > x_2. \tag{63}$$

Как видно из полученного результата (61)–(63), с точностью до двух произвольных постоянных задача нахождения волновой функции инфинитного движения в наиболее общем виде сводится к задаче определения элементов матриц переноса для усеченных потенциалов как функций от координаты точки усечения $\alpha(x_1,y)$, $\beta(x_1,y)$ и $\alpha(y,x_2)$, $\beta(y,x_2)$ с начальными условиями $\alpha(x_1,x_1) = 1$, $\beta(x_1,x_1) = 0$, $\alpha(x_2,x_2) = 1$, $\beta(x_2,x_2) = 0$. Используя (55), (56), можно записать следующие алгебраические связи между элементами трансфер-матриц усеченных потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$:

$$\alpha(x_1,x) = \alpha(x_1,x_2)\alpha(x,x_2) + \beta^*(x_1,x_2)\beta(x,x_2), \tag{64}$$

$$\beta(x_1,x) = \beta(x_1,x_2)\alpha(x,x_2) + \alpha^*(x_1,x_2)\beta(x,x_2) \tag{65}$$

и

$$\alpha(x,x_2) = \alpha^*(x_1,x_2)\alpha(x_1,x) - \beta^*(x_1,x_2)\beta(x_1,x), \tag{66}$$

$$\beta(x,x_2) = -\beta(x_1,x_2)\alpha(x_1,x) + \alpha(x_1,x_2)\beta(x_1,x). \tag{67}$$

Принимая во внимание связи (64)–(67), можно утверждать, что определение волновой функции сводится к задаче нахождения одной из пар функций $\alpha(x_1,x)$, $\beta(x_1,x)$ или $\alpha(x,x_2)$, $\beta(x,x_2)$. Последнее в свою очередь означает, что задача определения $\Psi(x)$ сводится к решению системы дифференциальных уравнений (48)–(50) или же (51)–(53). Заметим также, что в представление (57)-(59) явным образом включено условие непрерывности волновой функции и ее производной на границах потенциала.

7. Элементы матрицы переноса как характеристики для левой и правой задач рассеяния

Связь элементов матрицы переноса $\alpha(x_1,x_2)$, $\beta(x_1,x_2)$ с амплитудами отражения и прохождения волны может быть установлена при рассмотрении левой и правой задач рассеяния, когда отыскиваются решения уравнения Шредингера со следующим асимптотическим поведением:

$$\psi_{\text{left}}(x) = \begin{cases} \exp\{ikx\} + r\exp\{-ikx\}, & x < x_1, \\ t\exp\{ikx\}, & x > x_2 \end{cases} \tag{68}$$

и

$$\psi_{\text{right}}(x) = \begin{cases} s\exp\{-ikx\}, & x < x_1, \\ \exp\{-ikx\} + p\exp\{ikx\}, & x > x_2. \end{cases} \quad (69)$$

Здесь величины r, t и p, s являются амплитудами отражения и прохождения волны для левой и правой задач рассеяния соответственно.

Подставляя в (61)–(63) $A_1 = 1$ и $B_2 = 0$, для волновой функции частицы, падающей на потенциал с левой стороны, получим

$$\psi_{\text{left}}(x) = \exp\{ikx\} - \frac{\beta^*(x_1, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{ikx\} \text{ при } x < x_1, \quad (70)$$

$$\psi_{\text{left}}(x) = \frac{\alpha^*(x, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{ikx\} - \frac{\beta^*(x, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{-ikx\} \text{ при } x_1 < x < x_2, \quad (71)$$

$$\psi_{\text{left}}(x) = \frac{1}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{ikx\} \text{ при } x > x_2. \quad (72)$$

С использованием (46), (47) результат (70)–(72) может быть записан также в виде

$$\psi_{\text{left}}(x) = \exp\{ikx\} - \frac{b(x_2)}{a^*(x_2)}\exp\{-ikx\} \text{ при } x < x_1, \quad (73)$$

$$\psi_{\text{left}}(x) = \frac{a^*(x_2)a(x) - b^*(x_2)b(x)}{a^*(x_2)}\exp\{ikx\} + \frac{a^*(x_2)b(x) - b(x_2)a^*(x)}{a^*(x_2)}\exp\{-ikx\} \text{ при } x_1 < x < x_2, \quad (74)$$

$$\psi_{\text{left}}(x) = \frac{1}{a^*(x_2)}\exp\{ikx\} \text{ при } x > x_2, \quad (75)$$

где $a(x_2)$, $b(x_2)$ являются значениями функций $a(y)$, $b(y)$ (8), (9) в точке $y = x_2$, удовлетворяющими начальным условиям $a(x_1) = 1$, $b(x_1) = 0$.

Сравнивая (70), (72) с (68), получим

$$r = -\frac{\beta^*(x_1, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}, \quad t = \frac{1}{\alpha^*(x_1, x_2)}, \quad (76)$$

откуда, в частности, следует

$$\alpha(x_1, x_2) = \frac{1}{t^*}, \quad \beta(x_1, x_2) = -\frac{r^*}{t^*}. \quad (77)$$

Волновая функция частицы, падающей на барьер справа, получается из (61)–(63) подстановкой $A_1 = 0$ и $B_2 = 1$:

$$\psi_{\text{right}}(x) = \frac{1}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{-ikx\} \text{ при } x < x_1, \quad (78)$$

$$\psi_{\text{right}}(x) = \frac{\beta(x_1, x)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{ikx\} + \frac{\alpha^*(x_1, x)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{-ikx\} \text{ при } x_1 < x < x_2, \quad (79)$$

$$\psi_{\text{right}}(x) = \exp\{-ikx\} + \frac{\beta(x_1, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}\exp\{ikx\} \text{ при } x > x_2. \quad (80)$$

Сравнивая (78)–(80) с (69), получим

$$p = \frac{\beta(x_1, x_2)}{\alpha^*(x_1, x_2)}, \quad s = \frac{1}{\alpha^*(x_1, x_2)}, \quad (81)$$

т.е.

$$\alpha(x_1, x_2) = \frac{1}{s^*}, \quad \beta(x_1, x_2) = \frac{p}{s}. \quad (82)$$

Из (77) и (82) следует связь между амплитудами отражения и прохождения левой и правой задач рассеяния [2]:

$$t - s, \quad r/t = -p^*/t^*. \quad (83)$$

По аналогии с введенными для усеченных потенциалов элементами матриц переноса будем рассматривть также амплитуды отражения и прохождения волны усеченных потенциалов. Если амплитуды рассеяния определяются в соответствии с левой задачей рассеяния, то, согласно (77) и (42), (43), можно записать

$$\alpha(x_1, y) = 1/t^*(x_1, y), \quad \beta(x_1, y) = -r^*(x_1, y)/t^*(x_1, y), \quad (84)$$

$$\alpha(y, x_2) = 1/t^*(y, x_2), \quad \beta(y, x_2) = -r^*(y, x_2)/t^*(y, x_2), \quad (85)$$

где $t(x_1, y)$, $r(x_1, y)$ и $t(y, x_2)$, $r(y, x_2)$ являются амплитудами прохождения и отражения волны для усеченных потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$ (41).

Используя (84), из (48)–(50) имеем

$$\frac{d}{dx}\frac{1}{t(x_1, x)} = \frac{iu(x)}{2k}\frac{1}{t(x_1, x)} - \frac{iu(x)}{2k}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)}\exp\{2ikx\}, \quad (86)$$

$$\frac{d}{dx}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)} = -\frac{iu(x)}{2k}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)} + \frac{iu(x)}{2k}\frac{1}{t(x_1, x)}\exp\{-2ikx\}, \quad (87)$$

с начальными условиями

$$1/t(x_1, x_1) = 1, \quad r^*(x_1, x_1)/t^*(x_1, x_1) = 0. \quad (88)$$

Из (85) и (51)–(53) можем записать

$$\frac{d}{dx}\frac{1}{t(x, x_2)} = -\frac{iu(x)}{2k}\frac{1}{t(x, x_2)} - \frac{iu(x)}{2k}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)}\exp\{-2ikx\}, \quad (89)$$

$$\frac{d}{dx}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)} = \frac{iu(x)}{2k}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)} + \frac{iu(x)}{2k}\frac{1}{t(x, x_2)}\exp\{2ikx\}, \quad (90)$$

с начальными условиями

$$1/t(x_2, x_2) = 1, \quad r(x_2, x_2)/t^*(x_2, x_2) = 0. \tag{91}$$

Полученные уравнения (86)–(91) являются базовыми уравнениями метода комбинации параметров рассеяния [10,11]. Ясно, что аналогичные уравнениям (86)–(91) уравнения могут быть написаны также для случая, когда амплитуды отражения и прохождения усеченных потенциалов определяются посредством правой задачи рассеяния.

Как известно, метод фазовых функций позволяет получить уравнения для амплитуд рассеяния, если только последние рассматриваются как функции от границы потенциала со стороны первичной падающей волны (см. [9]). Так, из (89), (90) можем записать

$$\frac{dt(x, x_2)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k} t(x, x_2)\big(1 + r(x, x_2)\exp\{-2ikx\}\big), \tag{92}$$

$$\frac{dr(x, x_2)}{dx} = \frac{iu(x)}{2k} \big(\exp\{ikx\} + r(x, x_2)\exp\{-ikx\}\big)^2, \tag{93}$$

с начальными условиями $t(x_2, x_2) = 1$, $r(x_2, x_2) = 0$.

Как видно из (89), (90) и (92), (93), уравнения, записанные для величин $1/t(x, x_2)$, $r(x, x_2)/t(x, x_2)$ как функций границы потенциала, в отличие от уравнений для амплитуд $t(x, x_2)$, $r(x, x_2)$ являются линейными. В заключение заметим также, что аналогичные (86)–(93) уравнения могут быть получены для случая, когда элементы матрицы переноса связываются с амплитудами прохождения и отражения правой задачи рассеяния (81).

8. Заключение

Настоящая работа посвящена известной проблеме описания стационарного движения квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида. В частности, было показано, что волновая функция частицы в любой точке пространства может быть представлена в виде суперпозиции встречных волн, амплитуды которых удовлетворяют некоторой системе линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Иными словами, при представлении волновой функции в виде $a(x)\exp\{ikx\} + b(x)\exp\{-ikx\}$ функции $a(x)$ и $b(x)$ могут быть интерпретированы как амплитуды встречных волн только в том случае, если они удовлетворяют системе (8), (9). Обоснованием данного утверждения может служить способ вывода интегрального уравнения для волновой функции. Так, в нем явным образом высвечен тот факт, что в образовании волны $a(x)\exp\{ikx\}$ принимают участие только те вторичные волны, которые распространяются в положительном направлении и были возбуждены в точках левее точки x. Аналогично волновой процесс $b(x)\exp\{-ikx\}$ обусловлен вторичными волнами, распространяющимися в отрицательном направлении и образованными в точках правее x.

В рамках предлагаемого метода устанавливается характер линейной связи, действующей между коэффициентами волновой функции левее и правее рассеивающего потенциала. Важно отметить, что в отличие от метода трансфер-матриц это становится возможным без привлечения теории унимодулярных матриц, которые, как известно, сохраняют неизменной билинейную форму $|A|^2 - |B|^2$. Метод позволяет также выразить волновую функцию частицы через элементы матрицы переноса, рассмотренные как фукнции от границ усеченного потенциала. Установлена связь между амплитудами прохождения и отражения левой и правой задач рассеяния.

Кроме того, в рамках развитого подхода удалось также выявить тесную связь, существующую между такими на первый взгляд не связанными подходами, как метод матриц переноса и метод погружения, а также метод комбинации параметров рассеяния.

Список литературы

[1] Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики. Наука, М. (1983). 664 с.
[2] В.И. Арнольд. Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. Наука, М. (1978). 214 с.
[3] P. Erdos, R.C. Herndon. Adv. Phys. **31**, 65 (1982).
[4] С. Реймс. Теория многоэлектронных систем. Мир, М. (1967). 333 с.
[5] D.S. Fisher, P.A. Lee. Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
[6] В.И. Кляцкин. Метод погружения в теории распространения волн. Наука, М. (1986). 256 с.
[7] В.А. Амбарцумян. ДАН СССР **38**, 76 (1943).
[8] G.I. Babkin, V.I. Klyatskin. Wave Motion **4**, 327 (1982).
[9] В.В. Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике. Наука, М. (1976). 287 с.
[10] Д.М. Седракян, А.Ж. Хачатрян. Докл. НАН Армении **98**, 301 (1998).
[11] D.M. Sedrakian, A.Zh. Khachatrian. Phys. Lett. A **265**, 294 (2000).
[12] М.В. Федорюк. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Наука, М. (1985). 447 с.