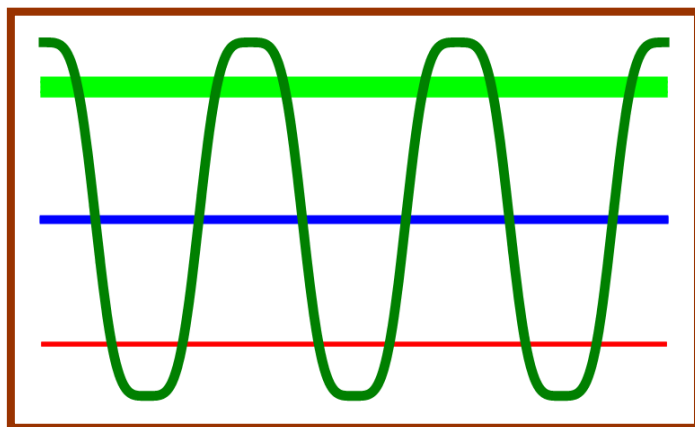


К 200-летию Харьковского университета

В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ**

Часть вторая



Харьков 2013

К 70-летию кафедры теоретической физики
имени академика И.М.Лифшица

В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ**

II

ЗОНЫ И КОНЕЧНОЗОННОСТЬ
ПРОБЛЕМА СУЩЕСТВОВАНИЯ
СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
РАССЕЯНИЕ
ТУННЕЛИРОВАНИЕ И НАДБАРЬЕРНОЕ
ОТРАЖЕНИЕ
КРИТИЧЕСКИЕ СИТУАЦИИ
БЕЗОТРАЖЕТЕЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ
РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ И
КВАЗИУРОВНИ В ЛОВУШКАХ
ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ
КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
РАСЧЕТЫ ПО ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ
АНИМАЦИОННЫЕ ДЕМОСТРАЦИИ

Харьков 2013

УДК 530.145

ББК 22.314

У 51

Рецензент – доктор физико-математических наук,
профессор А.М.Ермолаев.

У 51 **Ульянов В.В.** Компьютерные исследования квантовых явлений. Ч. 2/ В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. Монография. – Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2013. – 272 с.

ISBN 978-966-623-909-2

ISBN 978-966-623-895-8

Книга продолжает серию монографий и учебных пособий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и физического факультета, а также 70-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Рассматриваются различные квантовые явления с помощью компьютерных методов исследования: аналитических, численных и графических. Вторая часть посвящена стационарным состояниям с непрерывным энергетическим спектром. Исследуются особенности зонных структур и условия зарождения связанных состояний, изучается рассеяние с туннелированием и надбарьерным отражением в критических ситуациях, а также резонансные явления и квазиуровни в потенциальных ловушках. Применяются квазиклассическое приближение и методы теории возмущений, а также численные расчеты и графические представления, включая анимационные демонстрации.

Монография может служить также интерактивным учебным пособием. Она рассчитана на широкий круг лиц: преподавателей, научных работников, студентов физических специальностей вузов и других читателей, интересующихся современными методами квантовой теории.

К книге прилагается компакт-диск с оригинальными компьютерными разработками авторов, анимационными демонстрациями, цветными иллюстрациями и электронными изданиями книг авторов.

Рекомендовано к печати решением кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица ХНУ имени В.Н.Каразина (протокол № 3 от 15 февраля 2012 г.)

УДК 530.145

ББК 22.314

ISBN 978-966-623-909-2

ISBN 978-966-623-895-8 (ч.1)

© В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов, 2013

ПРЕДИСЛОВИЕ

*Мистер Моррис едва успевал проводить
одного гостя, как на его место прибывал другой.*

Роберт Стивенсон

Книга продолжает серию монографий и учебных пособий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и физического факультета, а также 70-летию кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица.

Рассматриваются различные квантовые явления с помощью компьютерных методов исследования: аналитических, численных и графических. Вторая часть посвящена стационарным состояниям с непрерывным энергетическим спектром. Изучаются особенности зонных структур, включая конечнотонность и особые преобразования в зонах спинового происхождения, рассматриваются явления зарождения и вытеснения связанных состояний, исследуется туннелирование и надбарьерное отражение при рассеянии частиц, особенно в критических ситуациях, когда их энергия близка к максимуму отражающего барьера, надъямное рассеяние и рассеяние на реальных и виртуальных уровнях энергии, резонансные явления и квазиуровни в разного рода потенциальных ловушках, а также явление безотражательности (сверхпрозрачности) потенциалов солитонного происхождения. Применяются методы квазиклассического приближения и теории возмущений, а также численные расчеты и графические представления, включая анимационные демонстрации.

Монография может служить также *интерактивным* пособием. Она рассчитана на широкий круг лиц: преподавателей, научных работников, студентов физических специальностей вузов и других читателей, интересующихся современными методами квантовой теории. *Неотъемлемой частью книги* является прилагаемый компакт-диск с оригинальными компьютерными разработками авторов, анимационными демонстрациями, цветными иллюстрациями и электронными версиями авторских книг по квантовой теории.

Спасибо А.М.Ермолаеву за постоянную помощь и поддержку. Н.В.Ульянов благодарит П.М.Иванова за обучение программированию на языке C++.

Январь 2013 года

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ С НЕПРЕРЫВНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ

ВВЕДЕНИЕ

*И вот, как каждый год, на большую игру
съехалось много гостей.*

Герман Гессе

Во второй книге предполагается изложить вопросы, связанные со *стационарными состояниями непрерывного энергетического спектра*: формирование зонных энергетических структур в периодических потенциальных полях, зарождение и вытеснение связанных стационарных состояний, одномерное рассеяние с туннелированием и надбарьерным отражением, включая особые критические ситуации, когда энергия близка к максимуму барьера-рассеивателя, надъямное рассеяние и рассеяние на реальных и виртуальных уровнях энергии, безотражательность солитонных потенциалов, резонансные явления и квазиуровни в различных потенциальных ловушках.

Третья книга должна быть посвящена *кинетическим проблемам*: пакетное движение – слабая нестационарность, переменные внешние воздействия – сильная нестационарность.

Второй том, как и первый, мы разбили на четыре части. В первом разделе «Энергетические зоны» рассматриваются физические системы в условиях, когда движение квантовых частиц описывается потенциальными полями, моделируемыми периодическими структурами. Излагаются общие результаты по изучению подобных систем численными методами решения уравнения Шредингера, а также приведены расчеты приближенными аналитико-численными методами (квазиклассическое приближение, теория возмущений). Особое внимание уделено типичным представителям периодических систем – *квазиточнорешаемым* моделям спиновой природы, а также эллиптическим кноидальным потенциалам, обладающим удивительным свойством *конечнозонности*. Рассматриваются различные примеры нестандартных симметричных и несимметричных моделей потенциальных полей.

Во втором разделе «Вытеснение связанных состояний» обсуждается проблема существования связанных стационарных состояний на фоне непрерывного энергетического спектра, проведены исследования типично квантового явления возникновения и исчезновения таких состояний в одномерных условиях движения квантовых частиц.

Третий раздел «Рассеяние в одномерном случае» посвящен типичным квантовым явлениям туннелирования и надбарьерного отражения, а также надъямного отражения. Рассматривается рассеяние на потенциальных моделях, допускающих точное решение. Среди таких моделей можно назвать, во-первых, δ -потенциалы разных знаков и различных сочетаний (по знаку и количеству). Во-вторых, прямоугольные потенциалы и ямы в таком же разнообразии. Далее – потенциал Эккарта с удивительной принадлежностью к солитонам в качестве ямы определенного профиля с безотражательностью. Затем – потенциал Лапласа. Кроме того, возможные фрагменты известных моделей типа Морса. Все эти точно решаемые задачи наглядно демонстрируют особенности рассеяния, а также позволяют контролировать численные методы и различные приближенные аналитические расчеты.

Особый прием при численном интегрировании стационарного уравнения Шредингера позволил вести расчеты характеристик рассеяния на потенциалах любой конфигурации. Правильность результатов и оценка их точности также определялись сопоставлением с упомянутыми точно решаемыми задачами.

Наконец, четвертый раздел «Квазиуровни в потенциальных ловушках» посвящен ситуациям, когда при рассеянии

возникают различные резонансные явления. На фоне непрерывного энергетического спектра могут появляться отдельные дискретные значения энергии, для которых наблюдается полная прозрачность рассеивающей системы. Это так называемые квазиуровни, часто характеризуемые комплексным значением энергии, действительная часть которого определяет энергию с полной прозрачностью, а мнимая характеризует ширину резонансного пика в окрестности этой энергии.

Часть результатов исследований, а также перечень презентаций, анимаций и стендов с их кратким описанием содержатся в Приложениях в конце книги.

На прилагаемом к книге компакт-диске содержится достаточно много анимационных демонстраций. Они отражают изменения физических характеристик исследуемых систем в зависимости от некоторых параметров. Анимации другого типа, которые моделируют во времени реальные процессы, происходящие в физической системе, будут представлены в приложениях к третьему тому книги.

1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ

*Между жарким и бланманже
Цимлянское несут уже.*

А.С.Пушкин

Среди квантовых явлений образование энергетических зон занимает особое положение. Мы начинаем вторую часть нашей монографии с рассмотрения особенностей этих удивительных объектов, поскольку зоны служат промежуточным звеном между темами первой части и основными разделами второй. Зоны, с одной стороны, сохраняют элементы дискретности, а с другой стороны, близки к состояниям непрерывного спектра.

Сделаем несколько замечаний относительно используемой далее терминологии. Для краткости *зонами* будем называть *полосы разрешенных* уровней энергии, а *полосы запрещенных* уровней энергии будут именоваться *щелями* между зонами, или *лакунами*. Подобно связанным стационарным состояниям, зону с наименьшими энергиями будем называть основной, или нулевой, а над нею будут располагаться первая возбужденная, вторая и т. д. На черно-белых книжных графических иллюстрациях зоны будут изображаться сплошными серыми закрашенными (либо заштрихованными, либо только обрамленными) полосами, а на цветных (в электронной версии книги и в презентации «Зоны») – соответствующего цвета: основная – красным, первая – синим, вторая – зеленым и т. д.

Обычно основное внимание уделяется исследованию зонного спектра энергии частиц, движущихся в трехмерном периодическом поле (электроны в кристалле). Одномерная задача при этом если и упоминается, то лишь для демонстрации общих квантовых закономерностей формирования зон. В настоящее время интерес к системам низкой размерности, вызванный экспериментальными и техническими достижениями в области изучения и применения тонкопленочных и нитевидных материалов, все возрастает. В связи с этим задача о структуре одномерных зон приобретает самостоятельное значение, выходя за рамки методической проблемы.

Некоторые примеры из данного раздела связаны с анализом одномерных зон в случае слабых полей (главным образом в приближении слабой связи). Часть материала посвящена квазиклассическому описанию энергетических зон, отвечающему достаточно сильным полям. Отдельное внимание уделяется критическому диапазону энергий – ситуации, когда зона находится в окрестности максимумов потенциала. Оба подхода – квазиклассический и слабого поля – позволяют найти меры зонной структуры для произвольного профиля поля. Общие результаты иллюстрируются на конкретных моделях, для которых возможно точное решение, что позволяет судить об эффективности используемых аппроксимаций.

Рассматриваемые одномерные задачи относятся, прежде всего, к теории энергетической зонной структуры с искусственно созданной периодичностью (в пленочных слоях, так называемых сверхрешетках и т. п.), где ветвь одномерного движения частицы сквозь слои отделяется от ветвей движения вдоль слоев. Кроме того, областью приложения может служить распространение возбуждений (квазичастиц) внутри проволок, нитей с достаточно малыми поперечными размерами и периодическими свойствами.

Еще о терминологии. Чаще всего мы будем описывать общее расположение зон, находя для каждой зоны ее крайние энергетические обрамления, т. е. *дно и потолок*. Этими грубыми характеристиками не исчерпываются сведения о зонах. Полосы разрешенных энергий не являются аморфными непрерывными образованиями. Тонкая структура зон определяется зависимостью энергии внутри зоны от так называемого *квазиимпульса* – физической величины, подобной обычному импульсу, характеризующему движение свободных частиц. В связи с этим вводится термин «зоны Бриллюэна» – области значений квазиимпульса (первая зона, вторая и т. д.), а также представление о двух схемах изображения зависимости энергии внутри зоны от квазиимпульса («закона дисперсии»), поскольку энергия является периодической функцией квазиимпульса. В *схеме приведенных зон* изображаются зависимости энергий от

квазиимпульса, ограниченного только первой зоной Бриллюэна, тогда как в *схеме расширенных зон* представлены зависимости энергий для всех значений квазиимпульса.

Добавим, что при исследовании зонных структур численные результаты будут чередоваться с аналитическими приближениями на основе квазиклассических аппроксимаций и теории возмущений. В силу периодичности потенциальных полей целесообразно также использовать гармонический анализ, т. е. разложение потенциала в ряд Фурье.

Если потенциалы ячеек являются четными функциями координат, то удобно воспользоваться свойствами симметрии волновых функций стационарных состояний, относящихся к крайним уровням энергии в зонах, когда на свойства периодичности и антипериодичности этих функций накладываются свойства четности и нечетности. Это существенно упрощает расчеты как на основе точных решений ячейечного потенциала (чаще всего это функции параболического цилиндра, функции Эйри или тригонометрические функции), так и с помощью численного решения уравнения Шредингера. Для несимметричных форм ячейечного потенциала удобен самый общий метод отыскания закона дисперсии на основе частных решений на интервале периодичности потенциала, базирующийся на теореме Блоха.

Наконец, будем говорить о ситуации «сильной связи», когда потенциальные барьеры ячеечного потенциала слабопроницаемы, так что основная зона (и возможные возбужденные) получается незначительным расщеплением связанного состояния в отдельно взятой ячейочной потенциальной яме. Ситуация же «слабой связи» отвечает формированию зонного спектра за счет образования незначительных щелей на фоне непрерывного спектра энергии. Эта картина дает два подхода к объяснению возникновения зонного спектра, тогда как для конкретной сформировавшейся зонной структуры обычно реализуются оба аспекта.

С указанными ситуациями связана и возможность рассмотрения двух предельных случаев при изменении параметров потенциала. Для определенности в дальнейших примерах мы будем полагать период потенциала равным фиксированной величине: $d = \pi$ (примеры с изменением периода рассмотрим отдельно). Основной же изменяемой величиной будет некий амплитудный параметр $a > 0$, который будет характеризовать величину потенциального поля (обычно максимум ячейочного потенциала). Примером может служить амплитуда синусоидального потенциала. Первому предельному случаю при $a \rightarrow 0$ соответствует отсутствие поля при сохранении «разметки», т. е. периода ($d = \pi$). При этом на шкале энергий имеем следующие предельные точки:

$e_0 = 0, e_1 = 1, e_2 = 1, e_3 = 4, e_4 = 4, e_5 = 9, e_6 = 9, \dots$. При увеличении параметра a именно из пар точек с двукратным вырождением $(e_1, e_2), (e_3, e_4), (e_5, e_6)$ и т. д. начнется формирование щелей.

Другому предельному случаю при $a \rightarrow \infty$ отвечает полная изоляция ячеечных потенциалов, «запертых» в интервале $d = \pi$. Тогда выбранным пронумерованным значениям энергии соответствуют уровни энергии связанных состояний, образованных из предельно зауженных зон с крайними значениями энергии $(e_0, e_1), (e_2, e_3), (e_4, e_5)$ и т. д.

На конкретных примерах периодических потенциальных полей и будут в дальнейшем проиллюстрированы эти метаморфозы зонных структур.

Таким образом, в многообразии квантовых явлений, подлежащих заявленным компьютерным исследованиям, на первом этапе добавляются: *образование лагун* в непрерывном энергетическом спектре и *формирование зон* расщеплением уровней энергии связанных стационарных состояний в отдельной ячейке потенциала при ее периодическом повторении. На следующем этапе нас интересует более тонкая структура зон: *закон дисперсии*, т. е. зависимость энергии от квазиимпульса, *средняя скорость*, *плотность состояний*, *эффективная масса*. Кроме того, отдельного внимания

заслуживают волновые функции соответствующих стационарных состояний в зонах – блоховские волны.

Говоря о периодических потенциальных моделях с точными решениями, мы имеем в виду ситуации, когда ячейки потенциала построены из элементов, для которых существуют точные математические частные решения. Чаще всего это функции Эйри для линейных участков, функции параболического цилиндра для квадратичных участков, тригонометрические функции для постоянных участков потенциала. В этих случаях для энергетических зон получаются точные характеристические уравнения, которые, однако, не дают явных выражений для энергий, а требуют дальнейшего численного или приближенного аналитического расчета.

Заметим, что безразмерные величины соответствуют принятым в первой части монографии. Так, уравнение Шредингера для стационарных состояний частицы с квадратичным законом дисперсии и энергией e при одномерном движении в потенциальном поле $u(z)$ в координатном представлении записывается в виде

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + [e - u(z)]\psi = 0. \quad (1.1)$$

1.1. Общие соотношения и аппроксимации для зон

*Не без некоторого волнения начинаю я повествование...
Гастон Леру*

Далее мы приводим некоторые общие сведения о свойствах одномерных энергетических зон, а также излагаем результаты приближенных расчетов на основе теории возмущений и квазиклассического приближения.

Для справок отсылаем читателя к литературным источникам [1-8].

Начинаем с двух принципиально важных положений, лежащих в основе теории зонного спектра энергии, – *теоремы Блоха и дисперсионного уравнения.*

В одномерном случае теорема Блоха утверждает, что для периодического потенциала с периодом d

$$u(z + d) = u(z)$$

решением уравнения Шредингера (1.1) будет волновая функция

$$\psi_p(z) = e^{ipz} \varphi_p(z), \quad (1.2)$$

где множитель $\varphi_p(z)$ является периодической функцией с тем же периодом $\varphi_p(z + d) = \varphi_p(z)$, а вещественный параметр p называют квазиимпульсом.

В математической литературе положение (1.2) относят к частному случаю теоремы Флоке, а параметр p называют характеристическим показателем.

Из формулы (1.2) вытекает, что

$$\psi_p(z+d) = e^{ipd} e^{ipz} \varphi_p(z+d) = e^{ipd} \psi_p(z),$$

или
$$\psi_p(z) = e^{ipd} \psi_p(z-d). \quad (1.3)$$

Пусть в интервале $-\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2}$ известны линейно независимые частные решения $f_1(z)$ и $f_2(z)$ уравнения Шредингера (1.1) для потенциала $u(z)$, так что $\psi_p(z) = c_1 f_1(z) + c_2 f_2(z)$. Тогда в соседнем интервале $\frac{d}{2} < z < \frac{3}{2}d$ согласно (1.3) $\psi_p(z) = e^{ipd} [c_1 f_1(z-d) + c_2 f_2(z-d)]$.

Сшивание волновой функции и ее производной на границе $z = d/2$ этих интервалов дает систему двух линейных однородных уравнений для коэффициентов c_1 и c_2

$$\begin{cases} c_1 f_1(\frac{d}{2}) + c_2 f_2(\frac{d}{2}) = e^{ipd} [c_1 f_1(-\frac{d}{2}) + c_2 f_2(-\frac{d}{2})] \\ c_1 f_1'(\frac{d}{2}) + c_2 f_2'(\frac{d}{2}) = e^{ipd} [c_1 f_1'(-\frac{d}{2}) + c_2 f_2'(-\frac{d}{2})] \end{cases}, \quad (1.4)$$

нетривиальное решение которой существует, если определитель этой системы равен нулю.

Преобразования при вычислении этого определителя

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} f_1\left(\frac{d}{2}\right) - e^{ipd} f_1\left(-\frac{d}{2}\right) & f_2\left(\frac{d}{2}\right) - e^{ipd} f_2\left(-\frac{d}{2}\right) \\ f_1'\left(\frac{d}{2}\right) - e^{ipd} f_1'\left(-\frac{d}{2}\right) & f_2'\left(\frac{d}{2}\right) - e^{ipd} f_2'\left(-\frac{d}{2}\right) \end{vmatrix} = \\ & = f_1\left(\frac{d}{2}\right)f_2'\left(\frac{d}{2}\right) + e^{2ipd} f_1\left(-\frac{d}{2}\right)f_2'\left(-\frac{d}{2}\right) - \\ & - e^{ipd} \left[f_1\left(-\frac{d}{2}\right)f_2'\left(\frac{d}{2}\right) + f_1\left(\frac{d}{2}\right)f_2'\left(-\frac{d}{2}\right) \right] - \\ & - f_2\left(\frac{d}{2}\right)f_1'\left(\frac{d}{2}\right) - e^{2ipd} f_2\left(-\frac{d}{2}\right)f_1'\left(-\frac{d}{2}\right) + \\ & + e^{ipd} \left[f_1'\left(-\frac{d}{2}\right)f_2\left(\frac{d}{2}\right) + f_1'\left(\frac{d}{2}\right)f_2\left(-\frac{d}{2}\right) \right] = \\ & = f_1\left(\frac{d}{2}\right)f_2'\left(\frac{d}{2}\right) - f_2\left(\frac{d}{2}\right)f_1'\left(\frac{d}{2}\right) + \\ & + e^{2ipd} \left[f_1\left(-\frac{d}{2}\right)f_2'\left(-\frac{d}{2}\right) - f_2\left(-\frac{d}{2}\right)f_1'\left(-\frac{d}{2}\right) \right] - \\ & - e^{ipd} \left[f_1\left(-\frac{d}{2}\right)f_2'\left(\frac{d}{2}\right) + f_1\left(\frac{d}{2}\right)f_2'\left(-\frac{d}{2}\right) - f_1'\left(-\frac{d}{2}\right)f_2\left(\frac{d}{2}\right) - f_1'\left(\frac{d}{2}\right)f_2\left(-\frac{d}{2}\right) \right] \\ & \text{приводят к уравнению } A(1 + e^{2ipd}) = e^{ipd} B, \text{ или } \cos(pd) = \frac{B}{2A}, \end{aligned}$$

где буквой A обозначен не зависящий от координат вронскиан $f_1 f_2' - f_2 f_1'$, а B – соответствующее выражение из функций $f_{1,2}$ и их производных.

Окончательно получаем дисперсионное уравнение

$$\frac{f_1(-\frac{d}{2})f_2'(\frac{d}{2}) + f_1(\frac{d}{2})f_2'(-\frac{d}{2}) - f_1'(-\frac{d}{2})f_2(\frac{d}{2}) - f_1'(\frac{d}{2})f_2(-\frac{d}{2})}{2[f_1f_2' - f_2f_1']} = \cos(pd), \quad (1.5)$$

которое в неявном виде содержит закон дисперсии, т. е. зависимость энергии в зонах $e_s(p)$ от квазиимпульса.

Первая производная энергии по квазиимпульсу $\frac{de_s(p)}{dp}$ дает среднюю скорость в стационарных состояниях с блоховской волновой функцией, а вторая – обратную эффективную массу.

Возвращаясь к уравнениям для блоховской волновой функции (1.4), отметим, что равенство нулю определителя этой системы означает, что независимым остается только одно из уравнений. Пусть это будет первое уравнение

$$c_1 f_1(\frac{d}{2}) + c_2 f_2(\frac{d}{2}) = e^{ipd} [c_1 f_1(-\frac{d}{2}) + c_2 f_2(-\frac{d}{2})].$$

Отсюда получаем искомые величины c_1 и c_2 с точностью до коэффициента C , играющего роль нормировочного множителя блоховской волновой функции:

$$\begin{aligned} c_1 &= C \left[e^{ipd} f_2(-\frac{d}{2}) - f_2(\frac{d}{2}) \right], \\ c_2 &= C \left[f_1(\frac{d}{2}) - e^{ipd} f_1(-\frac{d}{2}) \right]. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Таким образом, блоховская волновая функция с точностью до нормировочного множителя полностью определена в интервале $-\frac{d}{2} < z < \frac{d}{2}$ (обозначим его как нулевой):

$$\psi_p^{(0)}(z) = C \left\{ \left[e^{ipd} f_2\left(-\frac{d}{2}\right) - f_2\left(\frac{d}{2}\right) \right] f_1(z) + \left[f_1\left(\frac{d}{2}\right) - e^{ipd} f_1\left(-\frac{d}{2}\right) \right] f_2(z) \right\}, \quad (1.7)$$

где частные решения $f_1(z)$ и $f_2(z)$ на этом интервале и их значения на его границах зависят от энергии в соответствии с дисперсионным уравнением (1.5).

Затем получаем выражение для блоховской функции в соседнем интервале $\frac{d}{2} < z < \frac{3d}{2}$ (в наших обозначениях – первом) в соответствии с правилом (1.3): $\psi_p^{(1)}(z) = e^{ipd} \psi_p^{(0)}(z - d)$.

Далее продолжаем такую процедуру. Этот итерационный процесс можно записать в виде формулы для блоховской функции, определенной в интервалах от $-N$ до N :

$$\begin{aligned} \psi_p^{(-N, N)}(z) &= \\ &= \sum_{l=-N}^N \theta(d/2 + z - d \cdot l) \theta(d/2 - z + d \cdot l) \exp(ipd \cdot l) \psi_p^{(0)}(z - d \cdot l). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Здесь ступенчатая функция Хэвисайда

$$\theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases}$$

Итак, главные точные результаты, определяющие зонные параметры в том случае, когда известны частные ячеечные

решения уравнения Шредингера с периодическим потенциалом, содержатся в формулах (1.5) и (1.8).

Теперь переходим к приближенным методам вычисления зонных характеристик.

Для расчетов по теории возмущений целесообразно использовать Фурье-представление $w(l)$ периодических потенциалов $u(z)$ с периодом d

$$u(z) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} w(l) e^{\frac{2\pi i l}{d} z}, \quad (1.9)$$

$$w(l) = \frac{1}{d} \int_{(d)} u(z) e^{-\frac{2\pi i l}{d} z} dz. \quad (1.10)$$

Положение дна нулевой зоны по теории возмущений определяется поправкой первого порядка $de_0^{(1)}$ к основному собственному значению энергии $\varepsilon_0^{(0)} = 0$ для $u \equiv 0$. Эта поправка равна среднему значению возмущения, т. е. потенциала $u(z)$, в невозмущенном основном состоянии, так что

$$de_0^{(1)} = w(0) = \frac{1}{d} \int_{(d)} u(z) dz. \quad (1.11)$$

Расчет поправки второго порядка приводит к формуле

$$de_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{d}{\pi} \right)^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|w(l)|^2}{l^2}. \quad (1.12)$$

Таким образом, положение дна нулевой зоны в квадратичном по величине потенциала приближении определяется выражением

$$e_0^{(2)} = de_0^{(1)} + de_0^{(2)} = \frac{1}{d} \int_{(d)} u(z) dz - \frac{1}{2} \left(\frac{d}{\pi} \right)^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|w(l)|^2}{l^2}. \quad (1.13)$$

Добавим еще формулу для s -й щели между $(s-1)$ -й и s -й зонами ($s = 1, 2, \dots$)

$$\delta e_s = 2|w(s)|. \quad (1.14)$$

Теперь перейдем к результатам квазиклассических расчетов для параметров зон. Ширина s -й зоны «глубокого залегания» при малой прозрачности барьеров вычисляется по формуле

$$\Delta e_s = \frac{2}{\pi} \omega(e_s) \arcsin \left[\sqrt{T(e_s)} \right], \quad (1.15)$$

где $\omega(e_s)$ – циклическая частота классических колебаний в ячейке потенциала, $T(e_s)$ – коэффициент прозрачности отдельного барьера, разделяющего ямки ячеек, e_s – средняя энергия данной зоны.

При этом для фигурирующих в (1.15) величин имеем расчетные формулы

$$\omega(e) = \frac{2\pi}{\tau_{кл}(e)} = \frac{4\pi}{\oint \frac{dz}{\sqrt{e-u(z)}}}, \quad (1.16)$$

где обращаем внимание на коэффициенты в связи с принятыми соглашениями для безразмерных физических величин:

$$T(e) = \exp\left[-2 \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{u(z) - e} dz\right], \quad (1.17)$$

где z_1 и z_2 – классические приборьерные точки поворота.

В том случае, когда зона попадает в критический диапазон энергий вблизи максимума барьера, разделяющего ячеечные ямы, классический период колебаний $\tau_{кл}(e)$ нужно заменить на соответствующий квантовый $\tau_{кв}(e)$, а для коэффициента прозрачности использовать особые выражения, учитывающие структуру вершины барьера. Явные формулы будут выписаны далее при исследовании конкретных критических ситуаций.

Наконец, при больших энергиях для щелей между зонами квазиклассический расчет дает выражение

$$\delta e = \frac{2}{\pi} \omega \sqrt{1-T}, \quad (1.18)$$

где ω – циклическая частота условных колебаний между вершинами соседних барьеров.

Добавим к перечисленным квазиклассическим выражениям еще и общую формулу для закона дисперсии в зонах

$$e_s(p) = \bar{e}_s + (-1)^{s+1} \frac{\omega(\bar{e}_s)}{\pi} \arcsin[\sqrt{T(\bar{e}_s)} \cos(pd)], \quad (1.19)$$

где \bar{e}_s – средняя энергия s -й зоны, а p – квазиимпульс (в схеме приведенных зон $|p| \leq \frac{\pi}{d}$).

Для зон «глубокого залегания» при слабопроницаемых барьерах с $T \ll 1$ из (1.19) получается закон дисперсии

$$e_s(p) = e_s(0) + (-1)^s \frac{2\omega(\bar{e}_s)}{\pi} \sqrt{T} \left(\sin \frac{pd}{2}\right)^2. \quad (1.20)$$

Сразу же отметим, что при изучении каждой конкретной модели периодических потенциалов мы не будем стремиться применять все приближенные выражения. Нашей целью будет лишь демонстрация эффективности указанных аппроксимаций на отдельных примерах.

1.2. Потенциалы с точными зонными решениями

Пора, пора! рога трубят...

А.С.Пушкин

На рисунках 1 и 2 представлены некоторые профили одномерных периодических потенциальных полей, допускающих точное решение задачи о собственных значениях в виде энергетических зон.

Любопытно, что среди этих потенциалов есть аналог точно решаемого степенного квадратичного потенциала – жемчужины объектов, рассмотренных в нашей первой книге. Это – синусоидальная модель, описываемая функциями Матье, для которой хорошо изучены как собственные функции, так и собственные значения (рис. 1-1). Мы и начнем с этого относительно простого примера, чтобы продемонстрировать приближенные методы расчета, которые будут применяться в других случаях.

На рис.1-2 представлен кусочно-постоянный потенциал – хорошо изученная модель Кронига-Пенни.

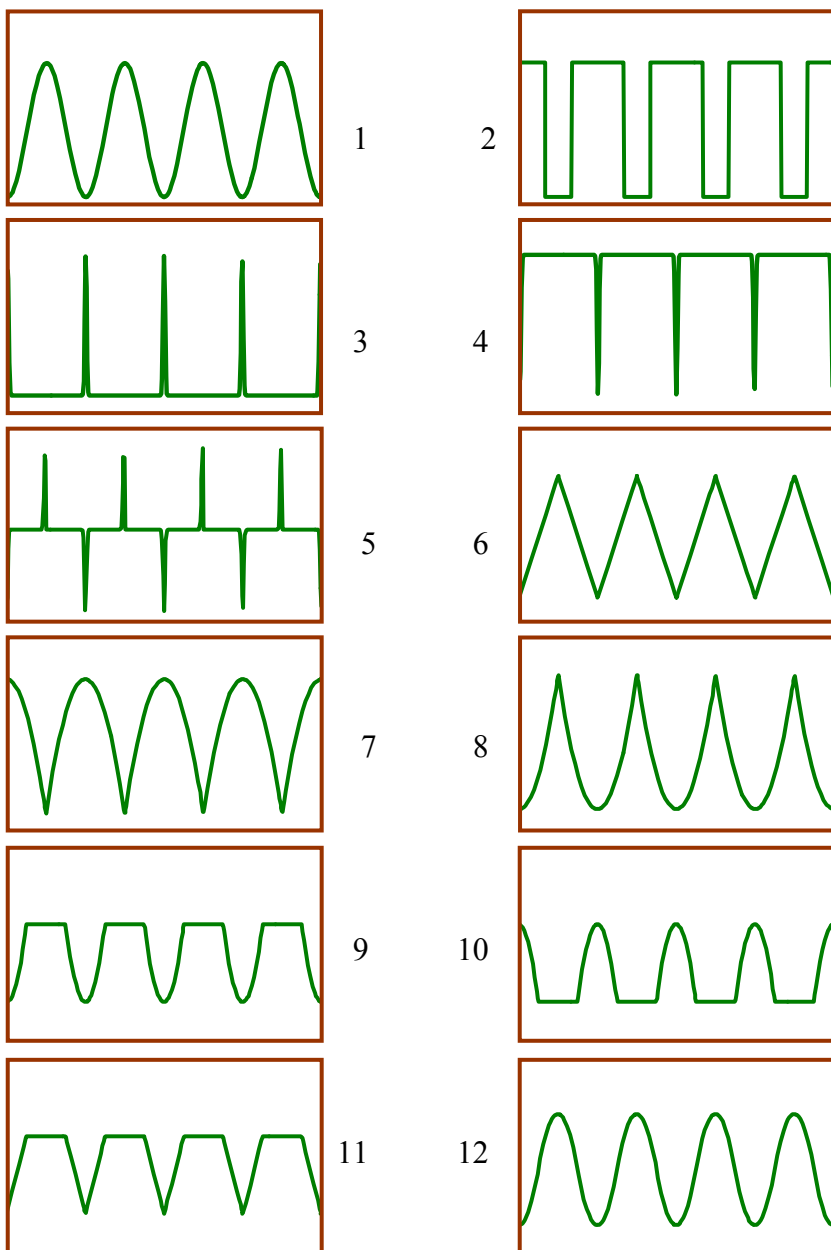


Рис.1. Периодические потенциалы с точными решениями.

На рисунках 1-3, 1-4 и 1-5 изображены потенциальные поля, построенные на основе дельта-функций Дирака: положительные всплески поля отвечают так называемой «гребёнке» Дирака, модель с отрицательными всплесками будем называть «обратной гребёнкой» Дирака (или «антигребёнкой»), а модель с всплесками разных знаков – «комбинированной гребёнкой». Заметим, что все три последние модели можно получить соответствующим предельным переходом из модели Кронига-Пенни.

На рисунке 1-6 показана модель с ячейками в виде симметричного линейного потенциала – «пила с изломами», а на рисунках 1-7 и 1-8 – аналогичные модели, построенные из параболических ячеек.

На рисунках 1-9 и 1-10 мы видим кусочно-постоянные ячейки с параболическими вкраплениями разных знаков, а на рисунке 1-11 аналогичный случай с линейными фрагментами.

Наконец, на рисунке 1-12 изображена кусочно-параболическая симметричная модель.

Далее обратимся к моделям на следующей странице. На рис.2-1 представлена несимметрично расположенная в ячейке параболическая яма, а на рис.2-2 – кусочно-параболическая. Аналогичные модели на рисунках 2-3 и 2-4 соответствуют параболам противоположного знака.

По такому же принципу построены ячейки на рисунках 2-5 и 2-6 с линейными фрагментами. Рисунок 2-7 знакомит нас с еще одной линейной моделью – «пилой с разрывами». Модель на рис.2-8 также является «пилой с разрывами» на кусочно-параболической основе.

Остальные модели на этой странице тоже могут быть названы «пилами с изломами и разрывами». Они построены из соответствующих параболических и линейных фрагментов.

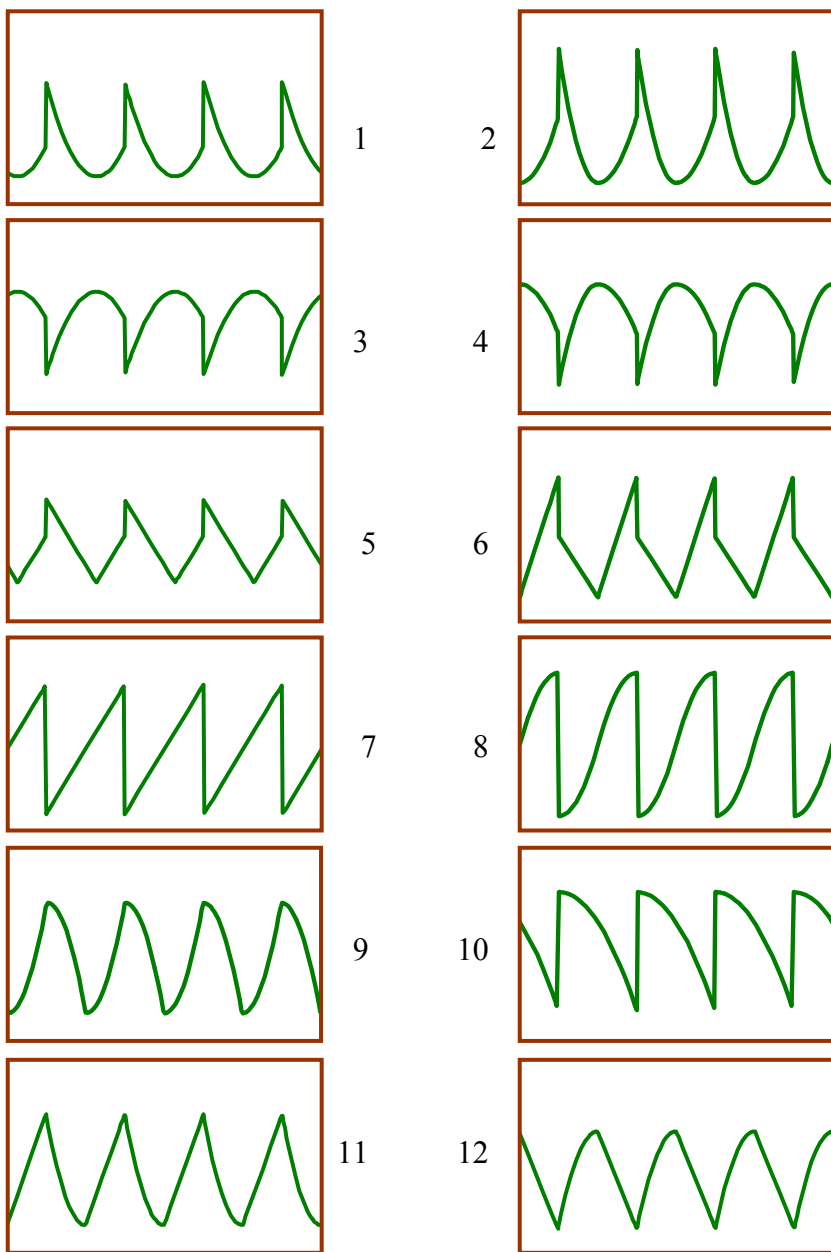


Рис.2. Периодические потенциалы с точными решениями.

Синусоидальный потенциал

Как уже было отмечено, мы начинаем с рассмотрения одномерного периодического потенциального поля синусоидального вида

$$u(z) = 2a \sin^2 z = a - a \cos(2z) . \quad (1.21)$$

Эта модель имеет два параметра. Амплитуда потенциала характеризуется величиной a (максимум потенциала равен $2a$), а период $d = \pi$ выбран в соответствии со стандартной формой записи уравнения Матье. Причем этот период, как уже отмечалось, будет фигурировать и в других исследуемых моделях. Такая унификация сделана для того, чтобы сравнивать результаты для различных потенциалов (как качественно, так и количественно), поскольку зонные характеристики весьма чувствительны к величине периода.

Во избежание недоразумений, сразу же отметим, что в математических справочниках [9-10] уравнение Матье обычно записывается в такой форме, что амплитудный множитель, обозначаемый там буквой q , соответствует нашему $-a/2$, тогда как собственные значения в наших обозначениях равны $e - a$ (величина e , как и обычно, есть энергия частицы).

В системе компьютерной математики Mathematica, которая служит основой вычислительной части наших исследований, соответствующие решения уравнения Матье с потенциалом

(1.21) выглядят следующим образом: четные собственные функции $\text{MathieuC}[e-a, -a/2, z]$ и нечетные $\text{MathieuS}[e-a, -a/2, z]$, а пронумерованные определенным образом собственные значения содержатся в выражениях $\text{MathieuCharacteristicA}[n, -a/2]$ и $\text{MathieuCharacteristicB}[n, -a/2]$, которые также несут информацию о законах дисперсии в зонах (о чем будет сказано далее).

На основе указанных формул для собственных значений составим таблицу крайних уровней энергии в трех нижних зонах синусоидального потенциала (1.21) для некоторых опорных значений амплитудного параметра a .

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.098750	1.049689	1.149685	4.099792	4.101041	9.100154
0.5	0.468961	1.242429	1.741941	4.494793	4.525829	9.503665
1.0	0.878234	1.470654	2.466767	4.979189	5.100901	10.01372
4.0	2.486043	2.609324	6.379200	7.672233	9.172665	13.14063
10	4.199954	4.209919	11.85819	12.09946	17.44911	19.23633

Заметим, что в Приложении 1 помещена более полная таблица для этих значений параметра a (9 крайних уровней энергии в нижних зонах с большим числом верных знаков).

На рисунках 3-4 представлены графики синусоидального потенциала и трех его нижних зон для отдельных опорных значений параметра $a = 0.5, 1, 4, 10$. Рисунок 5 демонстрирует расположение этих же зон на графиках зависимости энергии от этого параметра в диапазонах $0 \leq a \leq 4$ и $0 \leq a \leq 10$.

Переходим к оценке зонных характеристик на основе указанных аппроксимаций.

Энергия дна нулевой зоны в первом приближении теории возмущений согласно (1.8) и (1.18) равна

$$e_0^{(1)} = w(0) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = a. \quad (1.22)$$

Сравним этот простой результат с данными в таблице энергий. При $a = 0.1$ точное значение $e_0 = 0.098750$, так что (1.22) дает ответ с относительной ошибкой $\delta_0^{(1)} = -1\%$. При $a = 0.5$ точное значение $e_0 = 0.468961$, так что относительная ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = -7\%$. Если $a = 1$, то $e_0 = 0.878234$ и относительная ошибка уже достигает значения $\delta_0^{(1)} = -14\%$.

Переходим ко второму приближению, где в соответствии с (1.10) энергия дна нулевой зоны равна

$$e_0^{(2)} = w(0) - \frac{1}{2} \left(\frac{d}{\pi} \right)^2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|w(l)|^2}{l^2}. \quad (1.23)$$

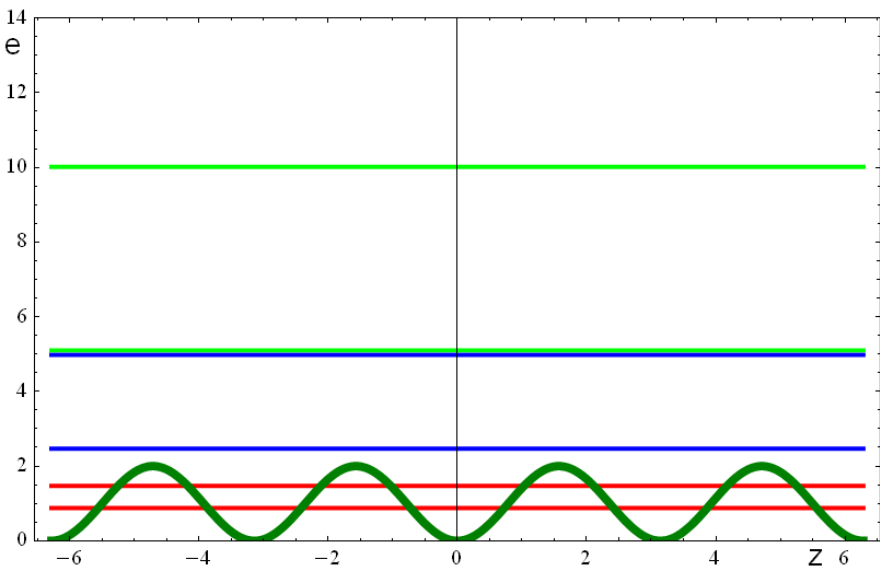
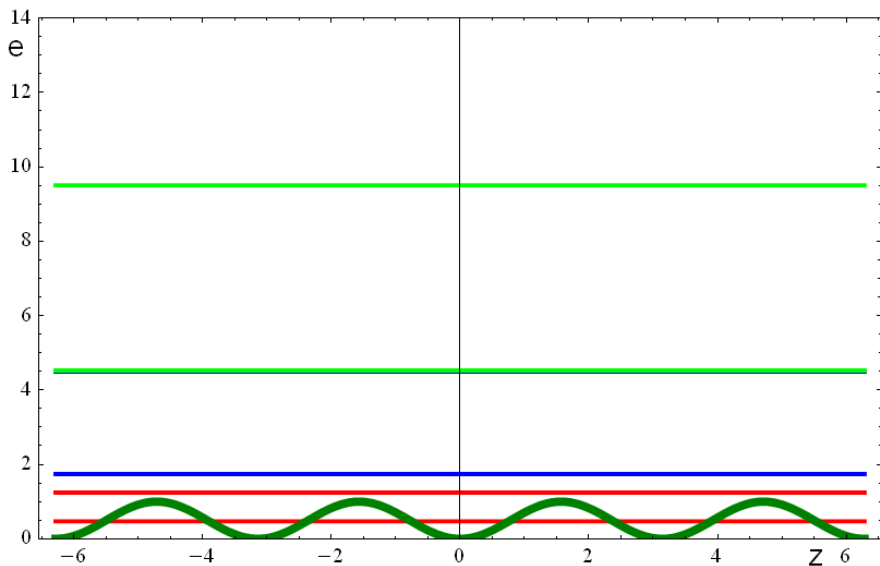


Рис.3. Периодический синусоидальный потенциал и три зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

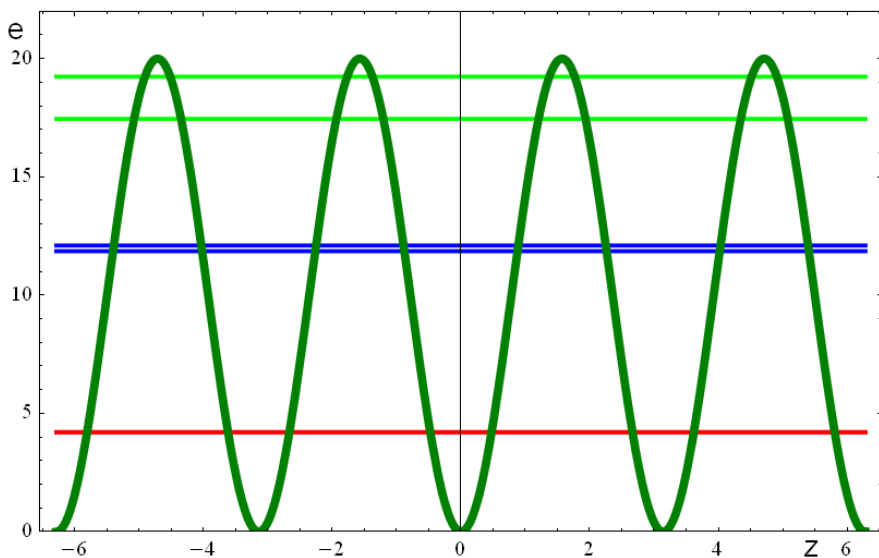
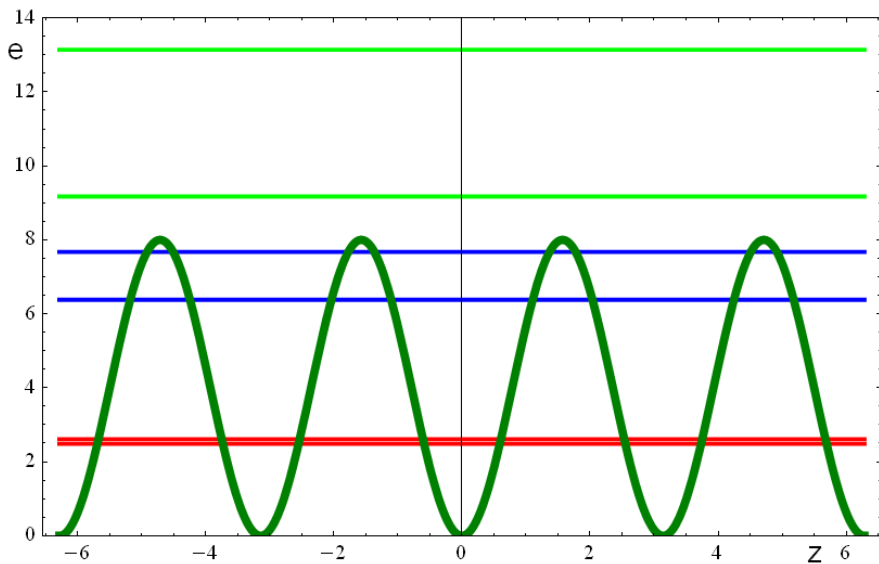


Рис.4. Периодический синусоидальный потенциал и три зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

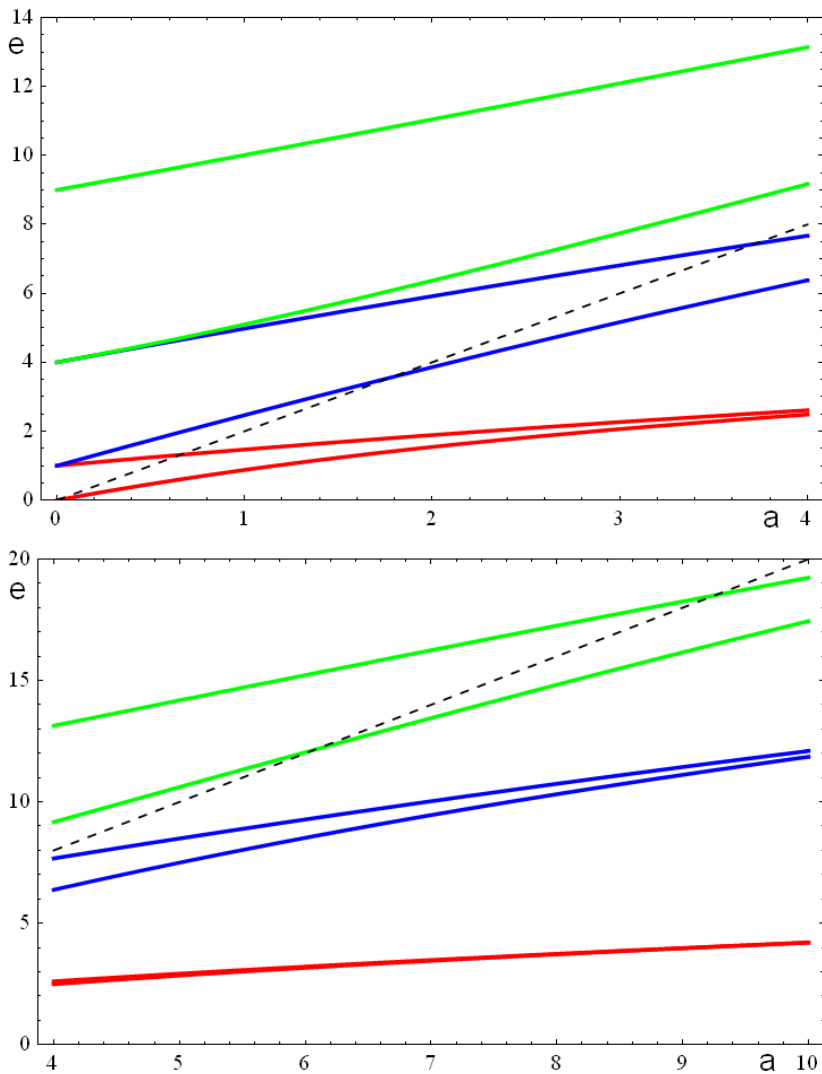


Рис.5. Периодический синусоидальный потенциал и три зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 4$ (вверху) и $4 \leq a \leq 10$ (внизу). Штриховая линия соответствует максимуму потенциала.

В сумме (1.23) для нашего потенциала $d = \pi$ и отлична от нуля только первая гармоника $w(1) = -a/2$, так что

$$e_0^{(2)} = a - \frac{1}{8}a^2. \quad (1.24)$$

Вновь сравниваем (1.24) с данными в таблице энергий. При $a = 0.1$ точное значение $e_0 = 0.0987503$ (значение с бóльшей точностью берем из таблицы в Приложении 1), а (1.24) дает ответ $e_0^{(2)} = 0.0987500$ с относительной ошибкой $\delta_0^{(1)} = 0.0003\%$. При $a = 0.5$ точное значение $e_0 = 0.468961$, а $e_0^{(2)} = 0.46875$, так что относительная ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = 0.04\%$. Если $a = 1$, то $e_0 = 0.878234$, а $e_0^{(2)} = 0.875$, так что относительная ошибка все еще достаточно мала $\delta_0^{(1)} = 0.4\%$. И только при $a = 4$, когда $e_0 = 2.486043$, а $e_0^{(2)} = 2$, относительная ошибка достигает $\delta_0^{(1)} = 20\%$.

Таким образом, аппроксимация второго порядка теории возмущений для дна нулевой зоны обеспечивает высокую точность не только для малых амплитудных значений синусоидального потенциала, но даже для $a \sim 1$.

Теперь обратимся к расчету энергетических щелей. Первая щель (между нулевой и первой зонами) в соответствии с (1.11) равна

$$\delta e_1 = 2|w(1)| = a. \quad (1.25)$$

При $a = 0.1$ из все той же таблицы имеем точное значение $e_2 - e_1 = 0.099996$, тогда как из (1.25) вытекает $\delta e_1 = 0.1$, так что относительная ошибка равна $\delta = -0.004\%$. При $a = 0.5$ точное значение $e_2 - e_1 = 0.499512$, а $\delta e_1 = 0.5$, так что относительная ошибка равна $\delta = -0.1\%$. При $a = 1$ точное значение $e_2 - e_1 = 0.9961$, а $\delta e_1 = 1$, так что $\delta = -0.4\%$. Наконец, если $a = 4$, то $e_2 - e_1 = 3.769876$ и $\delta e_1 = 4$, что дает уже относительную ошибку $\delta = -6\%$.

Следовательно, и относительно приближенной формулы для первой щели (1.25) сделанные выводы о точности остаются в силе. Добавим, что для данного потенциала щели «более высокого залегания» требуют учета следующих приближений теории возмущений. Конкретные результаты можно почерпнуть из математических справочников. Так, из [9] следует, что в соответствующем приближении $\delta e_2 = \frac{1}{8}a^2$, $\delta e_3 = \frac{1}{256}a^3$ и т. д., что обеспечивает такую точность для второй щели: при $a = 0.1$ получается $\delta = -0.1\%$, если $a = 0.5$, то $\delta = -0.7\%$, если $a = 1$, то $\delta = -3\%$. О точности указанной формулы для третьей щели

читатель может судить на основе более полной таблицы зонных энергий синусоидального потенциала в Приложении 1.

Теперь очередь дошла до квазиклассического приближения. Ширина зоны, попадающей в подбарьерную область энергий нашего потенциала согласно формуле (1.12) равна

$$\Delta e_s = \frac{2}{\pi} \omega(e_s) \arcsin \left[\sqrt{T(e_s)} \right].$$

Основная зона располагается в этой области, как видно из графиков на рис. 3-5, лишь начиная со значений параметра $a \sim 1$. Так, для $a = 1$ из таблицы следует, что ширина нулевой зоны равна $e_1 - e_0 = 0.59242$. Вычисления по формулам (1.13) и (1.14) для средней энергии в зоне $e = (e_1 + e_0) / 2 = 1.17444$ дают классический период колебаний в

ячеечной ямке
$$\tau(e) = 2 \int_0^{z_1} \frac{dz}{\sqrt{e - a + a \cos(2z)}} = 2.7379$$
 и

коэффициент прозрачности отдельного барьера

$$T(e) = \exp \left[-4 \int_{z_1}^{\pi/2} \sqrt{a - a \cos(2z) - e} dz \right] = 0.142636.$$

Отсюда ширина нулевой зоны равна
$$\Delta e_0 = \frac{4}{\tau} \arcsin \left(\sqrt{T} \right) = 0.565804$$
 с

относительной ошибкой $\delta = 4\%$. В случае $a = 10$ уже две зоны попадают в подбарьерную область энергий. Ширина нулевой зоны равна $e_1 - e_0 = 0.00996542$. Вычисления по формулам (1.13) и (1.14) для средней энергии в зоне $e = (e_1 + e_0) / 2 = 4.20494$ дают

классический период колебаний в ячеечной ямке $\tau(e) = 0.744533$ и коэффициент прозрачности отдельного барьера $T(e) = 2.761 \cdot 10^{-6}$. Отсюда ширина нулевой зоны равна $\Delta e_0 = 0.00892662$ с относительной ошибкой $\delta = 10\%$.

Ширина первой зоны равна $e_3 - e_2 = 0.241273$. Вычисления по формулам (1.13) и (1.14) для средней энергии в зоне $e = (e_3 + e_2)/2 = 11.9788$ дают классический период колебаний в ячеечной ямке $\tau(e) = 0.871362$ и коэффициент прозрачности отдельного барьера $T(e) = 0.0025502$. Отсюда ширина нулевой зоны равна $\Delta e_0 = 0.231917$ с относительной ошибкой $\delta = 4\%$.

Таковы типичные результаты расчета ширин подбарьерных зон достаточно глубокого залегания. Большой точности можно достичь, учитывая поправки второго квазиклассического приближения к формулам для периода и коэффициента прозрачности, что оставляем сделать читателю.

Остается вычислить квазиклассические ширины надбарьерных щелей по формуле (1.15). В случае $a = 4$ для третьей щели $e_6 - e_5 = 0.229695$ при средней энергии $e = (e_6 + e_5)/2 = 13.2555$ получаем период условных колебаний между вершинами соседних барьеров $\tau(e) = 1.07306$ и коэффициент прозрачности барьера, рассчитанный по формуле Кэмбла для квадратичной вершины барьера, равен

$T(e) = \left[\exp \left[-\pi (e - 2a) / \sqrt{2a} \right] + 1 \right]^{-1} = 0.997092$. В результате имеем величину третьей щели $\delta e_3 = 0.201019$ с относительной ошибкой $\delta = 12\%$. Данные для лакун высокого залегания мы взяли из таблиц в Приложении 1.

Закон дисперсии для зон синусоидального потенциала (1.21) получается на основании уже упомянутых выражений пакета Mathematica: зависимость энергии нулевой зоны с параметром a от квазиимпульса в первой зоне Бриллюэна, т. е. для $-1 \leq p \leq 1$, дает формула

$$e_0(p) = \text{MathieuCharacteristicA}[p, -a/2] + a, |p| \leq 1. \quad (1.26)$$

Этой же формулой описывается закон дисперсии первой энергетической зоны во второй зоне Бриллюэна

$$e_1(p) = \text{MathieuCharacteristicA}[p, -a/2] + a, 1 \leq |p| \leq 2 \quad (1.27)$$

и т. д., т. е. эти выражения определяют закон дисперсии в схеме расширенных зон. Соответствующая перестройка переменных позволяет перейти и к схеме приведенных зон. На основании этих соотношений построены графики законов дисперсии для зон синусоидального потенциала при характерных значениях параметра $a = 0.5, 1, 4$, представленные на рисунках 6-11 (в схемах расширенных и приведенных зон). Добавим еще результаты расчетов закона дисперсии по квазиклассическим формулам (1.16)-(1.17). Они представлены на рис. 12.

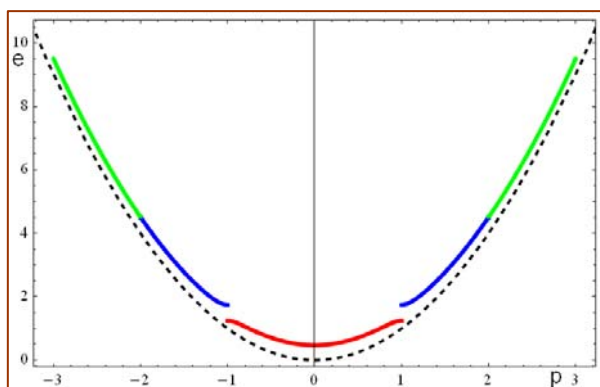
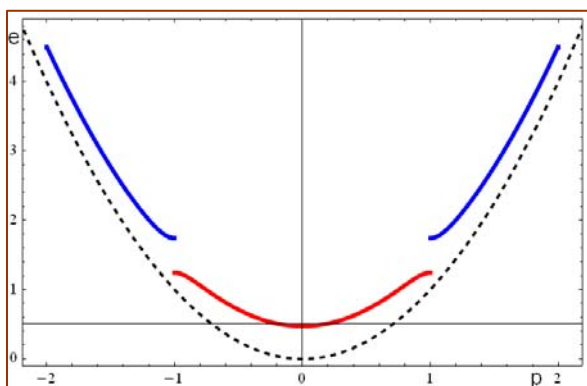
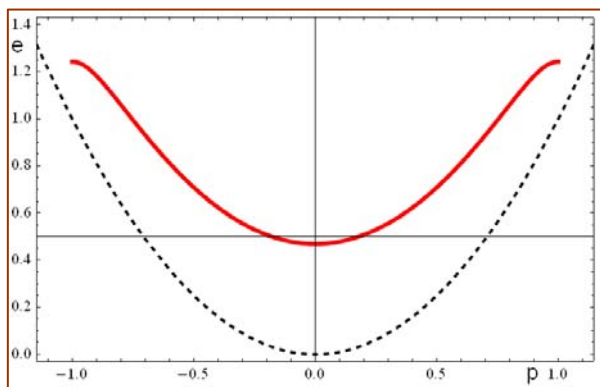


Рис.6. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме расширенных зон для параметра $a = 0.5$.

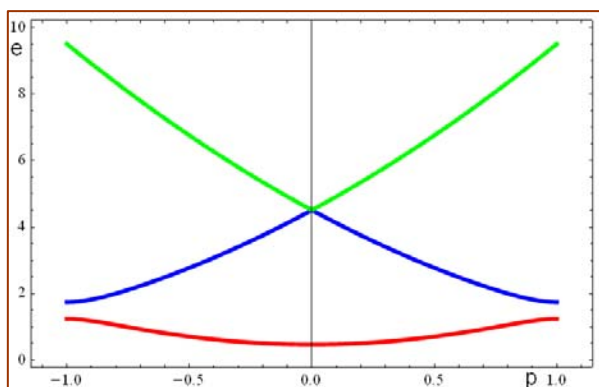
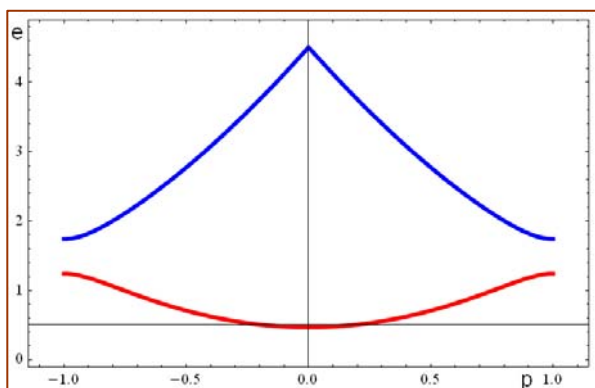
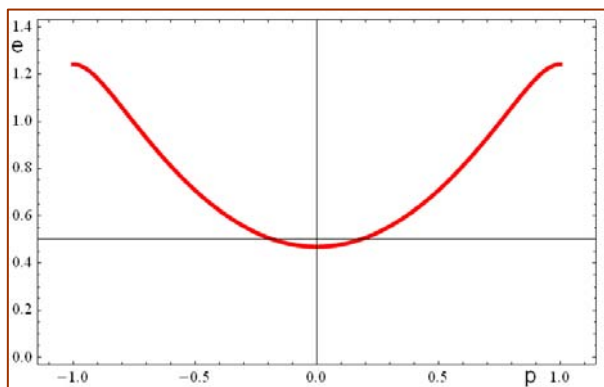


Рис.7. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме приведенных зон для параметра $a = 0.5$.

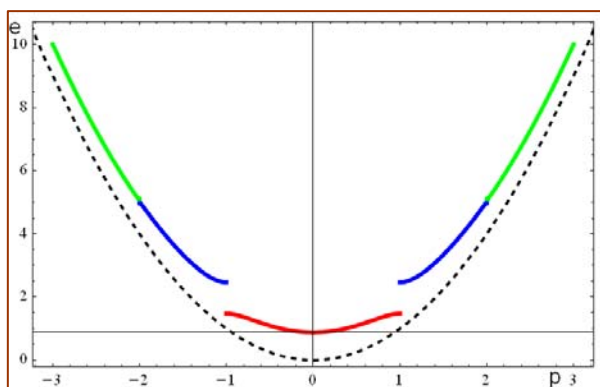
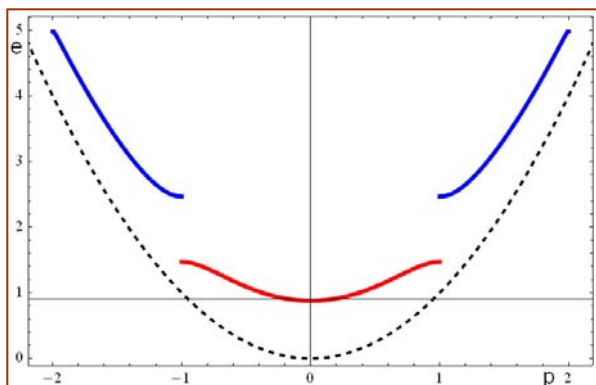
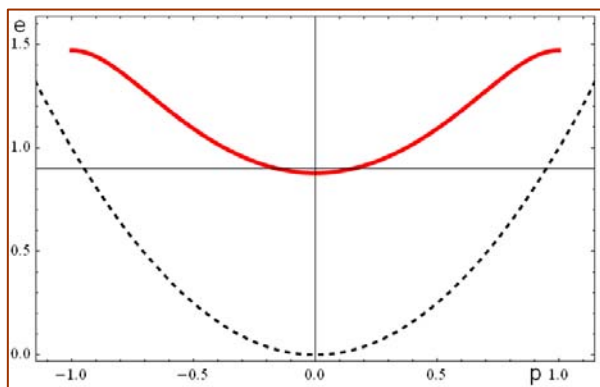


Рис.8. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме расширенных зон для параметра $a = 1$.

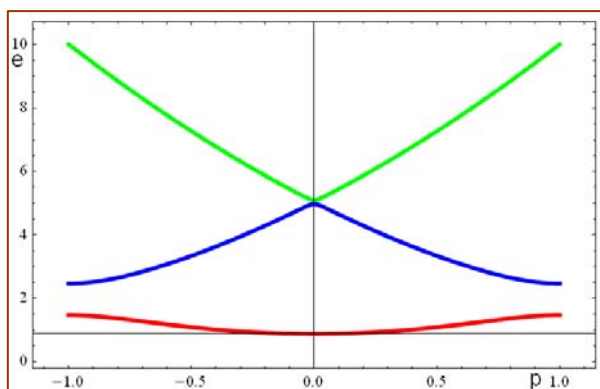
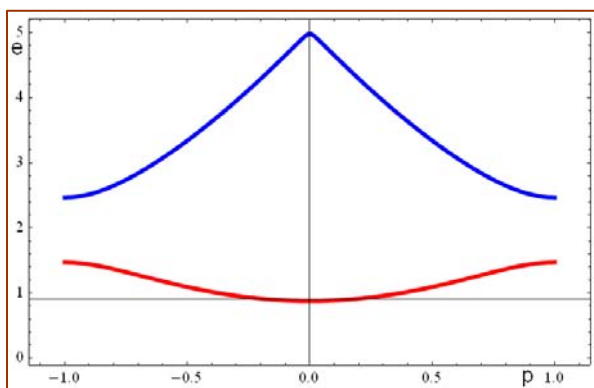
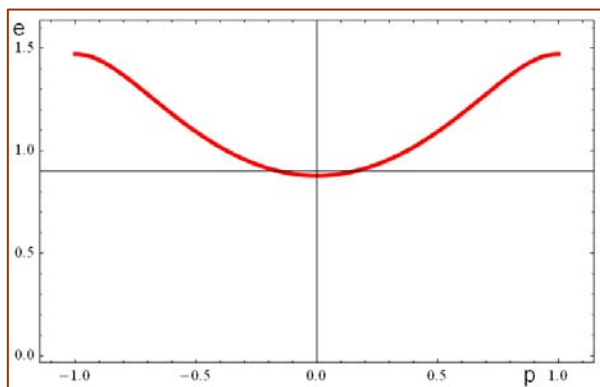


Рис.9. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме приведенных зон для параметра $a = 1$.

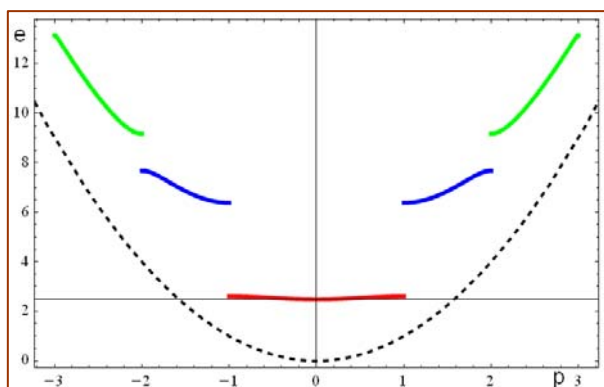
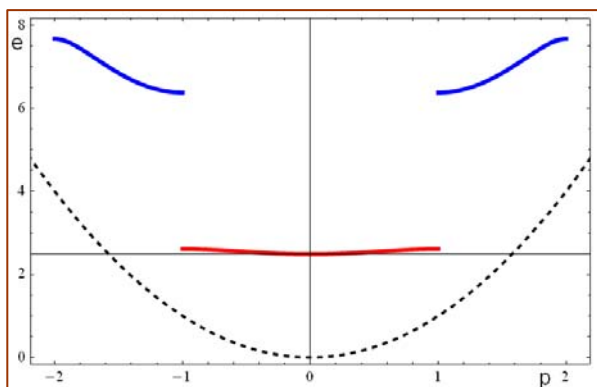
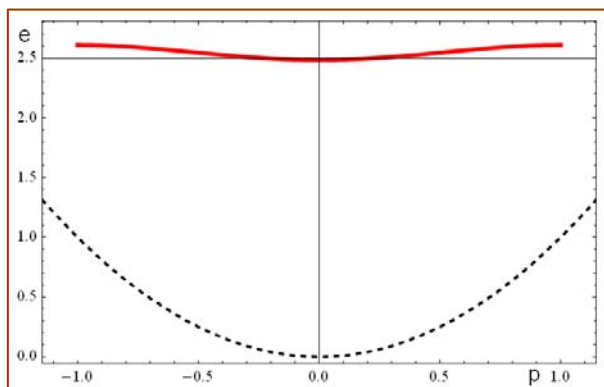


Рис.10. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме расширенных зон для параметра $a = 4$.

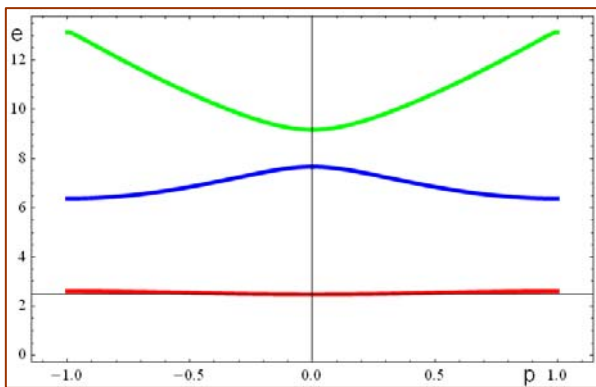
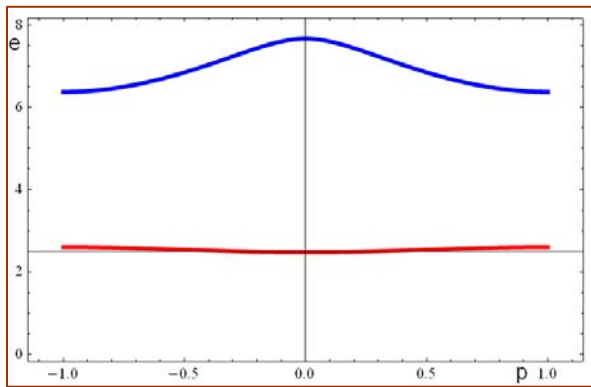
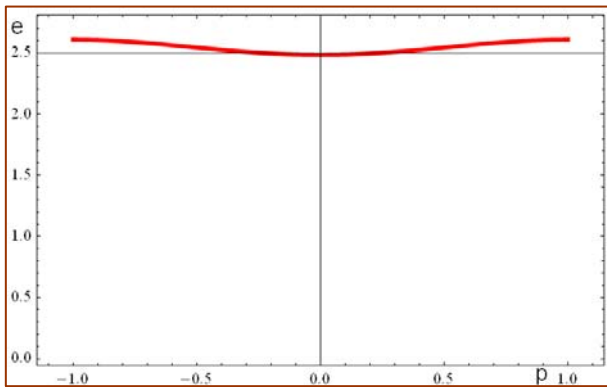


Рис.11. Закон дисперсии трех зон синусоидального потенциала в схеме приведенных зон для параметра $a = 4$.

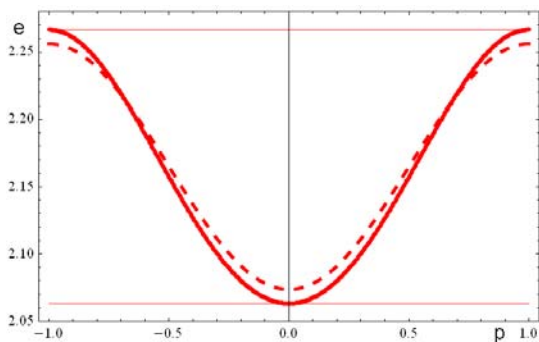
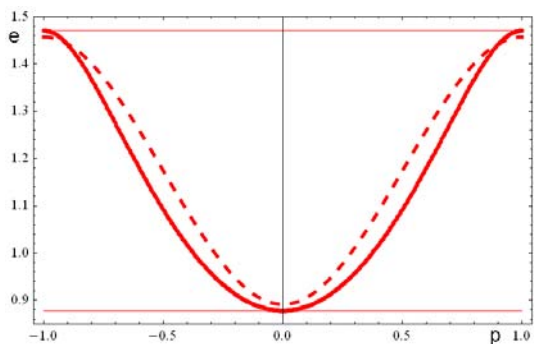
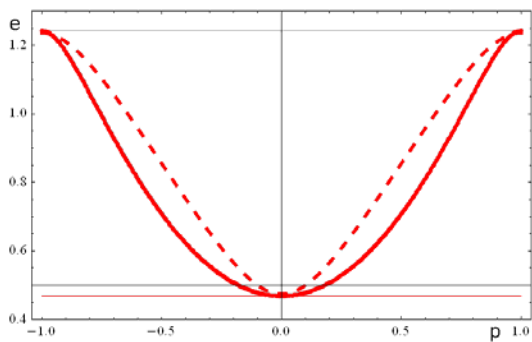


Рис.12. Закон дисперсии нулевой зоны синусоидального потенциала в первой зоне Бриллюэна для значений параметра $a = 0.5, 1, 3$ (сверху вниз). Штрихами показано квазиклассическое приближение.

Модель Кронига-Пенни

Следующим потенциалом будет кусочно-постоянная модель Кронига-Пенни (рис.1-2) с периодом d , амплитудным параметром a и ячейкой

$$u(z) = a\theta(|z| - c/2), \quad -d/2 \leq z \leq d/2, \quad (1.28)$$

где ступенчатая функция Хэвисайда $\theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases}$

Как и в других случаях, мы выбираем фиксированный период $d = \pi$. Наши компьютерные исследования будут касаться потенциала с равными участками постоянного значения, т. е. полагаем $c = d/2$.

Расчеты крайних уровней энергии в трех нижних зонах для характерных значений амплитудного параметра сведены в таблицу

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.04949	1.01803	1.08169	4.04984	4.05047	9.06067
0.5	0.23719	1.08757	1.40568	4.24609	4.26168	9.30443
1.0	0.44920	1.16898	1.80398	4.48439	4.54626	9.61118
4.0	1.29391	1.55512	4.00000	5.75437	6.63177	11.4664
10	1.96806	2.01451	7.04960	7.58216	11.5005	14.9618

Графики на рисунках 13-15 показывают поведение этих зон в зависимости от амплитудного параметра a .

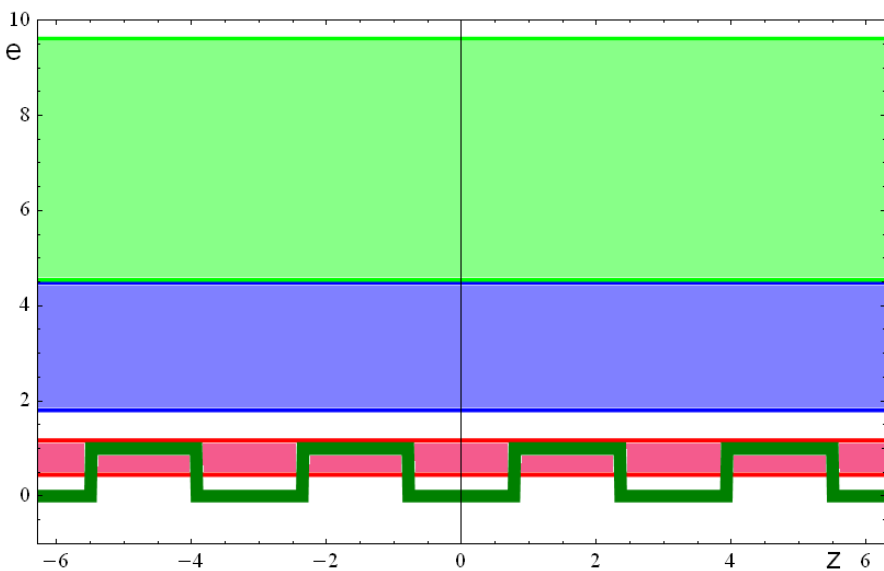
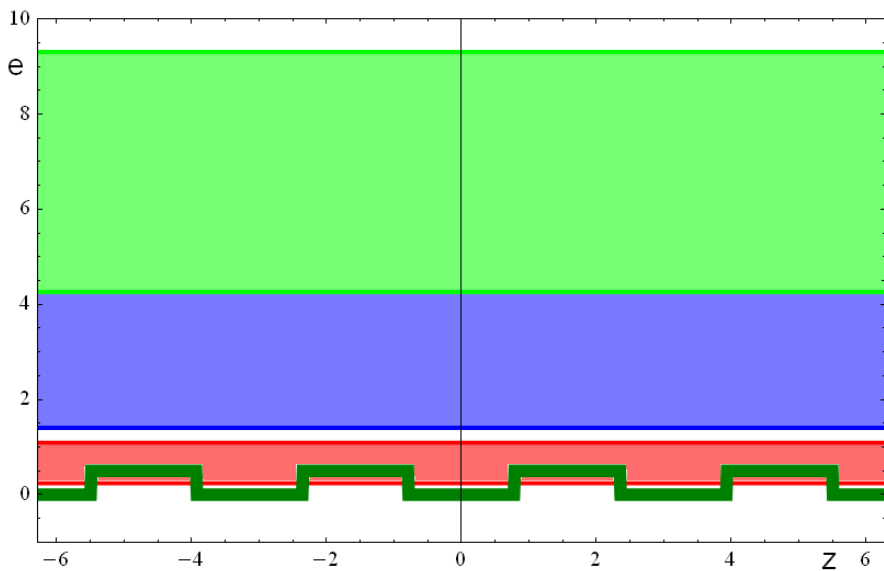


Рис.13. Периодический потенциал Кронига-Пенни и три зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

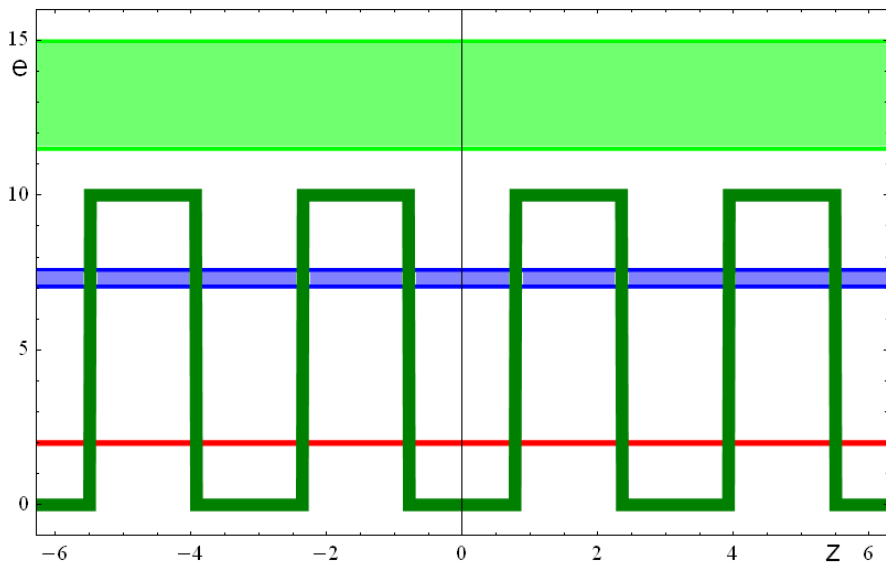
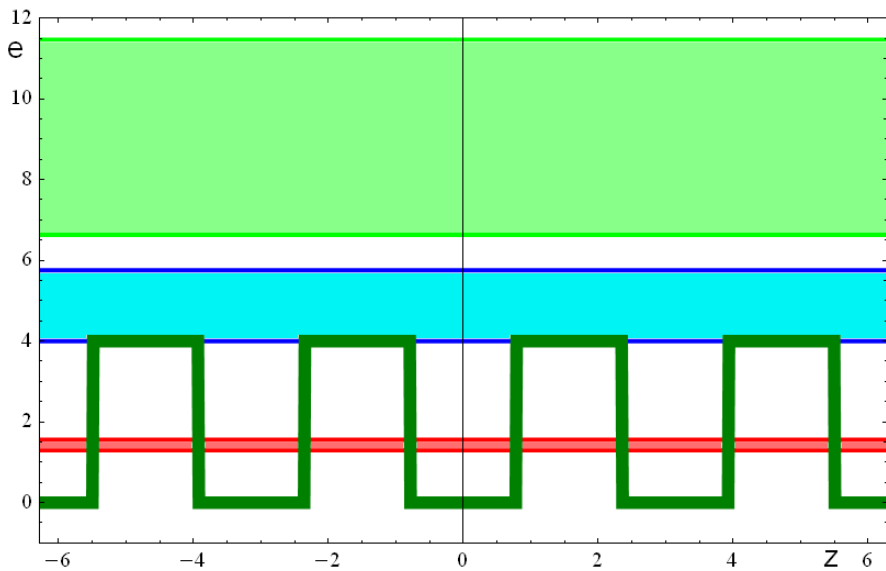


Рис.14. Периодический потенциал Кронига-Пенни и три зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

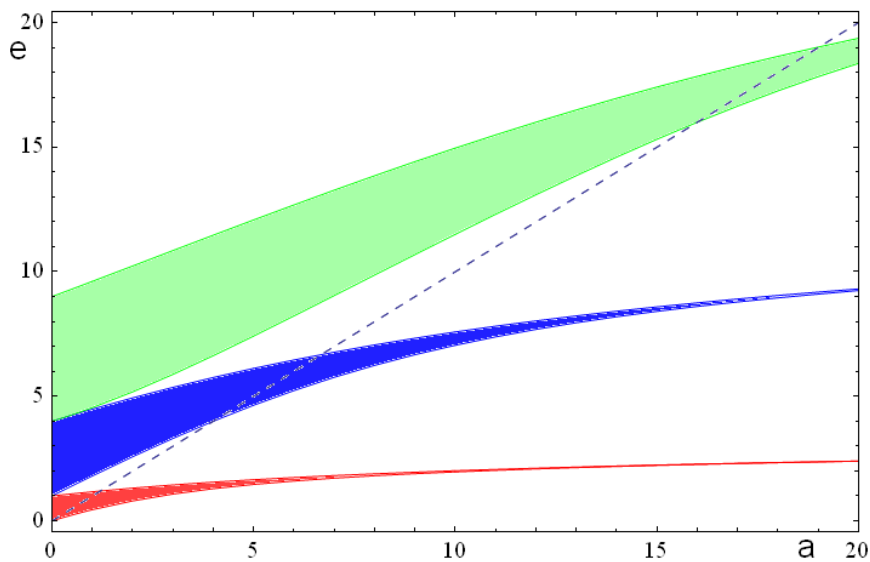
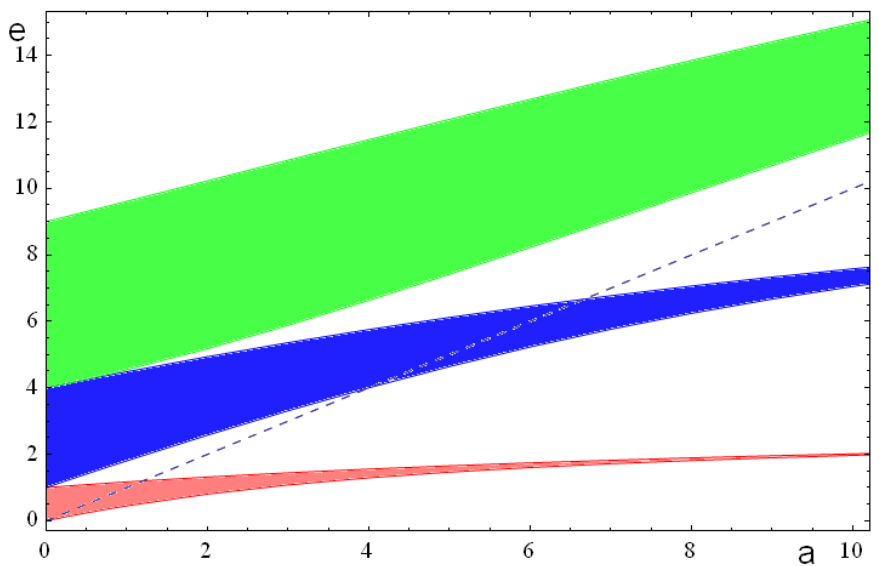


Рис.15. Периодический потенциал Кронига-Пенни и три зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 10$ (вверху) и $0 \leq a \leq 20$ (внизу). Штрихами показано положение максимума потенциала.

Закон дисперсии в зонах модели Кронига-Пенни с нашими параметрами задается дисперсионным уравнением

при $e < a$

$$\begin{aligned} & \operatorname{ch}(\sqrt{a-ed}/2) \operatorname{ch}(\sqrt{ed}/2) + \\ & + \frac{a-2e}{2\sqrt{e}\sqrt{a-e}} \operatorname{sh}(\sqrt{a-ed}/2) \operatorname{sh}(\sqrt{ed}/2) = \cos(pd), \end{aligned} \quad (1.29)$$

при $e > a$

$$\begin{aligned} & \cos(\sqrt{e-ad}/2) \cos(\sqrt{ed}/2) - \\ & - \frac{2e-a}{2\sqrt{e}\sqrt{e-a}} \sin(\sqrt{e-ad}/2) \sin(\sqrt{ed}/2) = \cos(pd). \end{aligned} \quad (1.30)$$

На рисунках 16 и 17 представлены результаты расчета закона дисперсии в схеме расширенных зон для значений амплитудного параметра $a = 0.5$ и $a = 1$.

Теперь обратимся к результатам приближенных расчетов характеристик зонного спектра модели Кронига-Пенни. Начинаем с результатов теории возмущений, которые базируются на параметрах Фурье-представления (1.9)-(1.10) рассматриваемой модели периодического потенциала (1.28). В данном случае

$$w(0) = a/2, \quad w(l) = \frac{a \sin(l\pi/2)}{l\pi}. \quad (1.31)$$

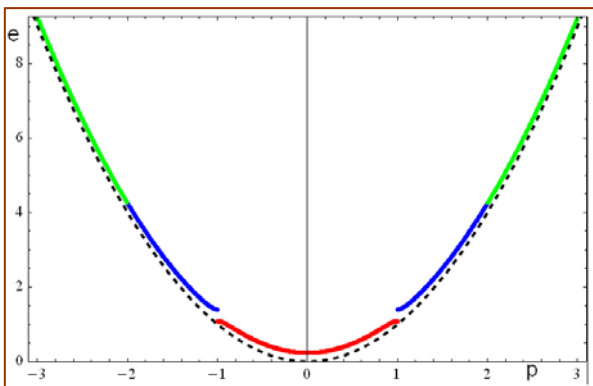
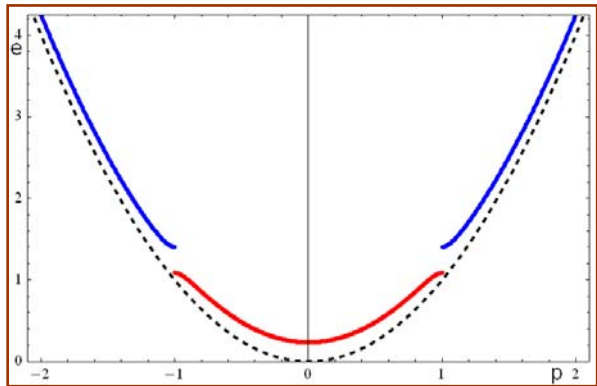
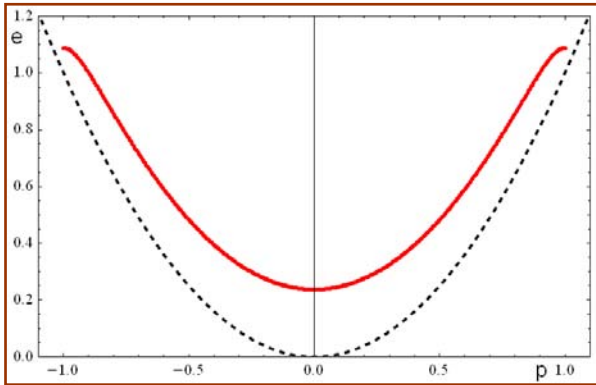


Рис.16. Закон дисперсии в трех зонах потенциала Кронига-Пенни для параметра $a = 0.5$ (схема расширенных зон).

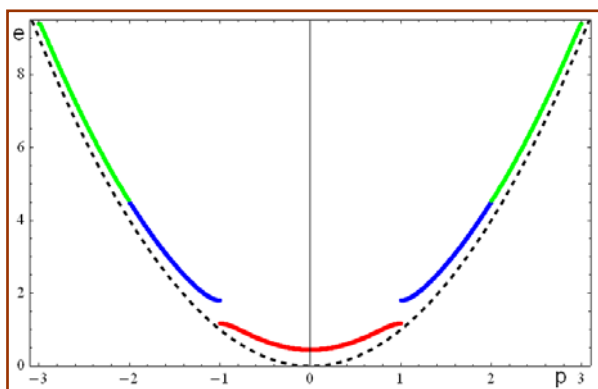
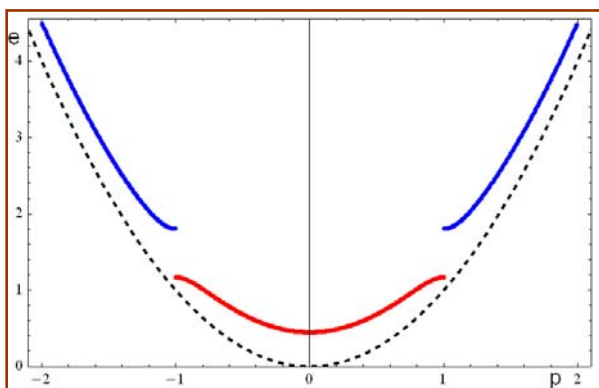
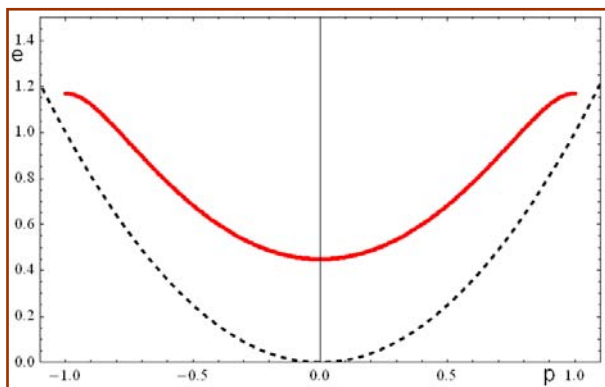


Рис.17. Закон дисперсии в трех зонах потенциала Кронига-Пенни для параметра $a = 1$ (схема расширенных зон).

Энергия дна нулевой зоны при $a = 0.1$ согласно нашим расчетам равна $e_0 = 0.04948602$ (в таблице это значение дано с меньшим числом верных знаков), а в первом порядке теории возмущений согласно (1.11) $e_0^{(1)} = w(0) = a/2 = 0.05$, так что относительная ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = -1\%$. Во втором приближении теории возмущений в соответствии с выражением

$$(1.12) \quad e_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \left(\frac{d}{\pi} \right)^2 \sum_1^{\infty} \frac{|w(l)|^2}{l^2} = -\frac{a^2 \pi^2}{192} = -0.00051404, \text{ так что}$$

суммарно $e_0^{(1,2)} = e_0^{(1)} + e_0^{(2)} = 0.04948596$ с относительной

ошибкой $\delta_0^{(2)} = 0.0001\%$. При $a = 0.5$ имеем $e_0 = 0.237187$, а в

первом приближении $e_0^{(1)} = a/2 = 0.025$, так что относительная

ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = -5\%$, а во втором приближении

$e_0^{(1,2)} = e_0^{(1)} + e_0^{(2)} = 0.237149$, так что относительная ошибка

$\delta_0^{(2)} = 0.02\%$. При $a = 1$ имеем $e_0 = 0.449202$, а в первом

приближении $e_0^{(1)} = a/2 = 0.5$, так что относительная ошибка

составляет $\delta_0^{(1)} = -11\%$, а во втором приближении

$e_0^{(1,2)} = e_0^{(1)} + e_0^{(2)} = 0.448596$, так что относительная ошибка

$\delta_0^{(2)} = 0.13\%$. Наконец, при $a = 4$ имеем $e_0 = 1.293910$, а в

первом приближении $e_0^{(1)} = a/2 = 2$, так что относительная

ошибка составляет $\delta_0^{(1)} = -55\%$, а во втором приближении

$e_0^{(1,2)} = e_0^{(1)} + e_0^{(2)} = 1.17753$, так что относительная ошибка $\delta_0^{(2)} = 9\%$.

Переходим к расчету энергетических щелей. При $a = 0.1$ первая щель $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.0636604$, а по теории возмущений

$$\delta e_1^{(1)} = 2w(1) = \frac{2a}{\pi} = 0.0636620 \quad \text{с относительной ошибкой}$$

$\delta^{(1)} = -0.003\%$. При $a = 0.5$ первая щель $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.318108$,

а по теории возмущений $\delta e_1^{(1)} = 2w(1) = \frac{2a}{\pi} = 0.318310$ с

относительной ошибкой $\delta^{(1)} = -0.06\%$. При $a = 1$ первая щель

$\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.635005$, а по теории возмущений

$$\delta e_1^{(1)} = 2w(1) = \frac{2a}{\pi} = 0.636620 \quad \text{с относительной ошибкой}$$

$\delta^{(1)} = -0.25\%$. При $a = 4$ первая щель $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 2.44488$, а по

теории возмущений $\delta e_1^{(1)} = 2w(1) = \frac{2a}{\pi} = 2.546479$ с

относительной ошибкой $\delta^{(1)} = -4\%$.

Поучительно сопоставить результаты, полученные для зонных структур в модели Кронига-Пенни, с тем, что наблюдалось в модели синусоидального потенциала.

Модель с параболическими ямами

Далее рассмотрим примеры периодических потенциалов с ячейками-ямами параболической формы. Вначале изучим зоны в случае, когда квадратичный потенциал располагается в ячейке симметрично (см. рис. 1-8):

$$u(z) = \alpha z^2, \quad |z| \leq \frac{d}{2}. \quad (1.32)$$

Волновые функции стационарных состояний в такой ячейке можно выразить через функции параболического цилиндра следующим образом:

$$\psi(z) = C_1 D_{e/a^{1/2}/2-1/2}(\sqrt{2\sqrt{a}}z) + C_2 D_{e/a^{1/2}/2-1/2}(-\sqrt{2\sqrt{a}}z). \quad (1.33)$$

В силу четности $u(-z) = u(z)$ этого потенциала граничные условия при расчете уровней энергии, обрамляющих зоны, можно выбрать такими:

для дна нулевой зоны $\psi'_0(0) = 0, \quad \psi'_0\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.34)$

для потолка нулевой зоны $\psi'_1(0) = 0, \quad \psi'_1\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.35)$

для дна первой зоны $\psi_2(0) = 0, \quad \psi'_2\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.36)$

для потолка первой зоны $\psi_3(0) = 0, \quad \psi_3\left(\frac{d}{2}\right) = 0 \quad (1.37)$

и т. д.

Отсюда вытекают уравнения для искомым крайних уровней в зонах. Для дна e_0 нулевой зоны

$$D'_{\frac{e_0}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(\sqrt{2\sqrt{a}d}/2) = D'_{\frac{e_0}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(-\sqrt{2\sqrt{a}d}/2), \quad (1.38)$$

для потолка e_1 нулевой зоны

$$D_{\frac{e_1}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(\sqrt{2\sqrt{a}d}/2) = D_{\frac{e_1}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(-\sqrt{2\sqrt{a}d}/2), \quad (1.39)$$

для дна e_2 первой зоны

$$D'_{\frac{e_2}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(\sqrt{2\sqrt{a}d}/2) = -D'_{\frac{e_2}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(-\sqrt{2\sqrt{a}d}/2), \quad (1.40)$$

для потолка e_3 первой зоны

$$D_{\frac{e_3}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(\sqrt{2\sqrt{a}d}/2) = -D_{\frac{e_3}{2\sqrt{a}} - \frac{1}{2}}(-\sqrt{2\sqrt{a}d}/2). \quad (1.41)$$

Для следующих зон все повторяется.

Численное решение этих характеристических уравнений дает граничные уровни энергетических зон рассматриваемого периодического потенциала.

Для оценки эффективности приближенных расчетов мы отобрали некоторые значения граничных уровней в зонах для

характерных величин параметра $a(0.1, 0.5, 1.0, 4.0, 10)$, которые сведены в таблицу.

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.08098	1.03207	1.13174	4.06958	4.09572	9.07672
0.5	0.38040	1.15692	1.64839	4.34457	4.49729	9.38421
1.0	0.70410	1.30574	2.27018	4.68096	5.03639	9.76944
4.0	1.91913	2.06490	5.40925	6.53910	8.65610	12.0688
10	3.15342	3.16982	9.36222	9.58642	15.1187	16.3827

Вначале рассмотрим случай слабого поля $a = 0.1$. Согласно результатам теории возмущений положение дна нулевой зоны в первом приближении определяется средним значением потенциала ячейки, так что

$$e_0^{(1)} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = \frac{ad^2}{12} = 0.082247. \quad (1.42)$$

Сравнение с точным результатом из таблицы $e_0 = 0.080982$ показывает, что относительная ошибка $\delta^{(1)} = -2\%$. Уточнение дает второе приближение теории возмущений, где поправка выражается через гармоники потенциала:

$$de_0^{(1)} = -\frac{d^2}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|u(l)|^2}{l^2}, \quad (1.43)$$

которые для данной модели имеют вид

$$u(l) = \frac{ad^2}{2\pi^2} \frac{(-1)^l}{l^2}, \quad (1.44)$$

так что

$$de_0^{(1)} = -\frac{a^2 d^6}{8\pi^6} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^6} = -\frac{a^2 d^6}{7560} = -0.00127168. \quad (1.45)$$

Суммарно получаем

$$e_0^{(1)} + de_0^{(1)} = 0.0809750 \quad (1.46)$$

с относительной ошибкой $\delta^{(2)} = 0.01\%$.

Далее перейдем к случаю менее слабого поля $a = 0.5$. Повторяя предыдущие расчеты, для дна нулевой зоны в первом приближении получаем

$$e_0^{(1)} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = \frac{ad^2}{12} = 0.411234. \quad (1.47)$$

Сравнение с точным результатом из таблицы $e_0 = 0.380402$ показывает увеличение относительной ошибки, которая на сей раз равна $\delta^{(1)} = -8\%$. Поправка второго приближения теории возмущений

$$de_0^{(1)} = -\frac{a^2 d^6}{8\pi^6} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^6} = -\frac{a^2 d^6}{7560} = -0.031792. \quad (1.48)$$

Суммарно получаем

$$e_0^{(1)} + de_0^{(1)} = 0.379442 \quad (1.49)$$

с относительной ошибкой $\delta^{(2)} = 0.3\%$.

Наконец, даже в случае промежуточного значения параметра $a = 1$, повторяя аналогичные расчеты, получаем результаты с относительными ошибками соответственно $\delta^{(1)} = -17\%$ и $\delta^{(2)} = 1.3\%$.

Разумеется, в случае достаточно большого значения параметра $a = 4$ ожидать удовлетворительных результатов от применяемых формул теории возмущений не следует.

На очереди оценка аппроксимаций теории возмущений для щелей. При $a = 0.1$ первая щель равна $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.099671$, а по теории возмущений она определяется первой гармоникой потенциала: $\delta e_1^{(1)} = 2|u(1)| = 2 \frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.1$. Таким образом, относительная ошибка равна $\delta = -0.3\%$. Вторая щель равна $\delta e_2 = e_4 - e_3 = 0.026144$, а по теории возмущений $\delta e_2^{(1)} = 2|u(2)| = 2 \frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.025$, так что относительная ошибка составляет $\delta = 4\%$.

При $a = 0.5$ первая щель равна $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.49147$, а по теории возмущений она определяется первой гармоникой потенциала: $\delta e_1^{(1)} = 2|u(1)| = 2 \frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.5$. Таким образом,

относительная ошибка равна $\delta = -2\%$. Вторая щель равна $\delta e_2 = e_4 - e_3 = 0.15272$, а по теории возмущений $\delta e_2^{(1)} = 2|u(2)| = 2\frac{ad^2}{8\pi^2} = 0.125$, так что относительная ошибка составляет $\delta = 18\%$.

Таким образом, расчеты по теории возмущений обеспечивают хорошую точность не только для очень слабых полей с параметром $a \ll 1$, но и в случае полей с промежуточными значениями этого параметра $a \sim 1$.

Для сильных полей с $a \gg 1$ целесообразно обратиться к квазиклассическим формулам. Так, ширина зоны согласно формуле (1.15) при малых коэффициентах прозрачности T барьеров, разделяющих ямки, определяется выражением

$$\Delta e^q = \frac{2}{\pi} \omega \sqrt{T}, \quad (1.50)$$

в котором ω – частота классических колебаний в ямке ячейки потенциала. Величины T и ω берутся для среднего значения энергии в зоне по формулам (1.16) и (1.17).

В случае $a = 4$ основная щель имеет ширину $\Delta e_0 = e_1 - e_0 = 0.14577$, а в соответствии с формулой (1.50) вычисление дает $\Delta e_0^q = 0.12992$, так что относительная ошибка составляет $\delta_0 = 10.9\%$. Для первой щели соответствующие

величины равны $\Delta e_1 = e_3 - e_2 = 1.12985$ и $\Delta e_1^q = 1.07272$, а относительная ошибка $\delta_1 = 5.1\%$. Вторая щель расположена в критической области, частично за пределами ячеечной ямки, так что обычный расчет применять нельзя.

В случае $a = 10$ основная щель имеет ширину $\Delta e_0 = e_1 - e_0 = 0.0164$, а в соответствии с формулой (1.50) вычисление дает $\Delta e_0^q = 0.0149$, так что относительная ошибка составляет $\delta_0 = 9.1\%$. Для первой щели соответствующие величины равны $\Delta e_1 = e_3 - e_2 = 0.2242$ и $\Delta e_1^q = 0.2099$, а относительная ошибка $\delta_1 = 6.4\%$. Для второй щели соответствующие величины равны $\Delta e_2 = e_5 - e_4 = 1.264$ и $\Delta e_2^q = 1.195$, а относительная ошибка $\delta_2 = 5.4\%$.

Таким образом, квазиклассические формулы обеспечивают достаточно высокую точность для данной модели при указанных параметрах периодического потенциала.

Следует еще раз заметить, что все промежуточные численные расчеты ведутся с большой точностью. В таблицах же, помещенных в тексте, мы приводим приближенные значения величин, обычно ограничиваясь шестью знаками.

На рисунках 18-21 представлены типичные зонные характеристики данной периодической модели.

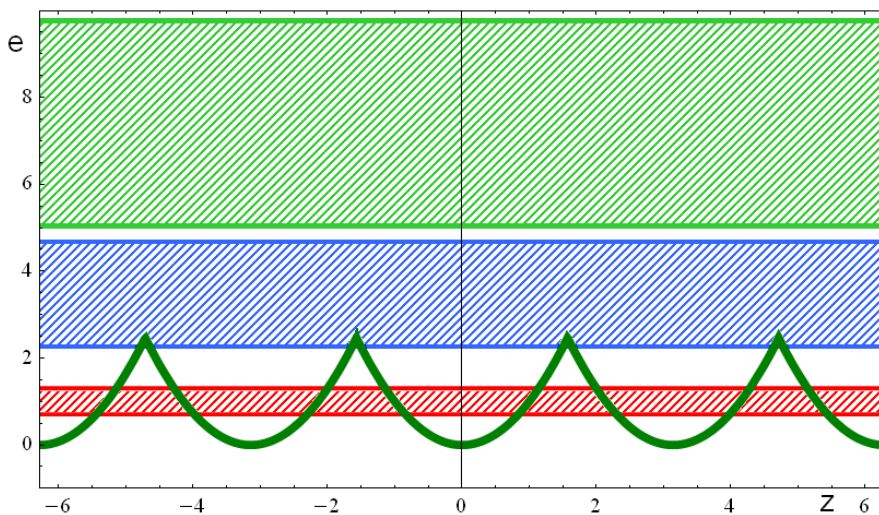
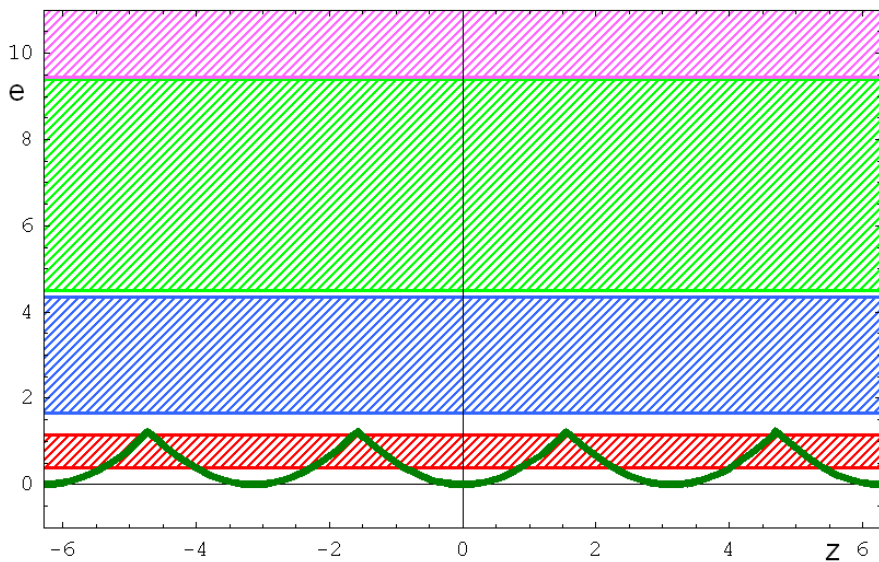


Рис.18. Периодический параболический потенциал и зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

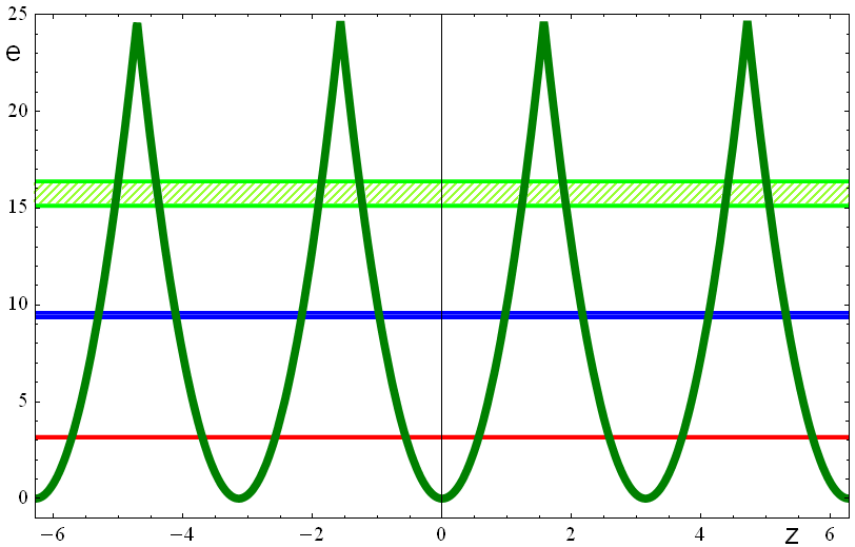
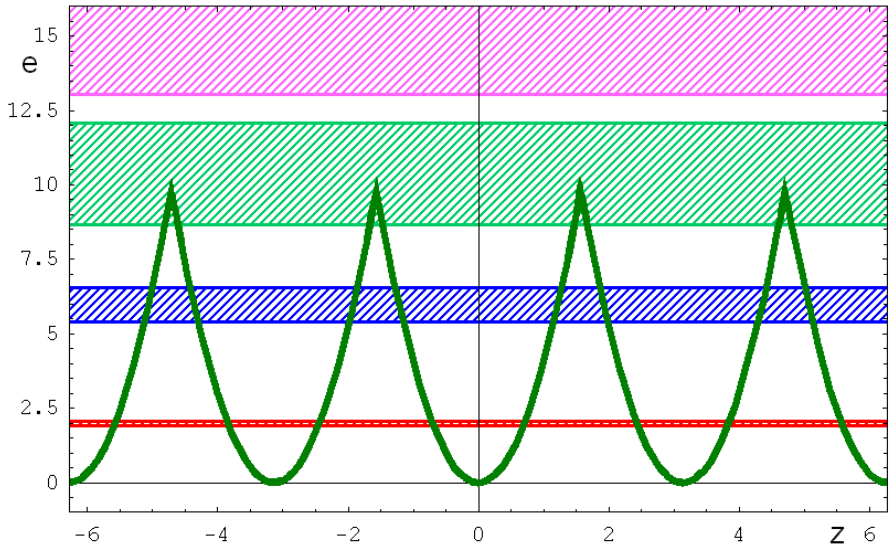


Рис.19. Периодический параболический потенциал и зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

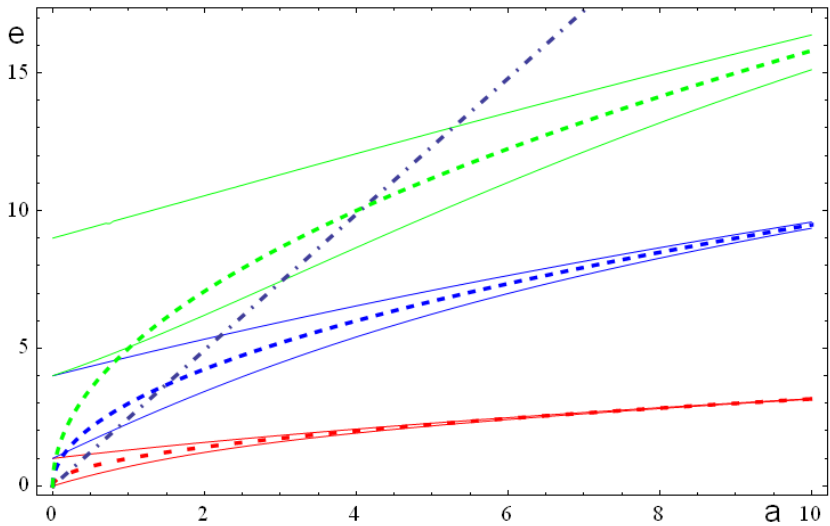
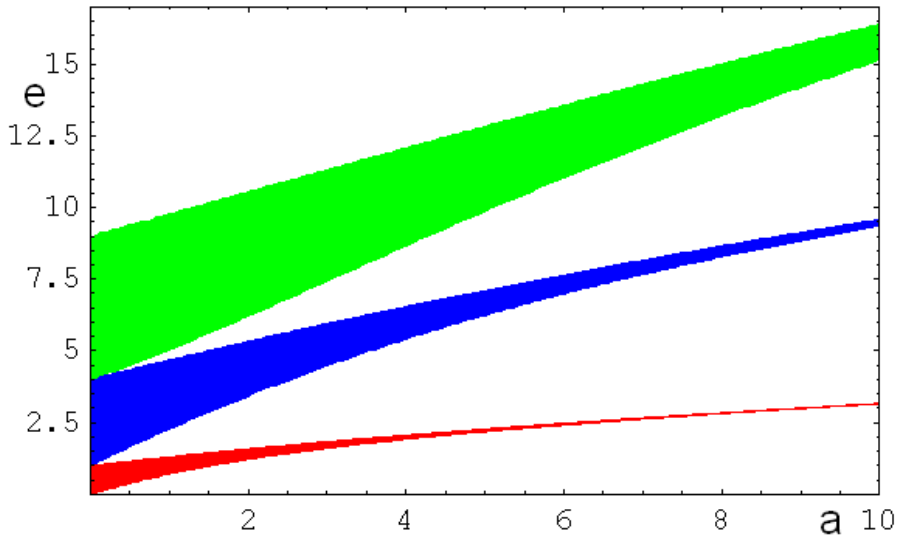


Рис.20. Периодический параболический потенциал и зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 10$. Вверху зоны закрашены, внизу изображены сплошными линиями границы зон и штриховыми – уровни энергии изолированных ячеек, а штрих-пунктирной линией показаны максимумы потенциала.

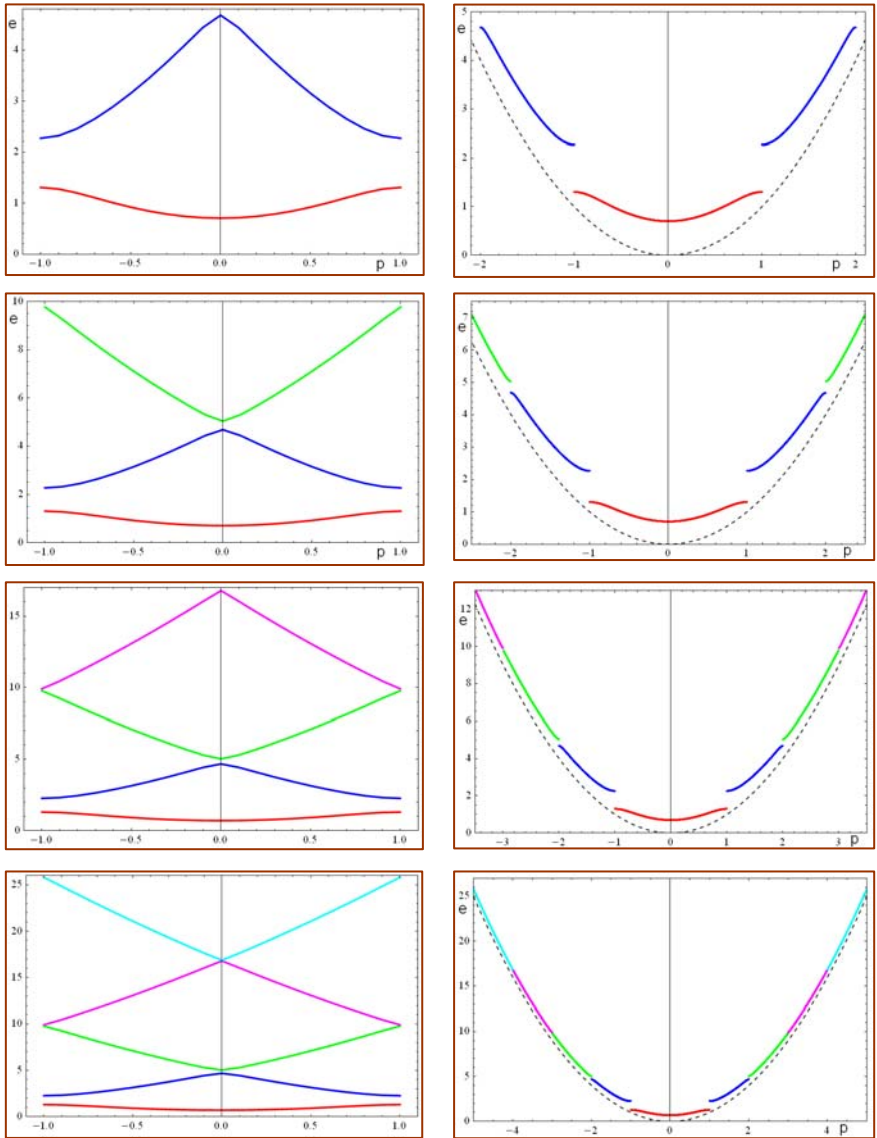


Рис.21. Закон дисперсии для зон периодического потенциала с параболической ячейкой и параметром $a = 1$ (квазиимпульс в единицах π/d). Слева – схема приведенных зон, справа – схема расширенных зон.

Модель с параболическими барьерами

Теперь рассмотрим периодический потенциал с ячейками-барьерами параболической формы (см. рис. 1-7):

$$u(z) = a \frac{d^2}{4} - az^2, |z| \leq \frac{d}{2}. \quad (1.51)$$

Волновые функции стационарных состояний в такой ячейке можно выразить через функции параболического цилиндра следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi(z) = & c_1 D_{-i(e-ad^2/4)/a^{1/2}/2-1/2} \left[(1+i)a^{1/4}z \right] + \\ & + c_2 D_{-i(e-ad^2/4)/a^{1/2}/2-1/2} \left[-(1+i)a^{1/4}z \right]. \quad (1.52) \end{aligned}$$

В силу четности $u(-z) = u(z)$ этого потенциала граничные условия при расчете уровней энергии, обрамляющих зоны, можно выбрать такими:

для дна нулевой зоны $\psi'_0(0) = 0, \quad \psi'_0\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.53)$

для потолка нулевой зоны $\psi'_1(0) = 0, \quad \psi'_1\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.54)$

для дна первой зоны $\psi_2(0) = 0, \quad \psi'_2\left(\frac{d}{2}\right) = 0; \quad (1.55)$

для потолка первой зоны $\psi_3(0) = 0, \quad \psi_3\left(\frac{d}{2}\right) = 0 \quad (1.56)$

и т. д.

Численное решение этих характеристических уравнений дает граничные уровни энергетических зон рассматриваемого периодического потенциала.

Для оценки эффективности приближенных расчетов отобраны значения граничных уровней энергии в трех зонах для характерных величин параметра $a(0.1, 0.5, 1.0, 4.0, 10)$, которые сведены в таблицу

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.16322	1.11399	1.21431	4.15298	4.17683	9.15924
0.5	0.79010	1.56013	2.06788	4.78522	4.88075	9.80210
1.0	1.51492	2.09669	3.12598	5.62179	5.75294	10.6180
4.0	4.81629	4.91462	9.21390	10.7991	11.4178	15.7186
10	9.31164	9.31637	19.5528	19.9155	23.8397	26.2135

Начинаем со случая слабого поля $a = 0.1$. Согласно результатам теории возмущений положение дна нулевой зоны в первом приближении определяется средним значением потенциала ячейки, так что

$$e_0^{(1)} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = \frac{ad^2}{6} = 0.164493. \quad (1.57)$$

Сравнение с точным результатом из таблицы $e_0 = 0.163216$ показывает, что относительная ошибка $\delta^{(1)} = -1\%$. Уточнение

дает второе приближение теории возмущений, где поправка выражается через гармоники потенциала:

$$de_0^{(1)} = -\frac{d^2}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{|u(l)|^2}{l^2}, \quad (1.58)$$

которые для данной модели имеют вид

$$u(l) = -\frac{ad^2}{2\pi^2} \frac{(-1)^l}{l^2}, \quad (1.59)$$

так что

$$de_0^{(1)} = -\frac{a^2 d^6}{8\pi^6} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^6} = -\frac{a^2 d^6}{7560} = -0.00127168. \quad (1.60)$$

Суммарно получаем

$$e_0^{(1)} + de_0^{(1)} = 0.163222 \quad (1.61)$$

с относительной ошибкой $\delta^{(2)} = -0.002\%$.

Далее перейдем к случаю менее слабого поля $a = 0.5$. Повторяя предыдущие расчеты, для дна нулевой зоны в первом приближении получаем

$$e_0^{(1)} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = \frac{ad^2}{6} = 0.822467. \quad (1.62)$$

Сравнение с точным результатом из таблицы $e_0 = 0.790100$ показывает увеличение относительной ошибки, которая на сей раз равна $\delta^{(1)} = -4\%$. Поправка второго приближения теории возмущений

$$de_0^{(1)} = -\frac{a^2 d^6}{8\pi^6} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^6} = -\frac{a^2 d^6}{7560} = -0.031792. \quad (1.63)$$

Суммарно получаем

$$e_0^{(1)} + de_0^{(1)} = 0.790675 \quad (1.64)$$

с относительной ошибкой $\delta^{(2)} = -0.1\%$.

Наконец, даже в случае промежуточного значения параметра $a = 1$, повторяя аналогичные расчеты, получаем результаты с относительными ошибками соответственно $\delta^{(1)} = -17\%$ и $\delta^{(2)} = 1.3\%$.

Разумеется, в случае достаточно большого значения параметра $a = 4$ ожидать удовлетворительных результатов от применяемых формул теории возмущений не следует.

На очереди оценка аппроксимаций теории возмущений для щелей. При $a = 0.1$ первая щель равна $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.099671$, а по теории возмущений она определяется первой гармоникой потенциала: $\delta e_1^{(1)} = 2|u(1)| = 2\frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.1$. Таким образом, относительная ошибка равна $\delta = -0.3\%$. Вторая щель равна $\delta e_2 = e_4 - e_3 = 0.026144$, а по теории возмущений

$\delta e_2^{(1)} = 2|u(2)| = 2 \frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.025$, так что относительная ошибка составляет $\delta = 4\%$.

При $a = 0.5$ первая щель равна $\delta e_1 = e_2 - e_1 = 0.49147$, а по теории возмущений она определяется первой гармоникой

потенциала: $\delta e_1^{(1)} = 2|u(1)| = 2 \frac{ad^2}{2\pi^2} = 0.5$. Таким образом,

относительная ошибка равна $\delta = -2\%$. Вторая щель равна $\delta e_2 = e_4 - e_3 = 0.15272$, а по теории возмущений

$\delta e_2^{(1)} = 2|u(2)| = 2 \frac{ad^2}{8\pi^2} = 0.125$, так что относительная ошибка составляет $\delta = 18\%$.

Таким образом, расчеты по теории возмущений обеспечивают хорошую точность не только для очень слабых полей с параметром $a \ll 1$, но и в случае полей с промежуточными значениями этого параметра $a \sim 1$.

Для сильных полей с $a \gg 1$ целесообразно обратиться к квазиклассическим формулам. Так, ширина зоны определяется выражением

$$\Delta e = \frac{2}{\pi} \omega \sqrt{T}, \quad (1.65)$$

в котором ω – частота классических колебаний в ямке ячейки потенциала, а T – коэффициент прозрачности барьера,

разделяющего ямки (обе величины берутся для среднего значения энергии в зоне).

Оставим, однако, оценки ширин низколежащих зон читателю, а обратимся к расчету зон, попадающих в критическое положение, на основе формулы (1.15).

При этом коэффициент прозрачности при критической энергии для квадратичных вершин барьеров данной модели равен $T_c = 1/2$, а классическая частота колебаний в ямке между барьерами переходит в квантовую (подробности см. в [7]), так что для ширины критической зоны получаем формулу

$$\Delta e_c = \frac{2}{\pi} \omega_{кв} \arcsin(\sqrt{T_c}) = \frac{4}{\tau_{кв}} \arcsin\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = \frac{\pi}{\tau_{кв}}, \quad (1.66)$$

в которой квантовый период колебаний определяется [7] выражением

$$\tau_{кв} = \frac{2}{\sqrt{a}} \left(\ln Z + \frac{3}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} C \right), \quad (1.67)$$

где $Z = \frac{d}{2} a^{1/4} = \frac{\pi}{2} a^{1/4}$, а $C = 0.577216$ – постоянная Эйлера.

Окончательно для ширины критической зоны имеем расчетную формулу

$$\Delta e_c = \frac{\pi\sqrt{a}}{\frac{1}{2}\ln a + \ln(2\pi^2) + C}. \quad (1.68)$$

В случае $a = 4.1988$ (см. рис. 25 сверху) критической оказывается первая зона, ширина которой равна $\Delta e_1 = e_3 - e_2 = 1.52364$. Формула (1.68) дает значение $\Delta e_c = 1.50505$, так что относительная ошибка равна $\delta = 1.2\%$. Заметим, что расчет для основной зоны по формуле (1.65) приводит к ошибке 8.4%.

В случае $a = 10.59245$ (см. рис. 25 внизу) критической оказывается вторая зона, ширина которой равна $\Delta e_2 = e_5 - e_4 = 2.20422$. Формула (1.68) дает значение $\Delta e_c = 2.15715$, так что относительная ошибка составляет $\delta = 2.1\%$. Расчет по формуле (1.65) для основной зоны приводит к ошибке 9.3%, а для первой зоны – к ошибке -3.6%.

На рисунках 22-25 представлены типичные зонные характеристики данной периодической модели.

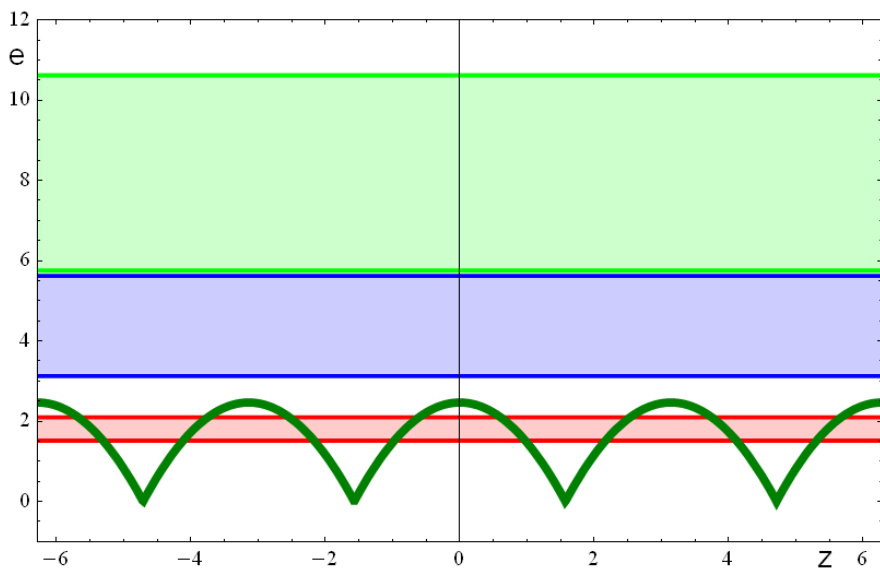
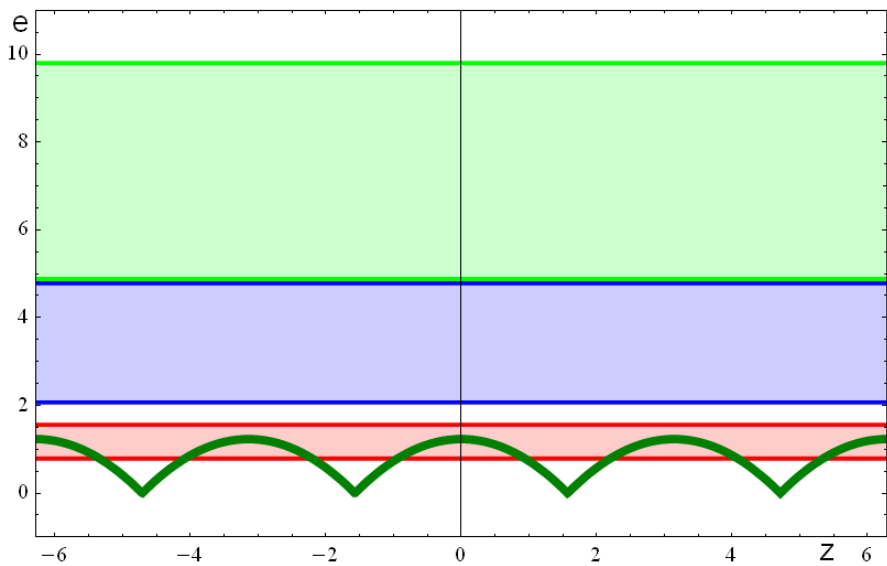


Рис.22. Потенциал с параболическими барьерами и зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

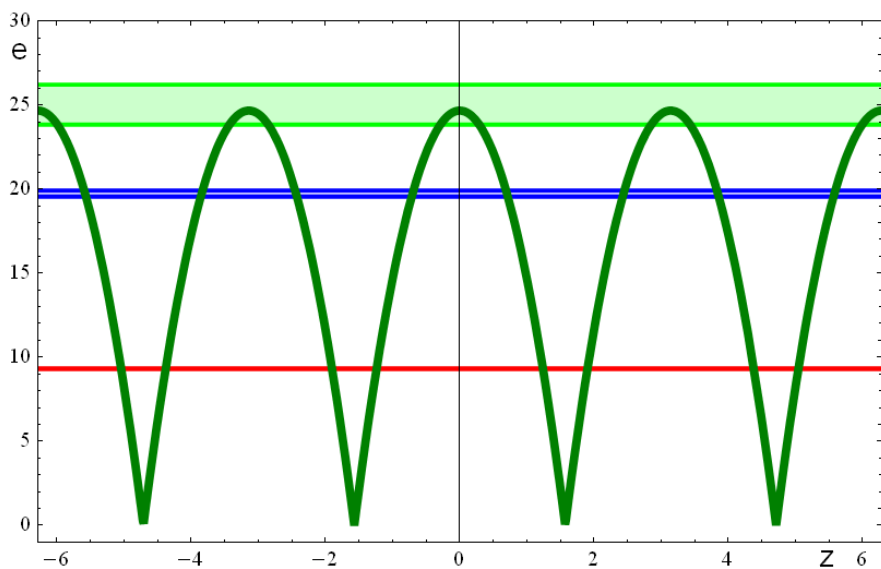
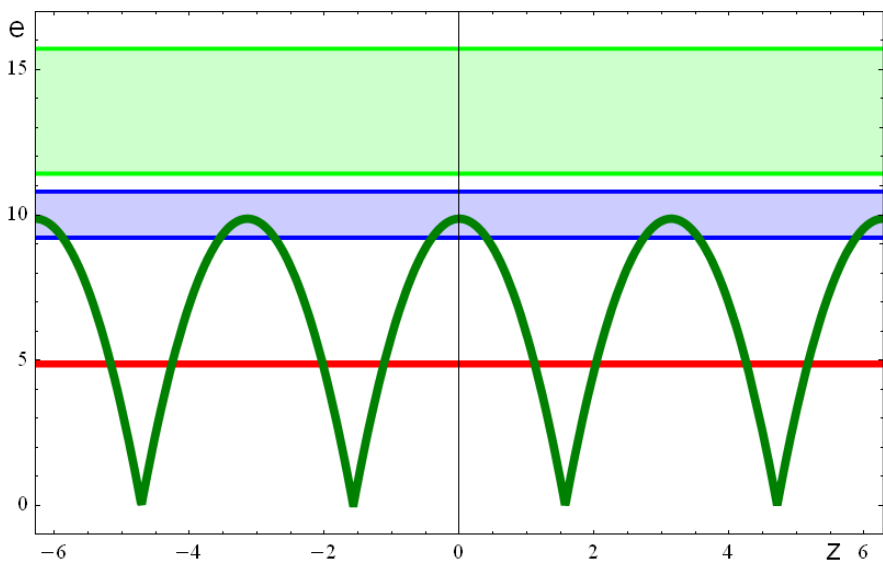


Рис.23. Потенциал с параболическими барьерами и зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

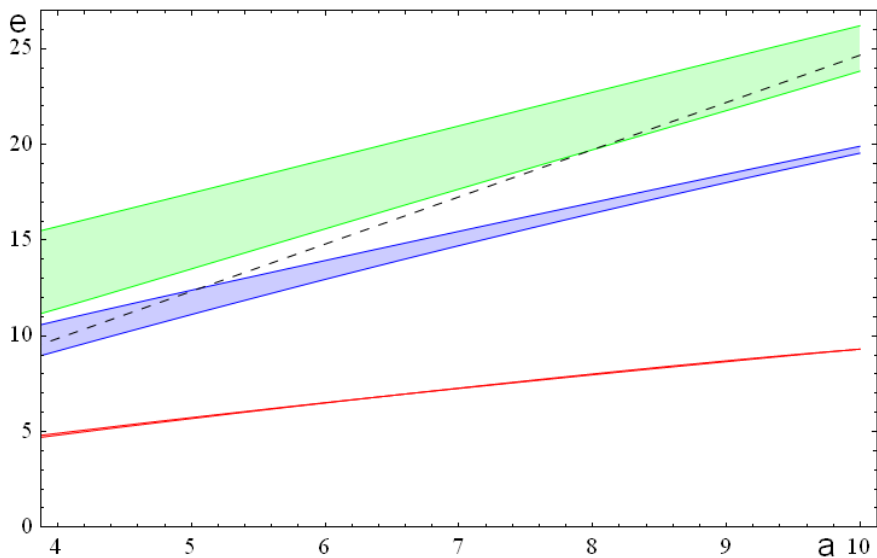
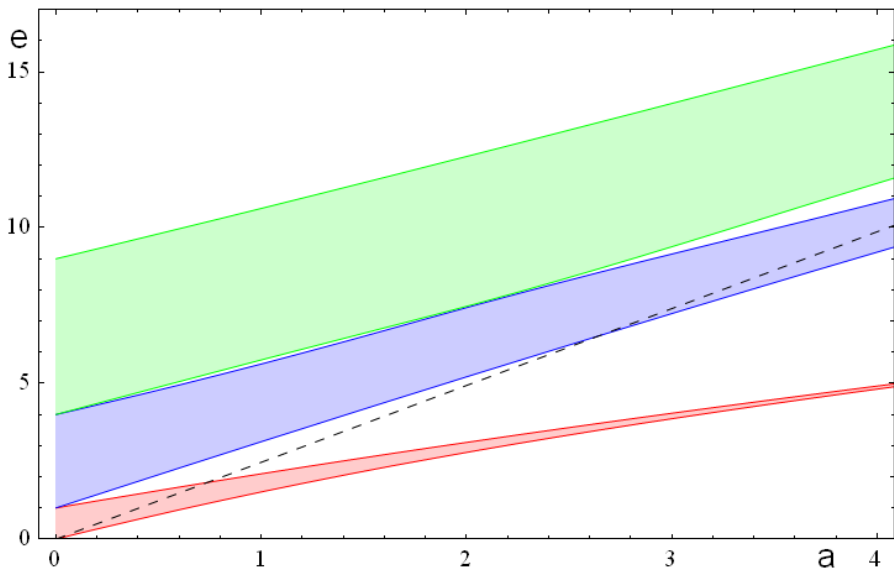


Рис.24. Потенциал с параболическими барьерами и зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 4$ (вверху) и $4 \leq a \leq 10$ (внизу). Штрих-пунктирная линия – максимумы потенциала.

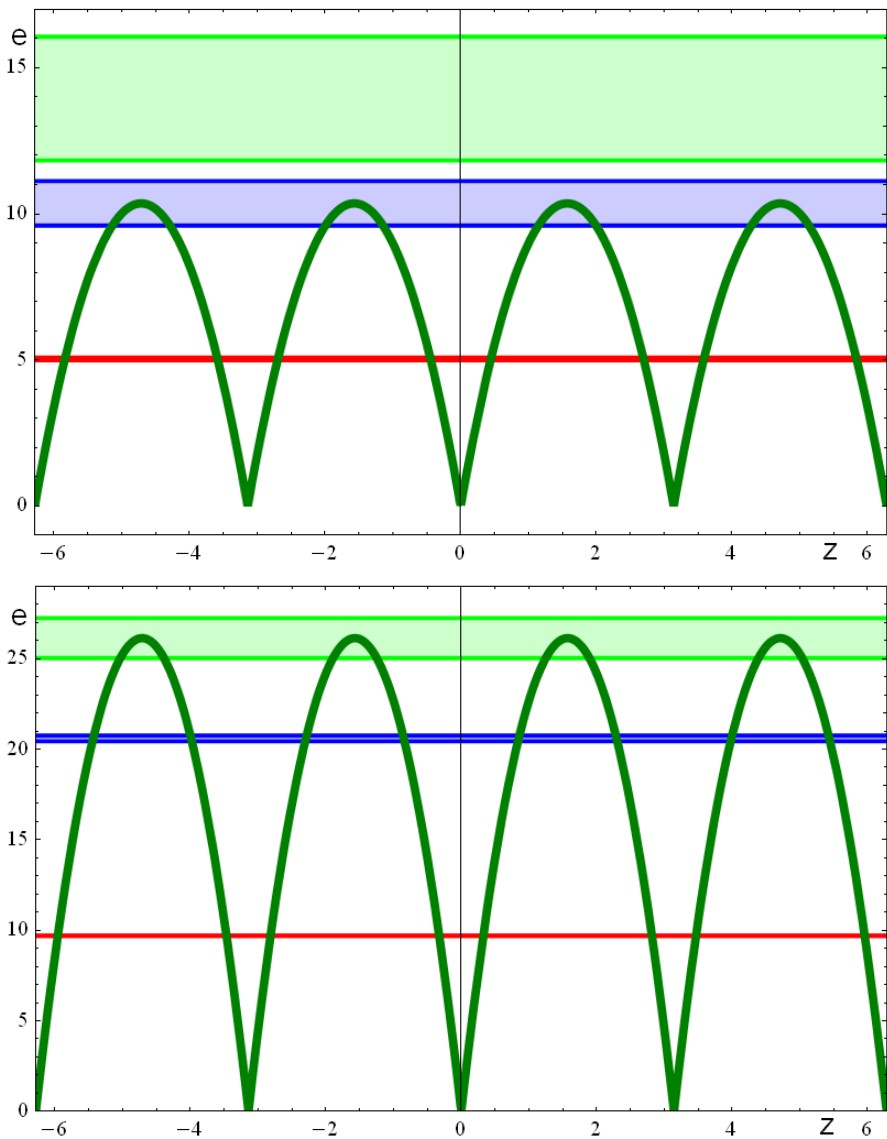


Рис.25. Потенциал с параболическими барьерами и зоны для критических значений параметра $a = 4.1988$ (вверху) и $a = 10.59245$ (внизу).

Модель с линейными барьерами «пила с изломами»

Далее очень кратко обсудим периодический потенциал с ячейками-барьерами линейной формы (см. рис. 1-6):

$$u(z) = a|z|, |z| \leq \frac{d}{2}. \quad (1.69)$$

Волновые функции стационарных состояний в такой ячейке можно выразить через функции Эйри (это оставим читателю).

Численное решение характеристических уравнений дает граничные уровни энергетических зон рассматриваемого периодического потенциала.

Как обычно, для оценки эффективности приближенных расчетов отобраны значения граничных уровней энергии в трех зонах для характерных величин параметра a (0.1, 0.5, 1.0, 4.0, 10), которые сведены в таблицу

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.07803	1.04658	1.11024	4.07847	4.07894	9.07507
0.5	0.38005	1.23041	1.54862	4.39103	4.40271	9.37654
1.0	0.73519	1.45475	2.09055	4.77872	4.82506	9.75595
4.0	2.43318	2.68963	5.18566	7.03522	7.68039	12.0773
10	4.70749	4.74758	10.4663	11.2049	13.9122	32.9227

Начинаем со случая слабого поля $a = 0.1$. Согласно результатам теории возмущений положение дна нулевой зоны в

первом приближении определяется средним значением потенциала ячейки, так что

$$e_0^{(1)} = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} u(z) dz = \frac{ad}{4} = 0.07854. \quad (1.70)$$

Сравнение с результатом из таблицы $e_0 = 0.07803$ показывает, что относительная ошибка $\delta^{(1)} = -0.65\%$. Как и в случае предыдущих моделей, существенное уточнение дает второе приближение теории возмущений, где поправка выражается через гармоники потенциала, в чем предоставляем убедиться читателю. Далее перейдем к случаю менее слабого поля $a = 0.5$. Повторяя предыдущие расчеты, для дна нулевой зоны в первом приближении получаем

$$e_0^{(1)} = \frac{ad}{4} = 0.39270. \quad (1.71)$$

Сравнение с результатом из таблицы $e_0 = 0.38005$ показывает увеличение относительной ошибки, которая на сей раз равна $\delta^{(1)} = -3.2\%$. Наконец, даже в случае промежуточного значения параметра $a = 1$, повторяя аналогичные расчеты, получаем результат с относительной ошибкой $\delta^{(1)} = -6.4\%$.

На этом завершим обсуждение данной модели, предоставив читателю продолжить ее изучение.

На рисунках 26-28 представлены типичные зонные характеристики данной периодической модели.

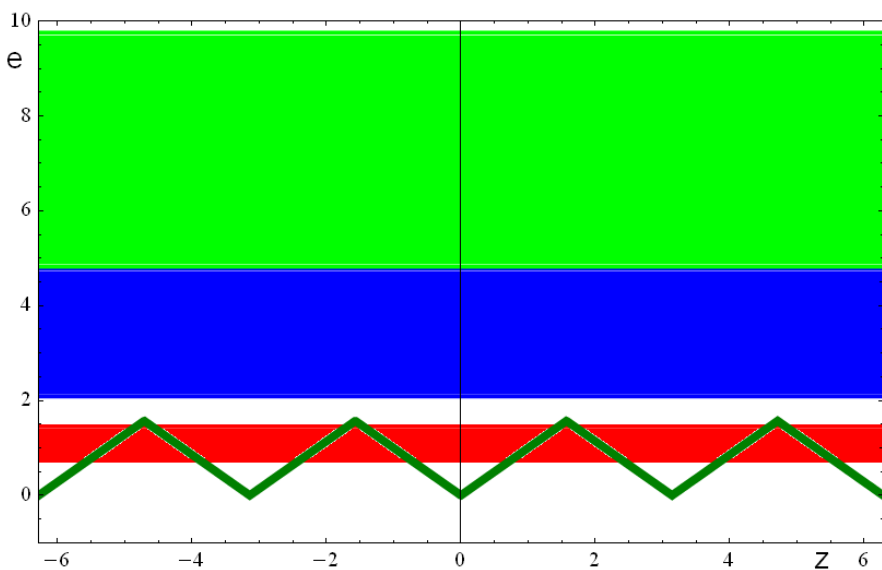
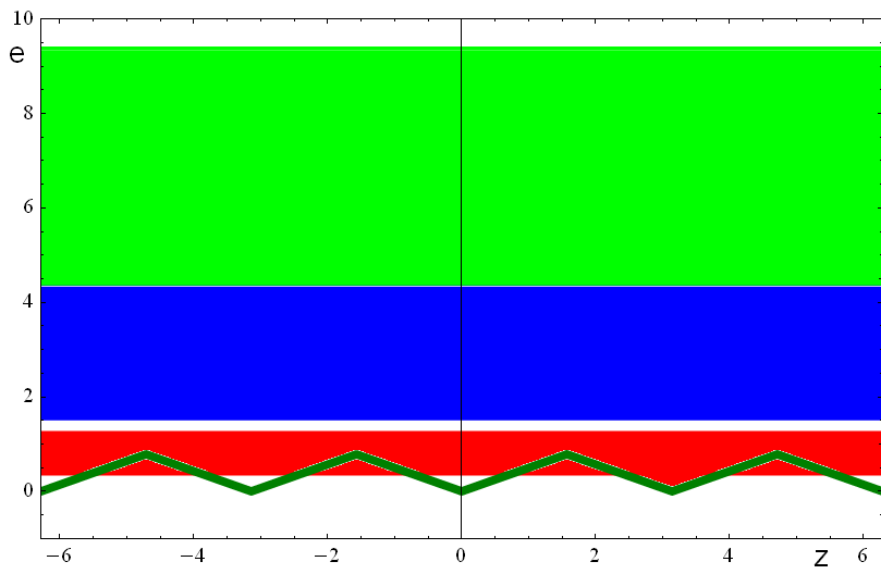


Рис.26. Периодический линейный потенциал и три зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

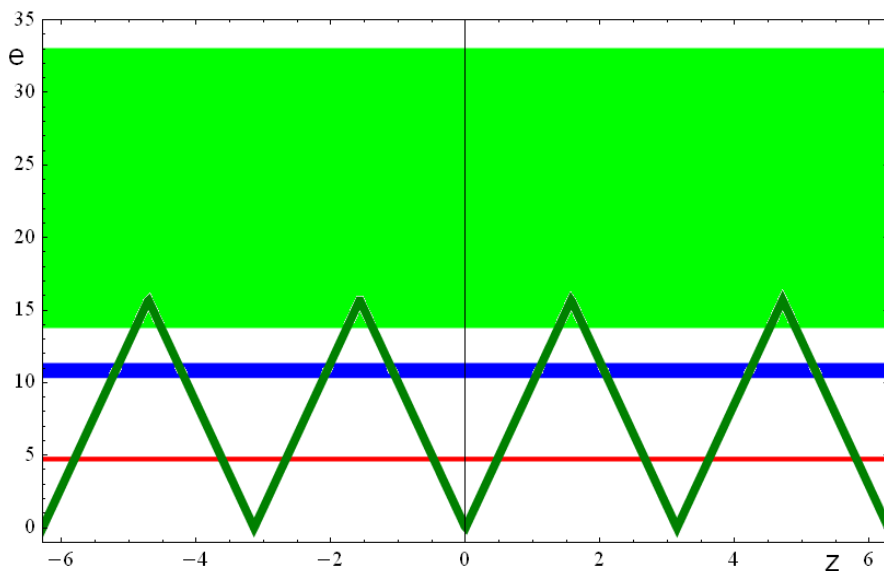
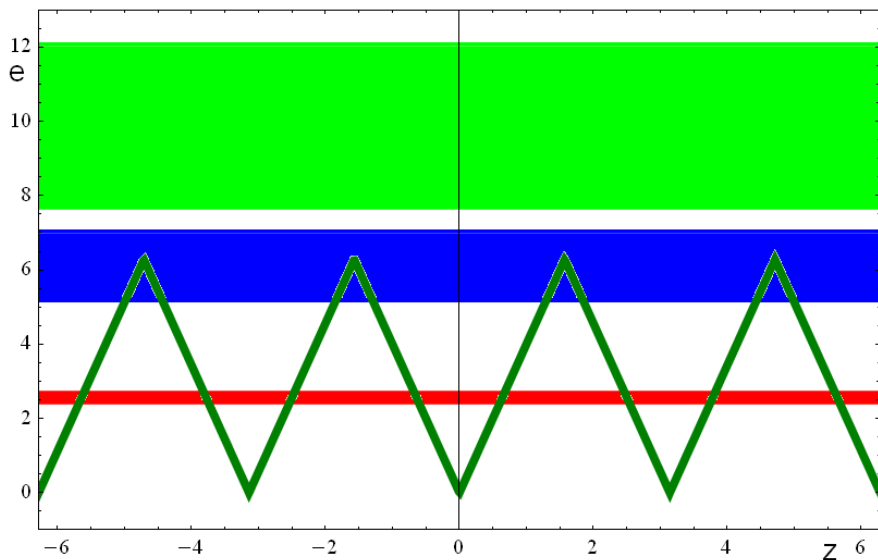


Рис.27. Периодический линейный потенциал и три зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

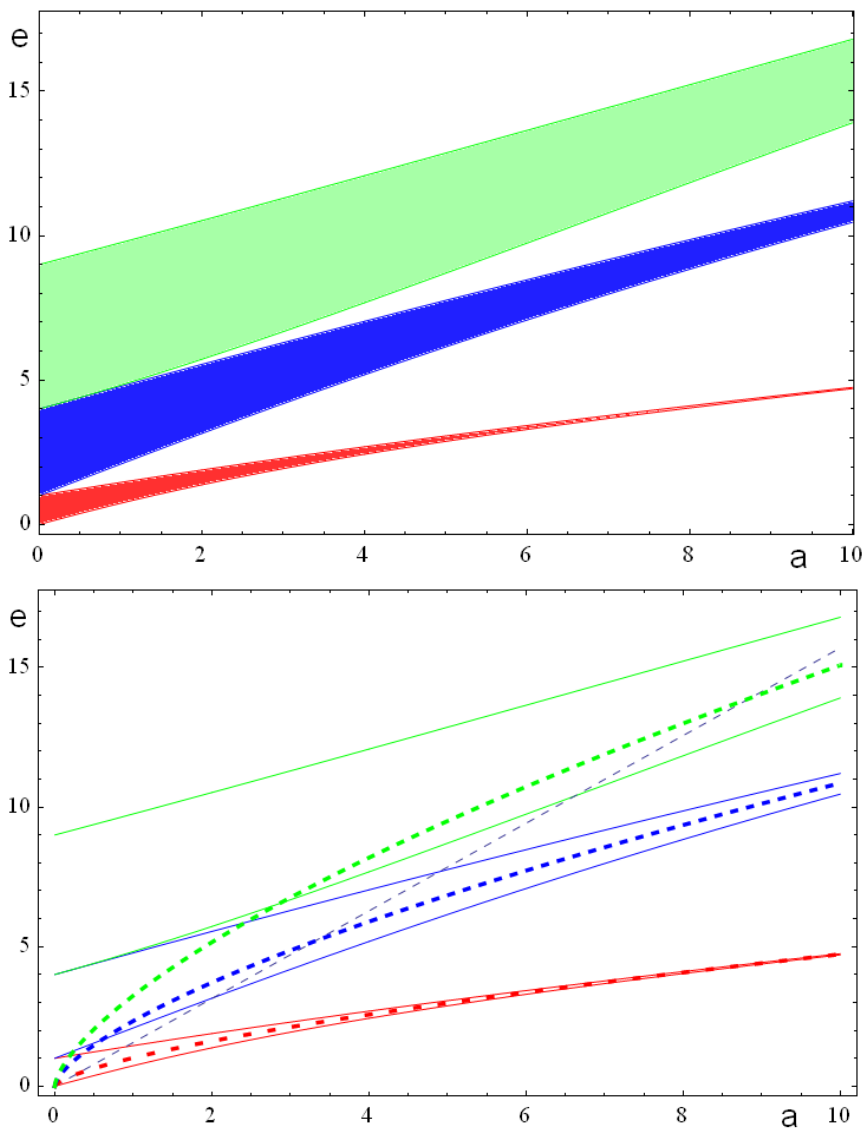


Рис.28. Периодический линейный потенциал и три зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 10$. Вверху зоны закрашены, внизу изображены сплошными линиями границы зон и штриховыми – уровни энергии изолированных ячеек, а штрих-пунктирной линией показаны максимумы потенциала.

Модель «пила с разрывами»

В данном случае имеем в виду линейный потенциал с разрывами и несимметричной ячейкой (см. рис. 2-7)

$$u(z) = a \frac{d}{2} + az, \quad |z| \leq \frac{d}{2}. \quad (1.72)$$

Частными решениями в интервале $-\frac{d}{2} \leq z \leq \frac{d}{2}$ являются функции Эйри (в обозначениях пакета Mathematica [11])

$$\text{AiryAi}\left[\left(z + \frac{d}{2}\right)a^{1/3} - \frac{e}{a^{2/3}}\right]$$

и

$$\text{AiryBi}\left[\left(z + \frac{d}{2}\right)a^{1/3} - \frac{e}{a^{2/3}}\right]. \quad (1.73)$$

На основании общих результатов (1.5)-(1.8) решаем дисперсионное уравнение в случае характерных значений параметра $a = 0.1, 0.5, 1, 4, 10$.

Данные сводим в стандартную таблицу для крайних уровней в трех нижних зонах

a	e0	e1	e2	e3	e4	e5
0.1	0.15573	1.10664	1.20663	4.13243	4.18244	9.14061
0.5	0.75177	1.52456	2.02405	4.66880	4.91969	9.70693
1.0	1.43849	2.02848	3.02444	5.35168	5.85849	10.4233
4.0	4.58767	4.70105	8.47315	9.49985	11.7426	14.8826
10	8.93933	8.94622	16.8402	17.0028	22.8950	23.9967

На рисунках 29-30 приведены картины поведения зон для $a = 0.5$ и $a = 1$, а также $a = 4$ и $a = 10$. Кроме того, на рис.31 показан общий ход трех зон для $0 \leq a \leq 10$. На рисунках 32-33 для некоторых значений a изображен закон дисперсии в трех нижних зонах (в схеме приведенных или расширенных зон). Блоховские функции нулевой зоны для параметра $a = 1$ представлены на рисунках 34-35.

Далее переходим к сопоставлению приближенных расчетов с точными численными.

Положение дна нулевой зоны в первом приближении теории возмущений задает формула (1.15). В нашем случае

$$e_0^{(1)} = a \frac{d}{2}. \quad (1.74)$$

Учитывая, что $d = \pi$, для $a = 0.1$ имеем $e_0^{(1)} = 0.15708$ при точном значении $e_0 = 0.15573$, т. е. относительная ошибка равна $\delta_0^{(1)} = -0.9\%$; для $a = 0.5$ имеем $e_0^{(1)} = 0.785398$ при $e_0 = 0.75177$, так что $\delta_0^{(1)} = -4.5\%$; для $a = 1$ получаем $e_0^{(1)} = 1.5708$ при $e_0 = 1.43849$, т. е. $\delta_0^{(1)} = -9\%$.

Во втором приближении нам потребуются гармоники данного потенциала

$$w(l) = i \frac{(-1)^l ad}{2\pi l}. \quad (1.75)$$

В случае $a = 0.1$ в соответствии с формулой (1.13)

$$e_0^{(2)} = a \frac{d}{2} - \frac{a^2}{8} \left(\frac{d}{\pi} \right)^4 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^4} = 0.155727, \quad (1.76)$$

так что относительная ошибка составляет $\delta_0^{(2)} = 0.0002\%$. В случае $a = 0.5$ аналогичный расчет дает для дна нулевой зоны значение $e_0^{(2)} = 0.751576$ с относительной ошибкой $\delta_0^{(2)} = 0.026\%$. В случае $a = 1$ получаем $e_0^{(2)} = 1.43551$ при относительной ошибке $\delta_0^{(2)} = 0.2\%$. Заметим, что даже при $a = 4$ относительная ошибка равна $\delta_0^{(2)} = 10\%$.

Для s -й щели между $(s-1)$ -й и s -й зонами ($s = 1, 2, \dots$) получаем согласно формуле (1.14)

$$\delta e_s = 2 |w(s)| = \frac{ad}{\pi s} = \frac{a}{s}. \quad (1.77)$$

Опуская детали, приведем лишь относительные ошибки, к которым приводит формула (1.77) для первых пяти щелей:
 если $a = 0.1$, то $\delta = -0.004\%, 0.01\%, 0.003\%, 0.001\%, 0.0005\%$;
 если $a = 0.5$, то $\delta = -0.1\%, 0.35\%, 0.08\%, 0.03\%, 0.01\%$;
 если $a = 1$, то $\delta = -0.4\%, 1\%, 0.3\%, 0.1\%, 0.05\%$;
 если $a = 4$, то $\delta = -6\%, 11\%, 5\%, 2\%, 0.8\%$;
 если $a = 10$, то $\delta = -27\%, 15\%, 19\%, 11\%, 5\%$.

Дальнейшее изучение этой модели, а также зон других периодических потенциалов, представленных на рисунках 1-2, оставляем читателю.

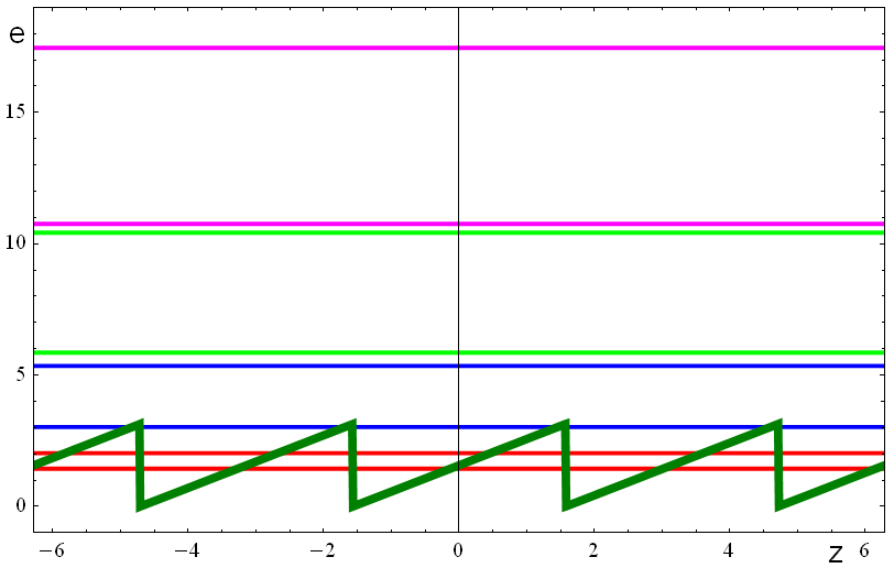
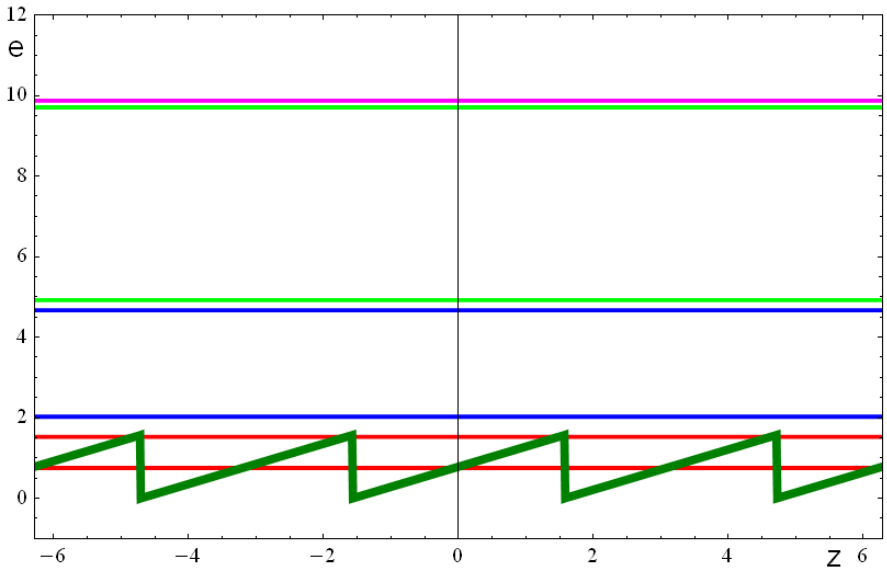


Рис.29. Периодический линейный потенциал «пила с разрывами» и три зоны для значений параметра $a = 0.5$ (вверху) и $a = 1$ (внизу).

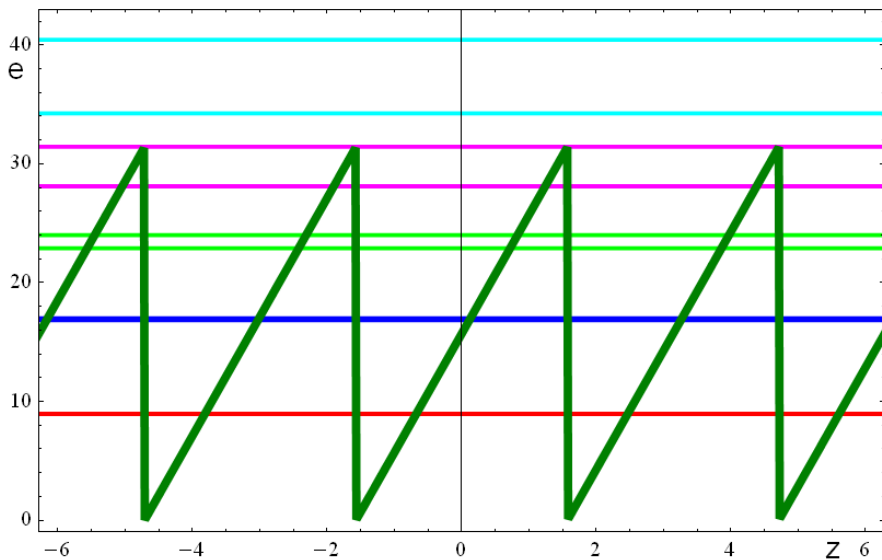
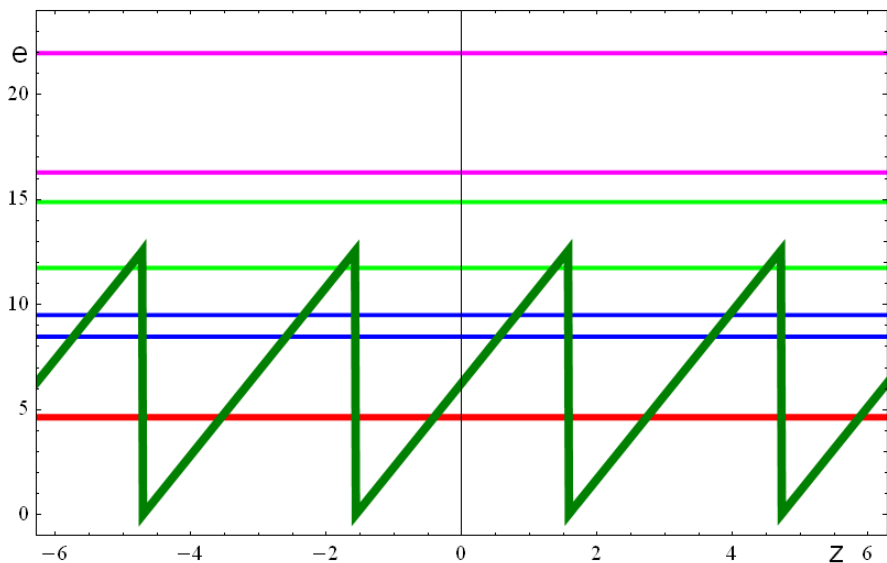


Рис.30. Периодический линейный потенциал «пила с разрывами» и три зоны для значений параметра $a = 4$ (вверху) и $a = 10$ (внизу).

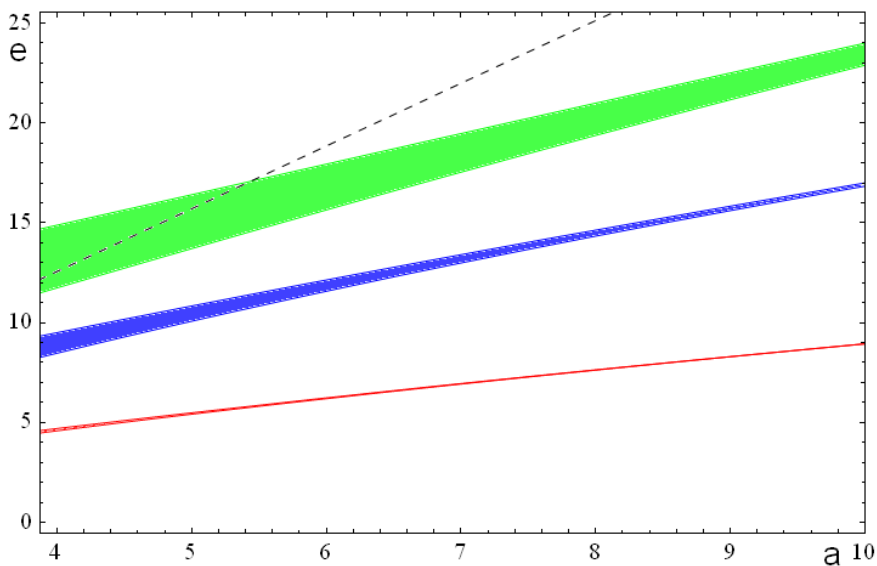
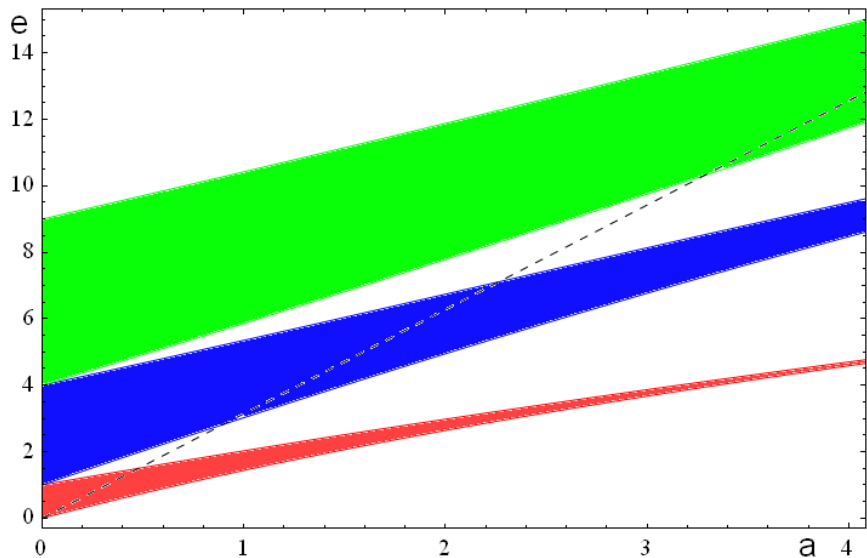


Рис.31. Периодический линейный потенциал «пила с разрывами» и три зоны для значений параметра $0 \leq a \leq 4$ (вверху) и $4 \leq a \leq 10$ (внизу). Штриховая линия соответствует максимуму потенциала.

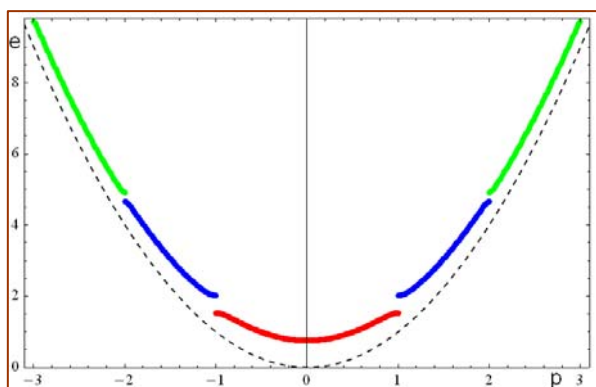
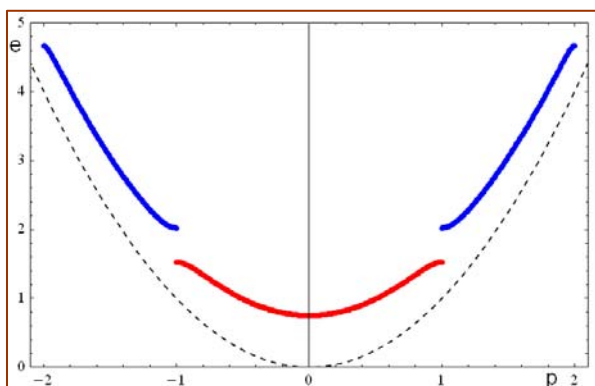
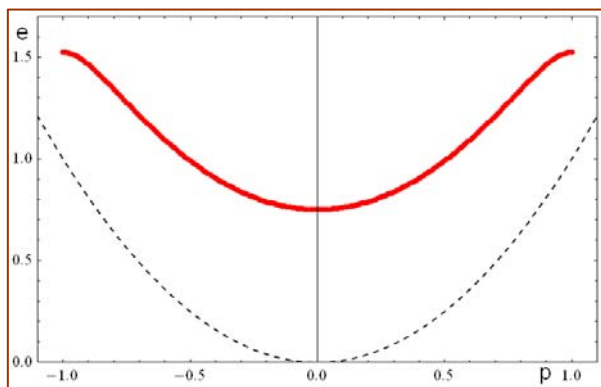


Рис.32. Закон дисперсии трех зонах потенциала «пила с разрывами» в схеме расширенных зон для параметра $a = 0.5$.

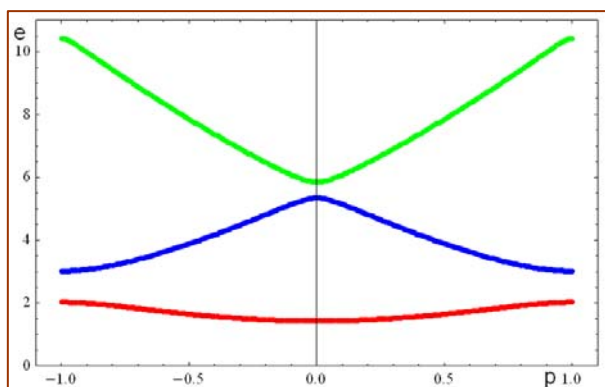
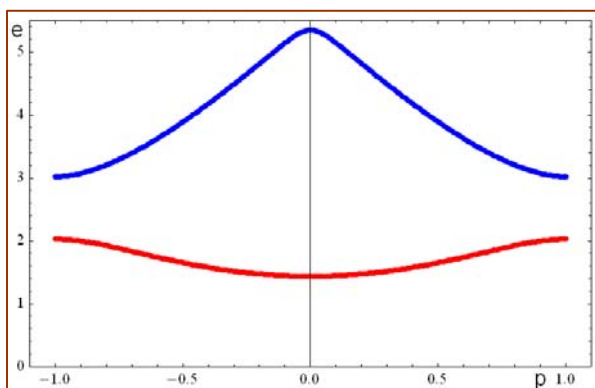
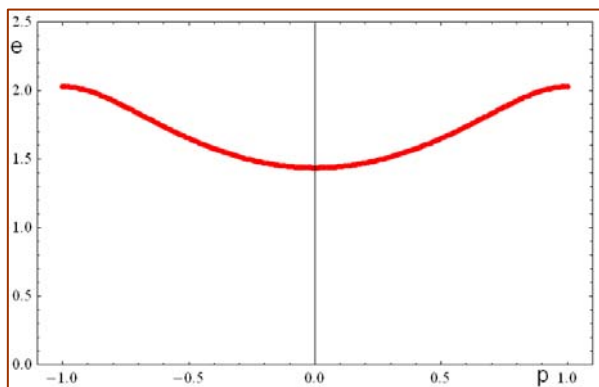


Рис.33. Закон дисперсии четырех зонах потенциала «пила с разрывами» для параметра $a = 1$ (схема приведенных зон).

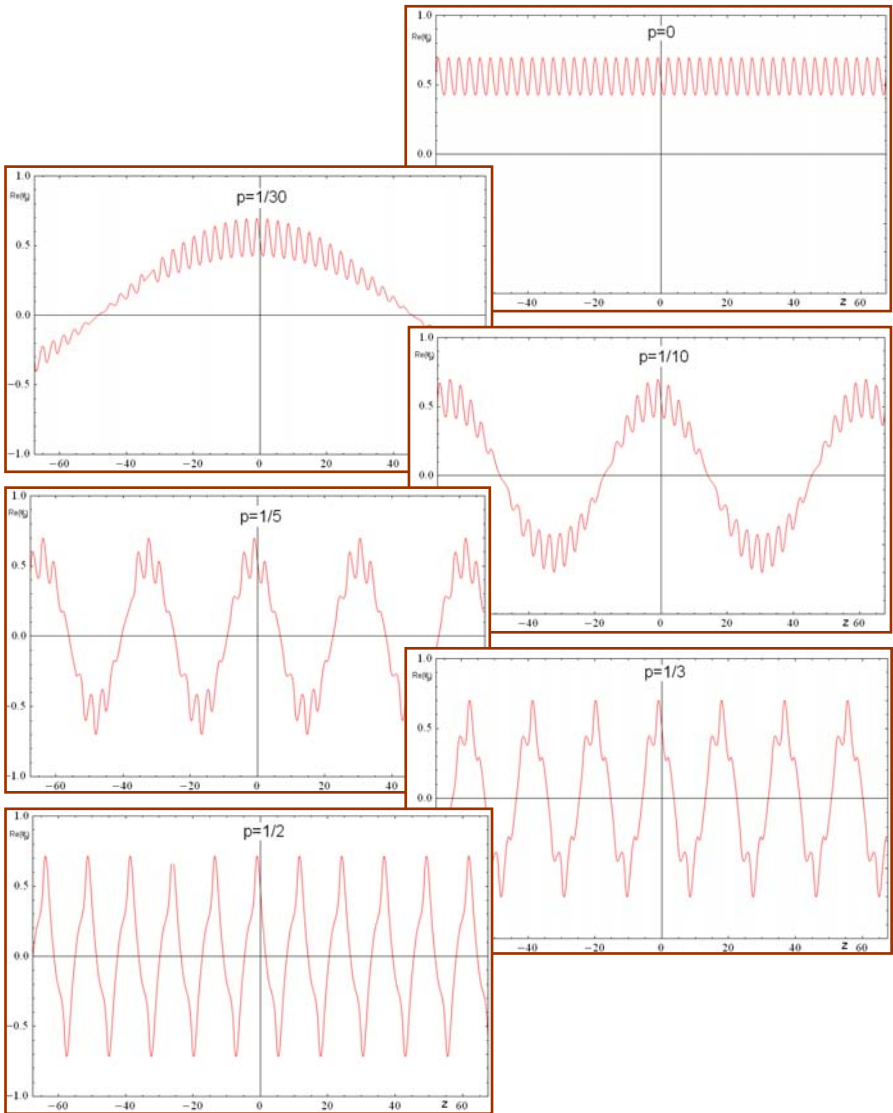


Рис.34. Блоховские функции нулевой зоны потенциала «пила с разрывами» с периодом $d = \pi$ для квазиимпульса $p = 0, 1/30, 1/10, 1/5, 1/3, 1/2$ в случае параметра $a = 1$.

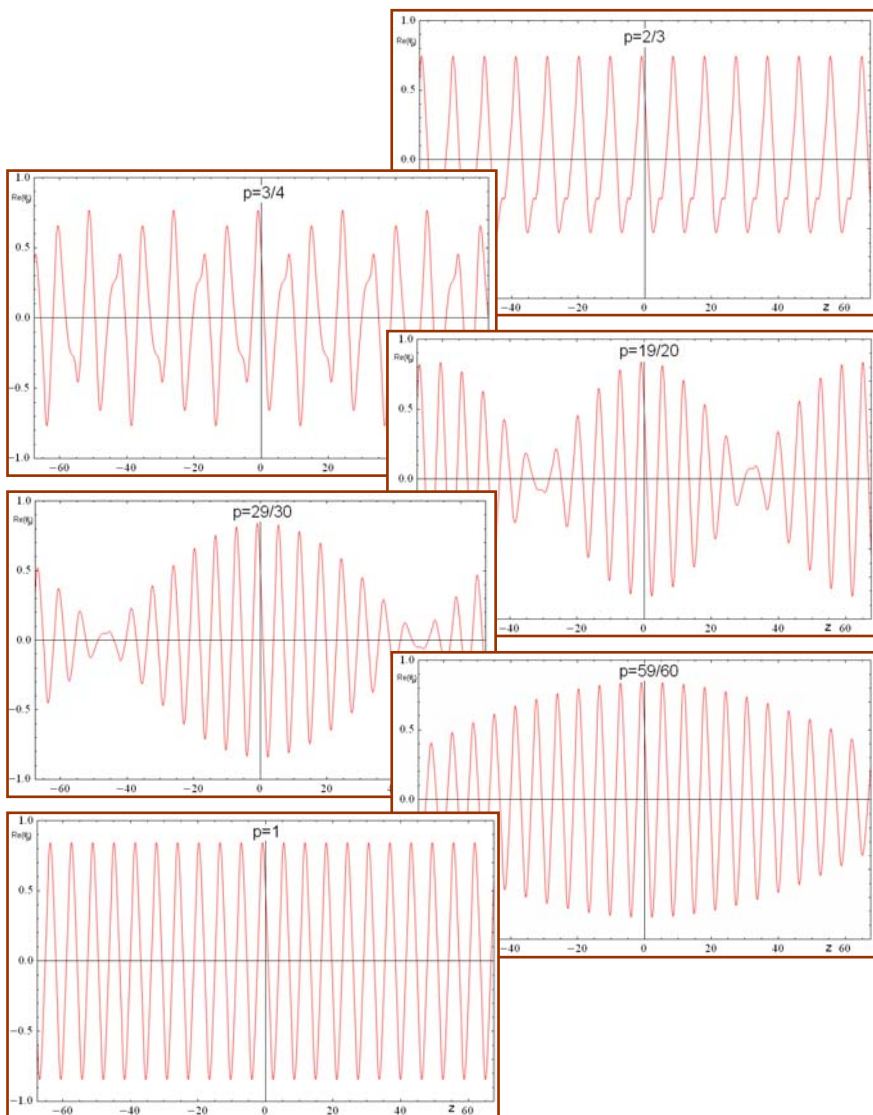


Рис.35. Блоховские функции нулевой зоны потенциала «пила с разрывами» с периодом $d = \pi$ для квазиимпульса $p = 2/3, 3/4, 19/20, 29/30, 59/60, 1$ в случае параметра $a = 1$.

1.3. Эллиптические потенциалы. Конечнозонность

*Там произошло нечто столь неожиданное, столь новое,
столь несогласное с установившимися взглядами...*

Эдгар По

Да, действительно, явления, о которых будет идти речь далее, и до настоящего времени кажутся весьма удивительными, «несогласными с установившимися взглядами» на поведение зонных структур. Пока, однако, обратимся к предварительным сведениям о некотором классе функций, служащих «строительным материалом» для еще одной группы периодических потенциальных моделей. Речь пойдет об эллиптических функциях Якоби.

Вкратце приведем несколько определений и терминов из этой обширной математической темы. Ограничимся тремя основными эллиптическими функциями Якоби. Это эллиптический синус $\operatorname{sn}(x|m)$, эллиптический косинус $\operatorname{cn}(x|m)$ и дельта амплитуды $\operatorname{dn}(x|m)$. В их обозначениях, наряду с координатным аргументом, фигурирует так называемый «параметр» m . Иногда вместо него используют «модуль» $k = \sqrt{m}$, а эллиптические функции записывают в виде $\operatorname{sn}(x, k)$, $\operatorname{cn}(x, k)$ и $\operatorname{dn}(x, k)$. Мы будем рассматривать эти эллиптические функции только для действительных значений основного аргумента x . В этом случае они оказываются периодическими с периодом $4K(m)$ для первых двух и $2K(m)$ для третьей функции, где $K(m)$ – полный эллиптический интеграл 1-го рода.

Добавим тождества, связывающие между собой упомянутые эллиптические функции Якоби:

$$\begin{aligned} \operatorname{cn}^2(x|m) + \operatorname{sn}^2(x|m) &= 1, \\ m \operatorname{sn}^2(x|m) + \operatorname{dn}^2(x|m) &= 1. \end{aligned} \quad (1.78)$$

Параметр m изменяется от 0 до 1, в связи с чем отметим два предельных случая для обсуждаемых эллиптических функций. При $m \rightarrow 0$ эллиптические синус и косинус превращаются в тригонометрические функции: $\operatorname{sn}(x|0) = \sin(x)$ и $\operatorname{cn}(x|0) = \cos(x)$, $K(0) = \frac{\pi}{2}$, а $\operatorname{dn}(x|0) = 1$. При $m \rightarrow 1$ эллиптические функции переходят в гиперболические: $\operatorname{sn}(x|1) = \operatorname{th}(x)$, $\operatorname{cn}(x|1) = \operatorname{sech}(x)$, $\operatorname{dn}(x|1) = \operatorname{sech}(x)$, а $K(1) = \infty$.

До сих пор в изучаемых нами периодических потенциалах период считался фиксированным (он выбирался равным π). Теперь внимание будет обращено на зависимость зонной структуры от периода, точнее – от параметра m , который определяет период не непосредственно, а через полный эллиптический интеграл 1-го рода $K(m)$. Можно построить много различных периодических потенциалов из эллиптических функций Якоби, но особое внимание привлекает модель, получаемая на основе квадрата эллиптического косинуса – «кноидальный» потенциал

$$u(z) = -n(n+1)m \operatorname{cn}^2(z|m), \quad (1.79)$$

где n – целое число.

В силу первого тождества из (1.78) можно рассматривать эквивалентный потенциал на основе квадрата эллиптического синуса (с соответствующим изменением отсчета энергии), что и делается в некоторых математических книгах. Уравнение, соответствующее уравнению Шредингера с таким потенциалом, называют уравнением Ламе, а периодические решения – функциями Ламе (они являются волновыми функциями стационарных состояний для граничных уровней энергии в зонах).

Обнаружилось, что кноидальный потенциал (1.79) обладает замечательной особенностью: *число энергетических зон в таком периодическом поле оказывается конечным, равным n* . Это любопытное открытие было сделано относительно недавно (Айнс, 1940).

Вначале отметим предельные случаи для кноидального потенциала при изменении параметра m . Если $m \rightarrow 0$ при фиксированном n , то амплитудный множитель потенциала (1.79) стремится к нулю, потенциал исчезает, но оставляет за собой след пустой периодической решетки синусоидального типа с привычным периодом π . Если же $m \rightarrow 0$ и одновременно

$n \rightarrow \infty$ при $n(n+1)m \rightarrow const$, то получается бесконечнозонный синусоидальный потенциал («Ламе переходит в Матье»).

Если $m \rightarrow 1$, то потенциал превращается в локализованную модель Эккарта солитонного вида

$$u(z) = -\frac{n(n+1)}{\operatorname{ch}^2(z)}, \quad (1.80)$$

имеющую n связанных стационарных состояний с уровнями энергии

$$e_0 = -n^2, e_1 = -(n-1)^2, \dots, e_{n-1} = -1 \quad (1.81)$$

и в непрерывной части своего энергетического спектра обладающую удивительной особенностью: проходящие над такой потенциальной ямой частицы *не отражаются при всех энергиях* согласно квантовой теории рассеяния в стационарных состояниях.

Таким образом, устанавливается связь периодических потенциальных полей, имеющих *конечнозонный* энергетический спектр, с локализованными моделями солитонного происхождения, обладающими *безотражательностью*. В связи с этим мы отсылаем читателя к последнему разделу первой части нашей монографии [12], где рассматриваются потенциальные поля солитонного происхождения. С другой стороны, мы затронули вопрос из темы «Рассеяние в одномерном случае», которую предполагаем обсудить далее в данной книге.

Итак, начнем рассматривать конечнозонные потенциалы с однозонного (и однолакунного) случая $n = 1$

$$u(z) = -2m \operatorname{cn}^2(z | m). \quad (1.81)$$

Здесь пригодятся следующие дифференциальные свойства эллиптических функций Якоби:

$$\begin{aligned} \frac{d \operatorname{dn}(z | m)}{dz} &= -m \operatorname{sn}(z | m) \operatorname{cn}(z | m), \\ \frac{d \operatorname{cn}(z | m)}{dz} &= -\operatorname{sn}(z | m) \operatorname{dn}(z | m), \\ \frac{d \operatorname{sn}(z | m)}{dz} &= \operatorname{cn}(z | m) \operatorname{dn}(z | m). \end{aligned} \quad (1.82)$$

Отсюда с привлечением тождеств (1.78) получаются дифференциальные уравнения второго порядка, которым удовлетворяют эллиптические функции в отдельности:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \operatorname{dn}(z | m)}{dz^2} + [-m + 2m \operatorname{cn}^2(z | m)] \operatorname{dn}(z | m) &= 0, \\ \frac{d^2 \operatorname{cn}(z | m)}{dz^2} + [1 - 2m + 2m \operatorname{cn}^2(z | m)] \operatorname{cn}(z | m) &= 0, \\ \frac{d^2 \operatorname{sn}(z | m)}{dz^2} + [1 - m + 2m \operatorname{cn}^2(z | m)] \operatorname{sn}(z | m) &= 0. \end{aligned} \quad (1.83)$$

Следовательно, эти эллиптические функции удовлетворяют уравнению Шредингера с кноидальным потенциалом (1.79). Причем функция $\operatorname{dn}(z | m)$ является волновой функцией дна зоны с энергией $-m$, функция $\operatorname{cn}(z | m)$ – волновой функцией

потолка зоны с энергией $1 - 2m$, а функция $\text{sn}(z | m)$ – волновой функцией границы непрерывного спектра с энергией $1 - m$.

Итак, три основные эллиптические функции Якоби выступают в роли функций Ламе однозонного кноидального потенциала (нормировочные множители опускаем):

$$\begin{aligned}\psi_0(z) &= \text{dn}(z | m), e_0 = -m; \\ \psi_1(z) &= \text{cn}(z | m), e_1 = 1 - 2m; \\ \psi_2(z) &= \text{sn}(z | m), e_2 = 1 - m.\end{aligned}\tag{1.84}$$

Любопытно, что впервые мы получаем линейную зависимость от некоторого параметра (в данном случае – от параметра эллиптических функций m) для крайних уровней энергии в зоне. На рисунке 36 приведены графики зависимости крайних уровней энергии от параметра m . Вся область разбивается на четыре части: нижнее пространство соответствует невозможным состояниям, над ним расположена зона разрешенных энергий, далее идет лагуна – энергетическая щель, а над нею простирается неограниченный непрерывный энергетический спектр. Зона и область непрерывного спектра

закрашены серым цветом (в электронной версии книги и в презентации зона закрашена розовым цветом, а непрерывная область энергий – голубым).

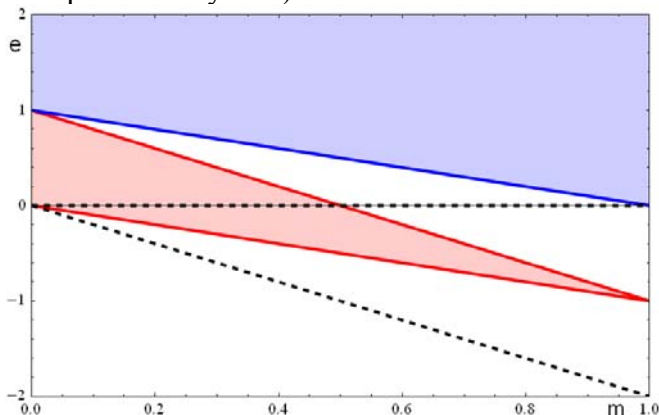


Рис36. Зона однозонного кноидального потенциала для значений параметра $0 \leq m \leq 1$. Штриховые линии соответствуют максимуму и минимуму потенциала.

На рисунках 37-39 представлены однозонный кноидальный потенциал и его зона для разных значений параметра m .

Что касается приближенного расчета энергии дна зоны по теории возмущений, то в первом приближении для $0 \leq m \leq 0.5$ относительная ошибка по абсолютной величине не превышает 10%, а во втором приближении даже для $0 \leq m \leq 0.9$ она не превышает 4%.

Анимация ANIM-BANDS-CN-CN-n1.exe показывает изменение однозонного кноидального потенциала и границ его энергетического спектра в зависимости от параметра $0 \leq m \leq 1$.

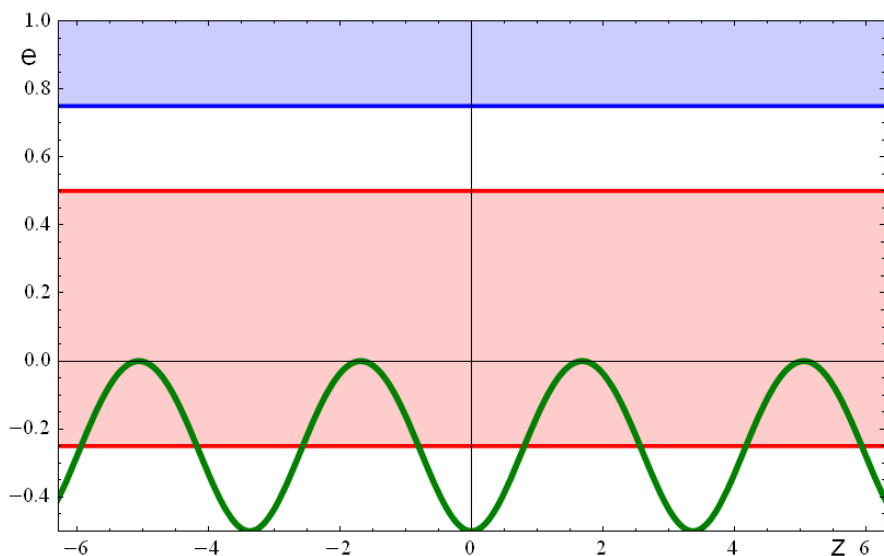
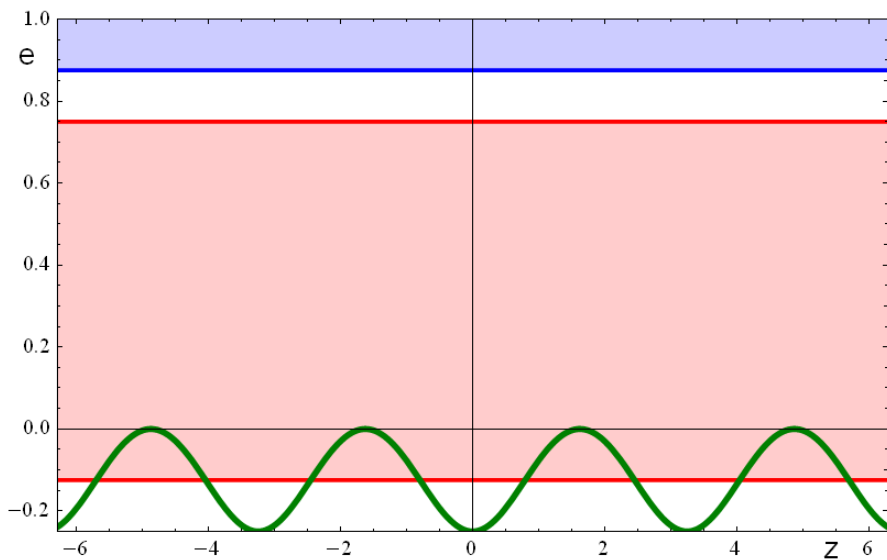


Рис.37. Однозонный кноидальный потенциал и зона для значений параметра $m = 1/8$ (вверху) и $m = 1/4$ (внизу).

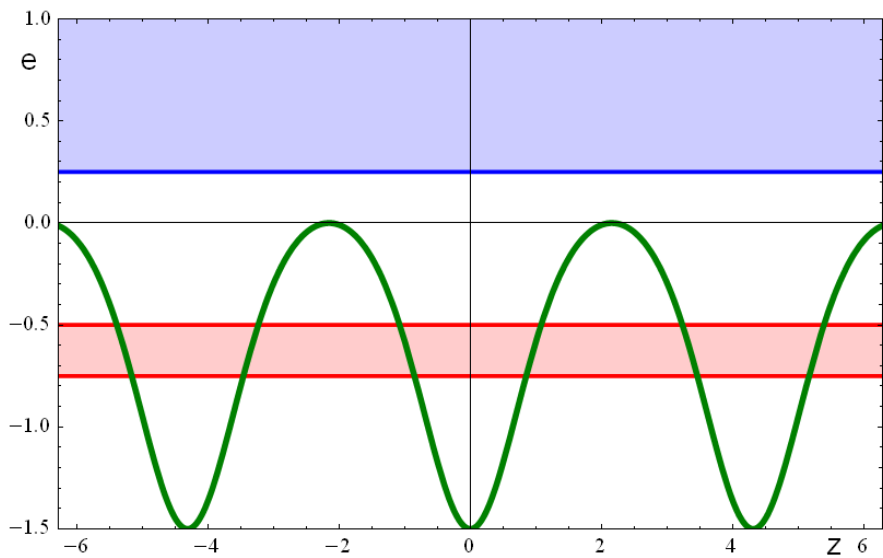
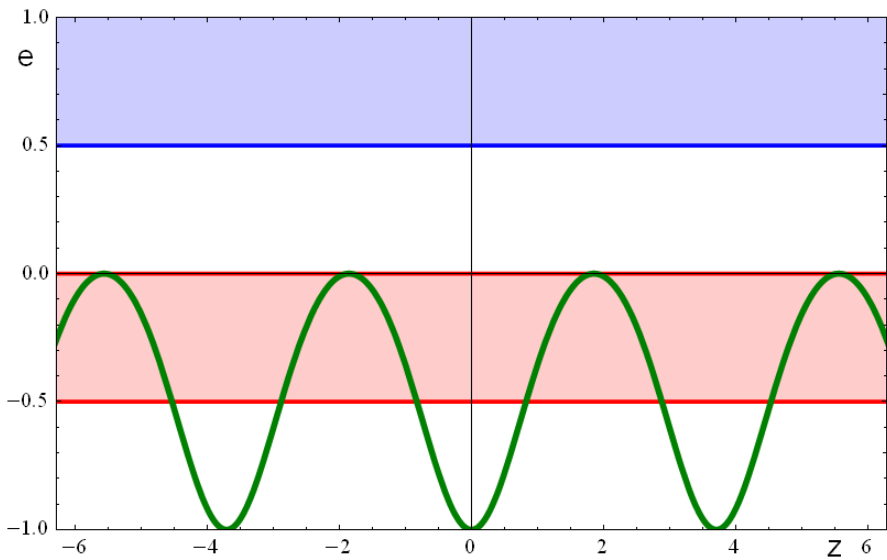


Рис.38. Однозонный кноидальный потенциал и зона для значений параметра $m = 1/2$ (вверху) и $m = 3/4$ (внизу).

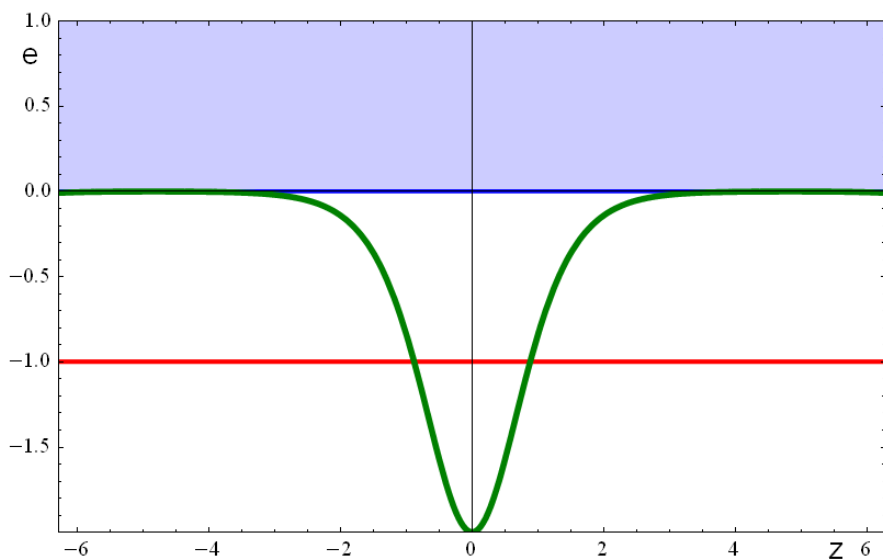
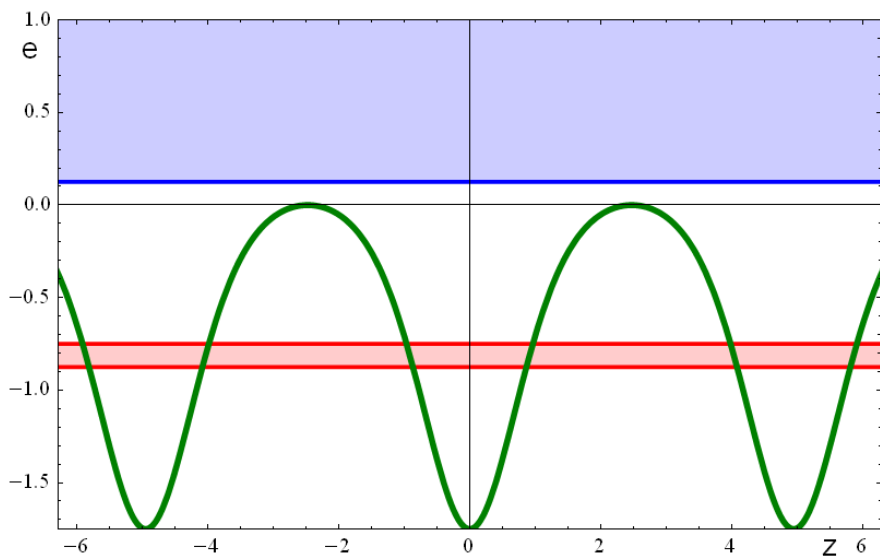


Рис.39. Однозонный кноидальный потенциал и зона для значений параметра $m = 7/8$ (вверху) и $m \approx 1$ (внизу).

Переходя к двухзонной кноидальной модели периодического потенциала, ограничимся графическими иллюстрациями общего расположения зон (рис.40) и детального их положения относительно потенциала для некоторых характерных значений параметра m (рис. 41-43).

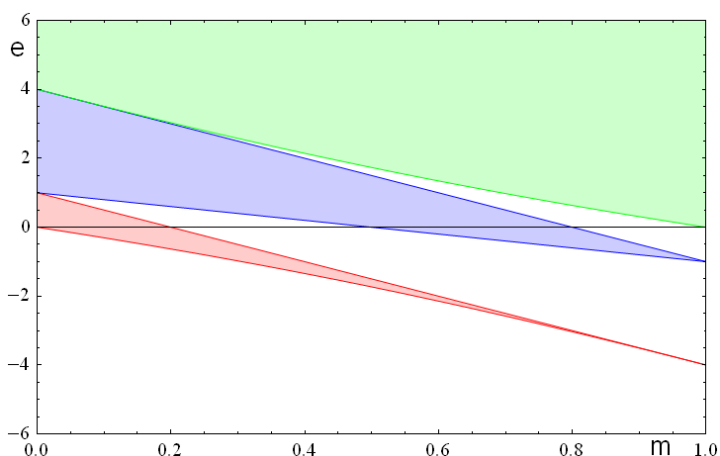


Рис.40. Зоны двухзонного кноидальной потенциал для значений параметра $0 \leq m \leq 1$.

Анимационная демонстрация ANIM-BANDS-CN-CN-n2.exe показывает изменение кноидального потенциала и границ его энергетического спектра с *двумя зонами* в зависимости от параметра $0 \leq m \leq 1$.

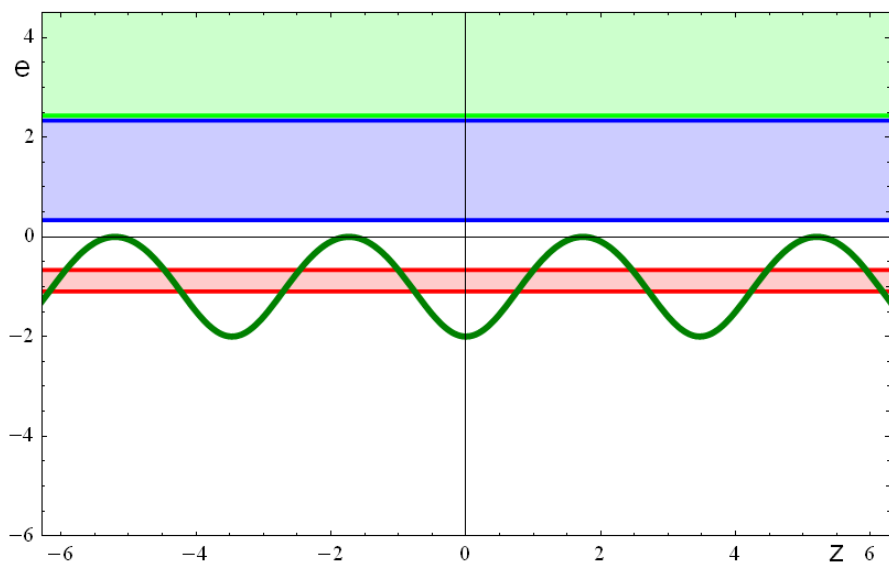
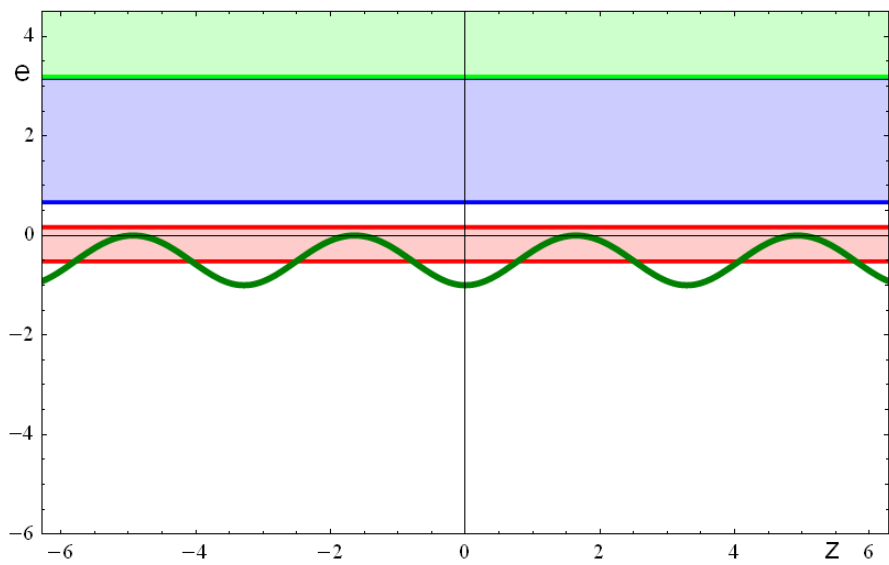


Рис.41. Двухзонный кноидальный потенциал и зоны для значений параметра $m = 1/6$ (вверху) и $m = 1/3$ (внизу).

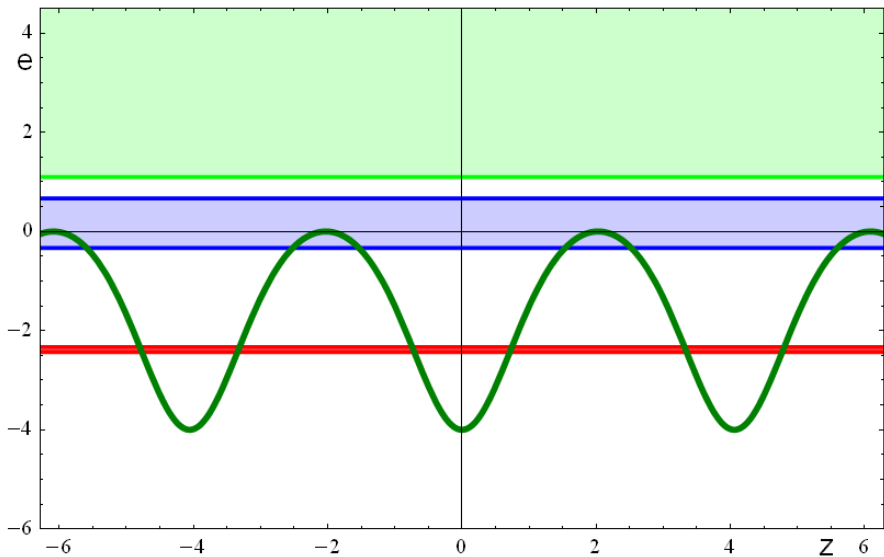
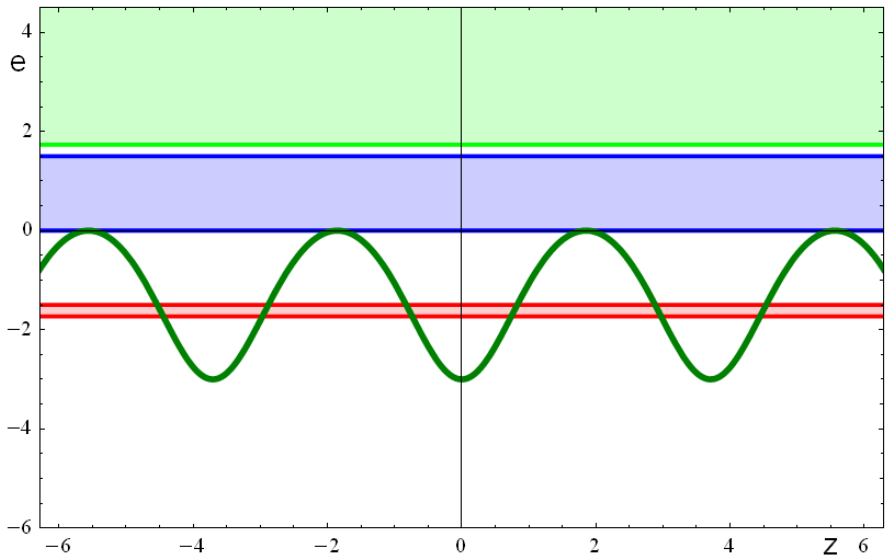


Рис.42. Двухзонный кноидальный потенциал и зоны для значений параметра $m = 1/2$ (вверху) и $m = 2/3$ (внизу).

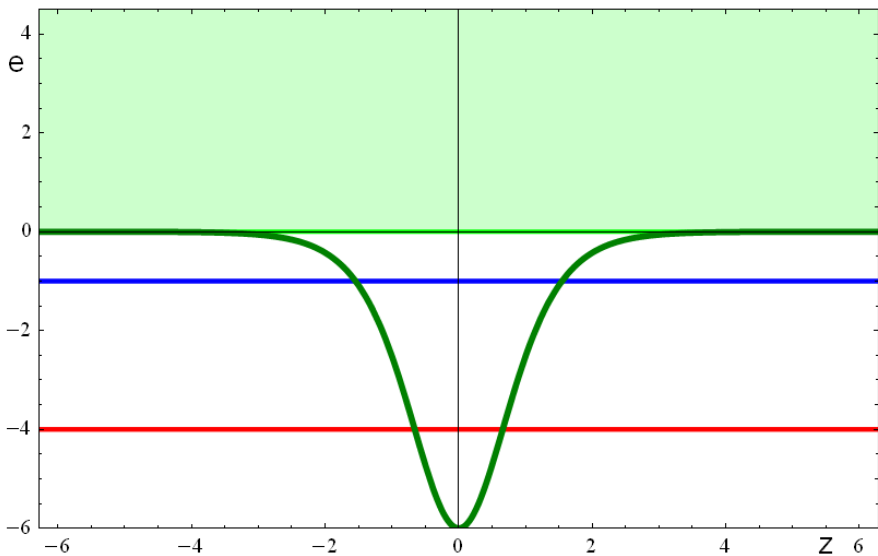
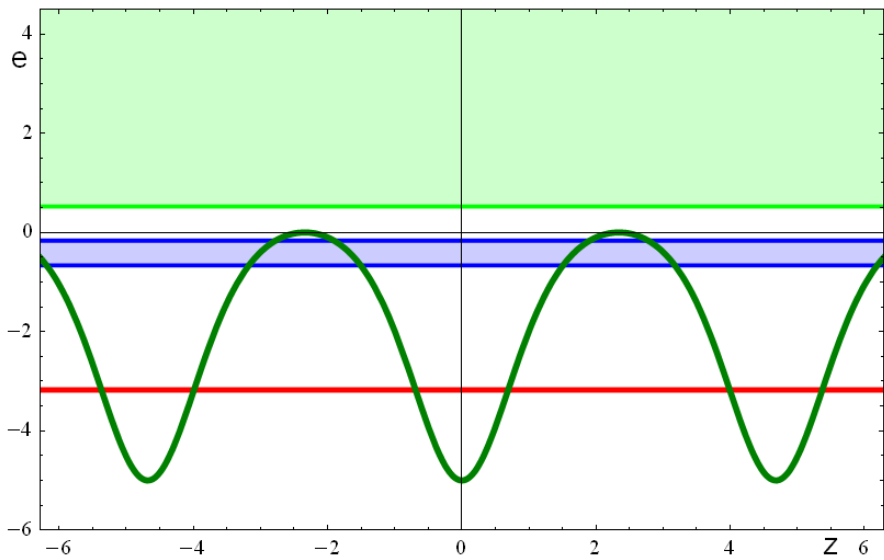


Рис.43. Двухзонный кноидальный потенциал и зоны для значений параметра $m = 5/6$ (вверху) и $m \approx 1$ (внизу).

Спиновые периодические потенциалы

Далее мы рассмотрим еще некоторые примеры периодических потенциалов, построенных из эллиптических функций. К ним можно прийти при исследовании спиновой системы с гамильтонианом следующего вида:

$$H = \alpha S_z^2 - \beta S_y^2 - BS_x, \quad (1.85)$$

где S_j – j-проекция спина S , $\alpha \geq 0, \beta \geq 0$ – константы анизотропии.

Этот гамильтониан описывает, например, двухосный парамагнетик в магнитном поле B , перпендикулярном осям анизотропии. В [13] показано, что собственные значения такого гамильтониана совпадают с $2S+1$ крайними уровнями энергии низших энергетических зон (чередующимися дном и потолком зоны) частицы с квадратичным законом дисперсии и обратной эффективной массой $2(\alpha + \beta)$, движущейся в периодическом потенциальном поле

$$u(z) = \frac{[\frac{1}{4}B^2 - \alpha\beta S(S+1)]\text{sn}^2(z|m) - (\alpha + \beta)B(S + \frac{1}{2})\text{cn}(z|m)}{\alpha + \beta\text{cn}^2(z|m)}, \quad (1.86)$$

где $m = \frac{\beta}{\alpha + \beta}$ – параметр эллиптических функций $\text{sn}(z|m)$ и $\text{cn}(z|m)$.

Поскольку спиновая система (1.85) при небольших S допускает точное решение в виде простых явных формул для

уровней энергии и векторов стационарных состояний, то и уравнение Шредингера с потенциалом (1.86) имеет соответствующие точные решения.

С ростом магнитного поля B минимумы ям в ячейках периодического потенциала претерпевают изменения от двойных до одиночных через четверные, а форма максимумов барьеров изменяется в обратном порядке. Оказывается, что при $\alpha = \beta$ существует некоторое критическое значение магнитного поля $B_0 = 2\alpha\sqrt{S(S+1)}$, при котором ячейка потенциала имеет одновременно как четверной минимум, так и четверной максимум.

Приведем конкретные примеры уровней энергии для различных значений спина S . Обратим внимание, что в данном случае нумерация уровней энергии будет соответствовать принятой нами для зонных структур.

В тривиальном для спиновой системы случае $S=0$ единственный уровень энергии $e_0 = 0$ остается постоянным при любых деформациях потенциала за счет независимых параметров α / β и B , являясь дном основной зоны.

В случае $S=1/2$ спиновые уровни энергии окаймляют первую щель:

$$e_{1,2} = \frac{1}{4}(\alpha - \beta) \mp \frac{1}{2}B . \quad (1.87)$$

В случае $S=1$ уровни энергии дна основной зоны и дна второй зоны определяются формулой

$$e_{0,4} = \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \mp \sqrt{B^2 + \frac{1}{4}(\alpha + \beta)^2}. \quad (1.88)$$

а уровень энергии потолка первой зоны равен

$$e_3 = \alpha - \beta. \quad (1.89)$$

В случае $S=3/2$ уровни энергии, окаймляющие первую и третью щели, равны

$$e_{5,6} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) + \frac{1}{2}B \mp \sqrt{\left[B - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)\right]^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2}, \quad (1.90)$$

$$e_{1,2} = \frac{5}{4}(\alpha - \beta) - \frac{1}{2}B \mp \sqrt{\left[B + \frac{1}{2}(\alpha - \beta)\right]^2 + \frac{3}{4}(\alpha + \beta)^2}. \quad (1.91)$$

Начиная со значения $S=2$ в точных решениях спинового происхождения уровни энергии будут выражаться формулами, содержащими тригонометрические функции, которые мы приводить не будем, а читателя отсылаем к [14].

При исследовании свойств зонного спектра спиновых потенциалов мы будем опираться на точные решения для соответствующих граничных уровней энергии при целых и полуцелых значениях спина S . Кроме того, можно рассматривать не обладающие точными граничными уровнями

энергии *внеспиновые* зоны и зоны, лежащие выше спиновых, т. е. *надспиновые*.

Как показано в [13], при определенных параметрических и координатных преобразованиях потенциал (1.86) может превращаться в известные периодические и непериодические потенциалы, включая конечнозонные, являясь их обобщениями.

Мы же ограничимся случаем, когда $\alpha = \beta = 1/2$, так что параметр эллиптических функций $m = 1/2$. Потенциал (1.86) сводится к

$$u(z) = \frac{\frac{1}{2}[B^2 - S(S+1)]\operatorname{sn}^2(z | \frac{1}{2}) - B(2S+1)\operatorname{cn}(z | \frac{1}{2})}{1 + \operatorname{cn}^2(z | \frac{1}{2})}. \quad (1.92)$$

Начнем со знакомства с общими формами потенциала (1.92), содержащего два параметра: S и B . Это сделаем на анимационных демонстрациях ANIM-PIC-POT-SN-CN-B1-S0-2.exe и ANIM-PIC-POT-SN-CN-S1-B0-2.exe, где при некотором фиксированном одном из параметров прокручиваются профили потенциала (1.92) для значений второго параметра.

О роли точных решений для спиновых зон. Как уже отмечалось, в каждой из $2S+1$ нижних зон имеется точное значение для одной из граничных энергий (либо для дна, либо для потолка зоны). Это дает общее представление о положении спиновых зон, а в случае узких зон (при слабой прозрачности

барьеров, разделяющих ячеечные ямки зон) – достаточно точное их расположение. Этот факт можно отнести к качественной роли точных граничных энергий в спиновых зонах. При применении квазиклассической формулы для ширины зоны, можно опираться на значения таких точных граничных энергий. Это определяет количественную роль точных энергий.

Начнем с зон потенциала (1.92) для значения непрерывного параметра $B = 1$. В случае спина $S = 0$ имеется одна спиновая зона, энергия дна которой равна $e_0 = 0$. Если взять за основу это значение энергии при расчете ширины зоны по квазиклассической формуле (1.15), то получаем $\Delta e_0^q = 0.0230726$. Численное решение уравнения Шредингера дает ширину нулевой зоны $\Delta e_0 = 0.0264587$, так что приближенный расчет приводит к относительной ошибке $\delta = 12.8\%$.

В случае спина $S = 1/2$ имеются две спиновые зоны. Энергия потолка основной зоны равна $e_1 = -1/2$. Для такой энергии по формуле (1.15) получаем $\Delta e_0^q = 0.0065466$. Численное решение УШ дает энергию дна нулевой зоны $e_0 = -0.50728542$ и ее ширину $\Delta e_0 = 0.00728542$, так что относительная ошибка квазиклассического расчета $\delta = 10\%$. Первая спиновая зона имеет точное значение энергии дна

$e_2 = 1/2$. Квазиклассический расчет для ширины этой зоны на основе этой энергии дает значение $\Delta e_1^q = 0.103094$. Численное решение УШ приводит к значению энергии потолка этой зоны $e_3 = 0.616486$, так что ее ширина равна $\Delta e_1 = 0.116486$. Относительная ошибка квазиклассического расчета составляет $\delta = 11.5\%$

В случае $S = 1$ имеем три спиновые зоны, однако вторая зона попадает в окрестность максимумов потенциала, так что квазиклассический расчет по формуле (1.15) непосредственно применим только для двух нижних зон. Для нулевой зоны точное значение энергии дна равно $e_0 = -\sqrt{5/4} = -1.11803$. По квазиклассической формуле для ширины на основе этого значения энергии получаем $\Delta e_0^q = 0.00276653$. Численное решение УШ дает для потолка этой зоны значение $e_1 = -1.11498$, так что ширина равна $\Delta e_0 = 0.00305044$. Следовательно, относительная ошибка составляет $\delta = 10.1\%$. Для первой зоны потолок $e_3 = 0$. Решение УШ дает дно $e_2 = -0.0367978$, так что ширина этой зоны $\Delta e_1 = 0.0367978$. Квазиклассическая формула для ширины этой зоны на основе $e_3 = 0$ дает значение $\Delta e_1^q = 0.0336094$ с относительной ошибкой $\delta = 8.7\%$.

Окончательный вывод состоит в том, что ширины спиновых зон, получаемые по квазиклассической формуле на основе точных значений энергии для крайних уровней в этих зонах, вычисляются с достаточно хорошей точностью при относительных ошибках порядка 10%. Это позволяет, в частности, наносить на графиках спиновые зоны, основываясь на этих приближенных результатах, минуя более хлопотные численные расчеты соответствующих УШ. На рисунке 44 представлены такие спиновые периодические потенциалы для указанных параметров. Изображены также крайние уровни энергии спиновых зон.

Анимационный файл ANIM-BANDS-B1-S0-12.exe демонстрирует поведение спинового периодического потенциала указанного вида при $B=1$ для непрерывно изменяющихся значений спинового параметра S от 0 до $\frac{1}{2}$. Показаны две зоны. Нижняя зона является спиновой при $S=0$ и $S=1/2$, а для промежуточных значений она оказывается внеспиновой. Верхняя зона является надспиновой для всех

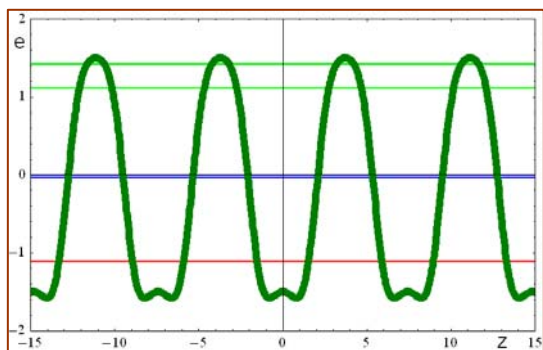
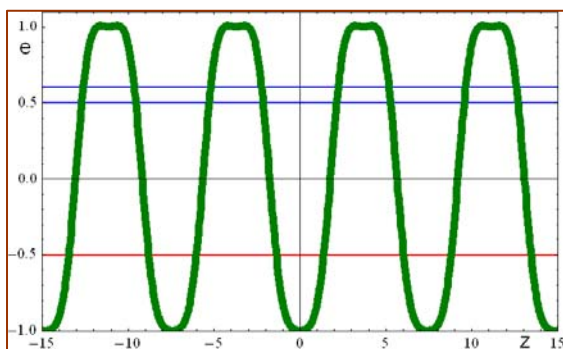
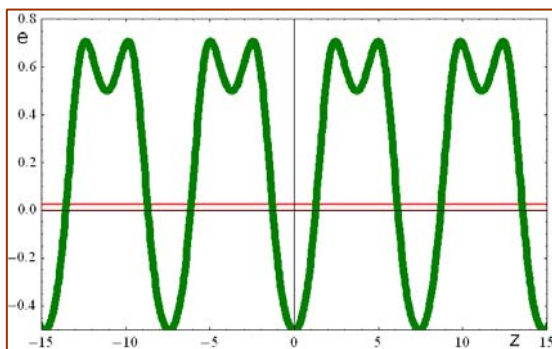


Рис.44. Спиновый периодический потенциал, содержащий эллиптические функции с параметром $m = 1/2$ в случае $B = 1$ для значений спина $S = 0, 1/2, 1$ (сверху вниз). Показаны спиновые зоны с крайними уровнями энергии.

значений S из указанного интервала, кроме $S = 1/2$, при котором она становится спиновой. Другими словами, демонстрируется типичный переход от надспиновой зоны к спиновой.

Как уже отмечалось, существуют такие значения параметров B , при которых спиновый потенциал имеет одновременно четверные максимумы и минимумы. Приводим соответствующую иллюстрацию на рисунке 45 (кстати, этот рисунок воспроизведен на обложке данной книги).

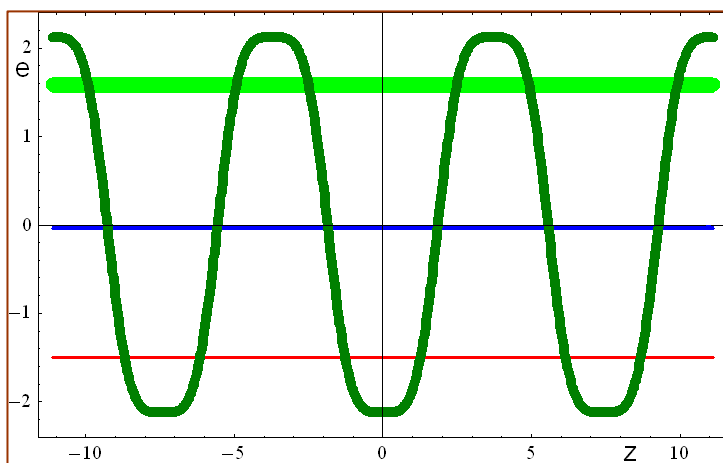


Рис.45. Спиновый периодический потенциал, содержащий эллиптические функции с параметром $m = 1/2$ в случае критического значения $B = \sqrt{2}$ для спина $S = 1$. Показаны спиновые зоны.

Приведем значения крайних уровней энергии в спиновых зонах потенциала на рис. 45 (три точных и три полученных при решении УШ):

$$\begin{aligned} e_0 &= -\sqrt{B^2 + 1/4} = -1.5; e_1 = -1.49938; e_2 = -0.0126093; \\ e_3 &= 0; e_4 = \sqrt{B^2 + 1/4} = 1.5; e_5 = 1.67221. \end{aligned} \quad (1.93)$$

Нетрудно убедиться, что при квазиклассическом расчете ширины этих зон на основе точных значений энергии относительные ошибки не превышают 10%.

Периодические структурные превращения в зонах

Как указано выше, в каждой из $2S + 1$ низших зон эффективного потенциала (1.86) один из крайних уровней энергии является спиновым, что дает основание называть эти зоны также спиновыми.

Особое внимание привлекают более высокие зоны – надспиновые. Оказалось, что в их расположении имеется много интересных особенностей. Поскольку в этой области энергий точных решений нет, а аналитические приближенные методы не позволяют уловить тонких деталей поведения щелей (лакун), были использованы численные методы решения уравнения Шредингера с периодическим четным потенциальным полем (1.86). По результатам вычислений была построена схема областей устойчивости, т. е. энергетических зон, в зависимости

от параметра S , который считался непрерывно изменяющимся в некотором интервале. Компьютерный эксперимент был поставлен для точек, отстоящих друг от друга на небольшие расстояния вне спиновых (бифуркационных) значений S , а вблизи бифуркаций поведение лакун было исследовано еще более тщательно.

Результаты можно суммировать следующим образом. Спиновые зоны оказываются достаточно узкими практически для всех значений $B \gtrsim 2S + 1$ и расположение их близко к эквидистантному. Это объясняется слабой прозрачностью барьеров эффективного потенциала в области спиновых уровней энергии и тем обстоятельством, что положение зон при целых и полуцелых значениях S определяется точными спиновыми уровнями энергии. Надспиновые же зоны находятся в надбарьерной области эффективного потенциала. Поскольку профиль потенциала гладкий, прозрачность в этой области энергий велика, то надспиновые зоны достаточно широки, а щели узки.

Это – обычные свойства такого типа зонного спектра. Однако имеются отдельные значения параметра S , при которых в расположении зон наблюдаются особенности: при целых и полуцелых значениях S все надспиновые зоны попарно стыкуются (спариваются), так что половина надспиновых щелей

закрывается. При этом происходит обмен четностью между уровнями энергии, обрамляющими захлопывающуюся щель. Кроме того, одна из надспиновых зон превращается в спиновую, так что появляются точные решения для спиновых зон. Эти превращения энергетических зон можно назвать периодическим спиновым структурным переходом.

Спаривание охватывает все надспиновые зоны, а не какую-то отдельную пару (вертикальное правило периодичности в схеме полос устойчивости) и происходит при каждом целом и полуцелом значении спинового параметра потенциала (горизонтальное правило периодичности).

Если $B = 0$, то при целых S спиновый потенциал (1.86), как можно показать (см.[13]), сводится к конечнозонному кноидальному потенциалу, когда все надспиновые зоны смыкаются, образуя одну бесконечную зону.

Если же $B \neq 0$, то период потенциала удваивается и возникает эффект попарного расщепления зон с сохранением половины надспиновых щелей, что соответствует описанному выше структурному превращению в зонах при целых значениях параметра S .

В пределе $\beta = 0$, с одной стороны, эти особенности сохраняются, а с другой стороны, эллиптические функции в формуле (1.86) переходят в тригонометрические, так что двухосная спиновая система (1.85) становится одноосной с бигармоническим эффективным потенциалом (полагаем также $\alpha = 1$)

$$u(z) = \frac{1}{4} B^2 \sin^2(z) - B(S + \frac{1}{2}) \cos(z). \quad (1.93)$$

Этому потенциалу также присущи отмеченные выше особенности зонного энергетического спектра. Таким образом, добавление второй гармоники к синусоидальному потенциалу Матве в формуле (1.93) приводит к существенной перестройке верхних зон при определенном соотношении между амплитудами гармоник.

Подробнее свойства зонного спектра систем с периодическим потенциалом (1.86) рассмотрены в обзоре [13].

Разумеется, тема спиновых периодических потенциалов весьма обширна. Мы затронули лишь часть возможных направлений исследования их зонной структуры.

1.4. Методы построения зонных потенциалов. Итоги

В попытке увидеть больше, проникнуть глубже, заметить все.

Рекс Стаут

Вначале рассмотрим подход к построению зонных структур с помощью потенциалов солитонного происхождения. Здесь в основе лежит обратная задача нахождения потенциала по произвольно задаваемым уровням энергии. Отсылаем читателя к первой части нашей монографии [12], где кратко изложены главные идеи этого направления.

Схема действий такова. Сначала строим потенциал однозонного вида. Задаем один уровень энергии, который будет служить дном будущей зоны. Затем вводим второй уровень энергии, который послужит потолком строящейся зоны. После этого заполняем возникший пустой остов достаточным количеством уровней энергии. Желательно располагать их в соответствии с плотностью состояний в настоящей зоне, но в грубом приближении можно ограничиться равномерным заполнением энергетического диапазона.

Результаты такого построения отображаются на рисунке 46 и в презентации «Зоны», иллюстрирующих указанный процесс.

В отличие от ранее рассмотренных зонных структур, когда периодичность потенциалов заложена уже в исходной картине и образуется полоса непрерывного спектра с двукратным вырождением уровней энергии и бегущими волнами (кроме

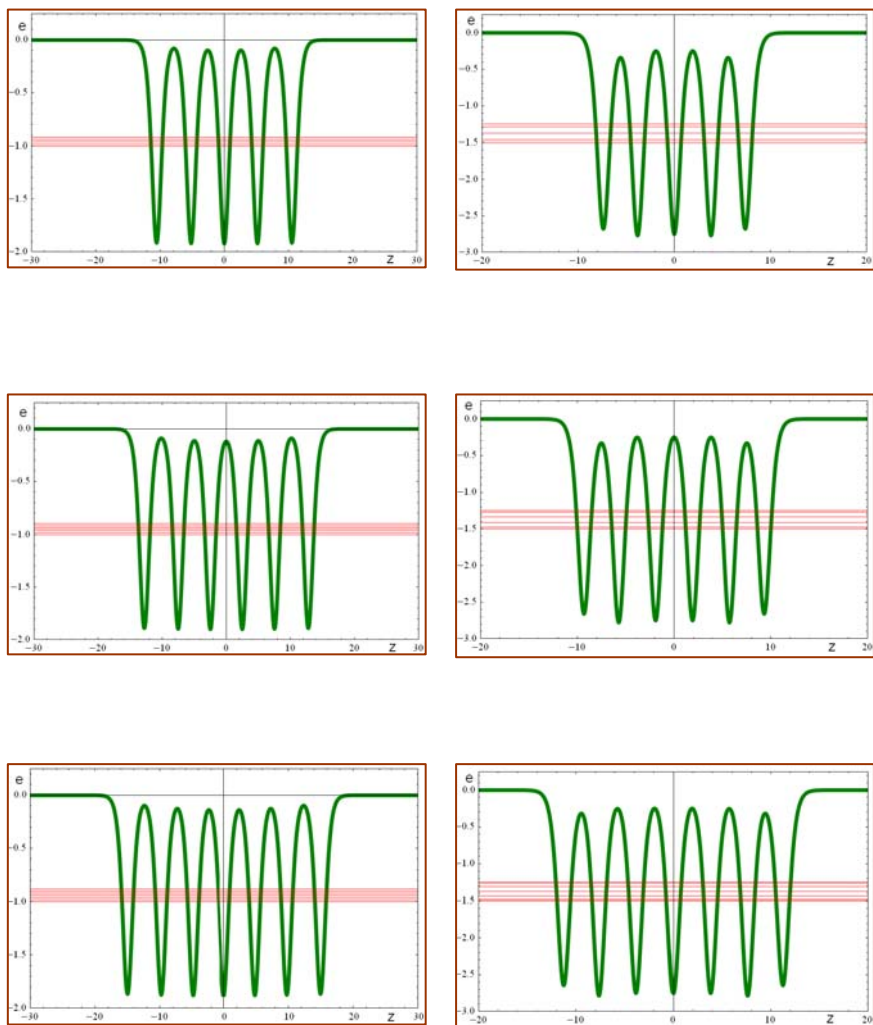


Рис.46. Солитонные построения однозонного потенциала с количеством уровней энергии от 5 до 7 (слева – эквидистантными, справа – неэквидистантными).

границ зон), в данном подходе построение осуществляется путем наращивания связанных стационарных состояний с невырожденными уровнями энергии и стоячими волнами, что приводит к образованию цепочки почти одинаковых потенциальных ямок с расщеплением уровней энергии в них. Другими словами, такое построение происходит в духе сильной связи.

Особенностью данного алгоритма является также *безотражательность* в области непрерывного спектра энергии и соответственно – *конечнозонность* получаемых структур.

Аналогичным образом можно создать двухзонный потенциал и т. д. Рисунок 47 показывает такие построения.

Наконец, завершаем рассмотрение зон еще одним подходом к их построению. Идею продемонстрируем на примере дельта-потенциалов. Пусть имеется одна потенциальная дельта-яма интенсивностью a в начале координат, т. е. $u(z) = -a\delta(z)$. При $z < 0$ волновую функцию связанного стационарного состояния с энергией $e < 0$ запишем в виде $\psi_1(z) = A_1 e^{\kappa(z+d/2)} + B_1 e^{-\kappa(z+d/2)}$, а при $z > 0$ в виде $\psi_2(z) = A_2 e^{\kappa(z-d/2)} + B_2 e^{-\kappa(z-d/2)}$, где $\kappa = \sqrt{|e|}$, а смысл введенного параметра $d > 0$ будет указан

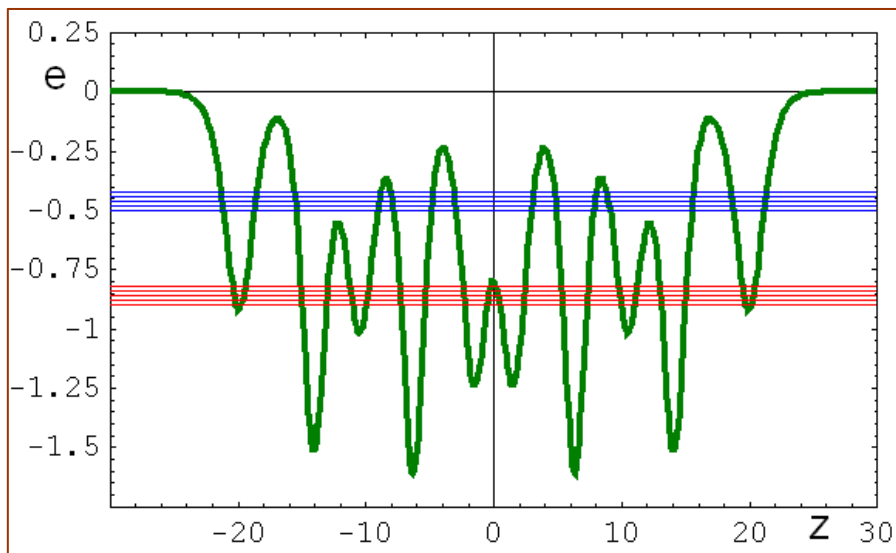
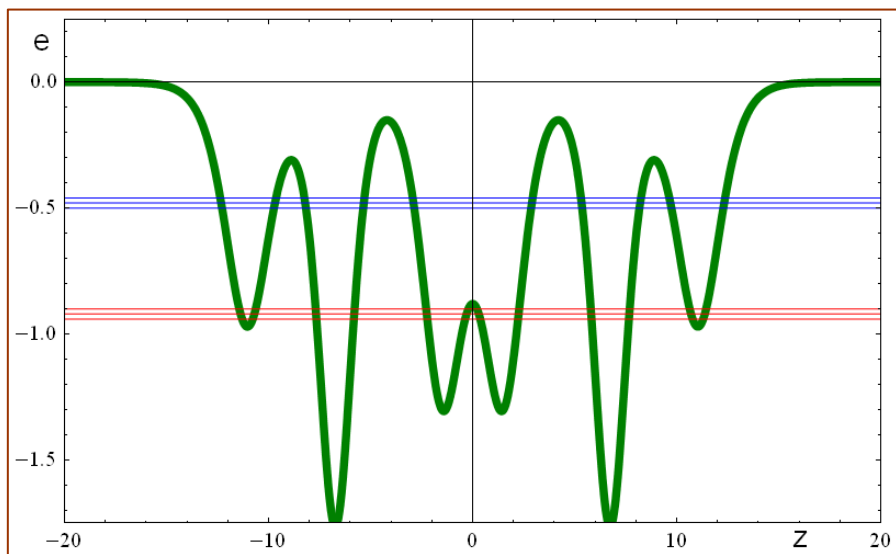


Рис.47. Солитонные построения двухзонного потенциала с количеством уровней энергии от 3 (вверху) до 5 (внизу) в каждой зоне.

далее. Связь этих решений уравнения Шредингера можно записать с помощью оператора \hat{G} перехода через особенность потенциального поля (в данном случае локализованную в начале координат), или матрицы связи локальных решений (трансфер-матрицы)

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}; \quad \hat{G} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix},$$

так что $A_1 = G_{11}A_2 + G_{12}B_2$; $B_1 = G_{21}A_2 + G_{22}B_2$.

Матричные элементы этого оператора получаем согласно правилам непрерывности волновой функции в точке действия дельта-потенциала и скачка производной волновой функции в этой точке $A_1 e^{\kappa d/2} + B_1 e^{-\kappa d/2} = A_2 e^{-\kappa d/2} + B_2 e^{\kappa d/2}$,

$$\kappa(A_2 e^{-\kappa d/2} - B_2 e^{\kappa d/2}) - \kappa(A_1 e^{\kappa d/2} - B_1 e^{-\kappa d/2}) = -a(A_2 e^{-\kappa d/2} + B_2 e^{\kappa d/2}).$$

Отсюда вытекает явный вид матричных элементов оператора перехода

$$G_{11} = \left(1 + \frac{a}{2\kappa}\right) e^{-\kappa d}; \quad G_{12} = \frac{a}{2\kappa}; \quad G_{21} = -\frac{a}{2\kappa}; \quad G_{22} = \left(1 - \frac{a}{2\kappa}\right) e^{\kappa d}.$$

Указанный выбор частных решений позволяет непосредственно итерировать процесс перехода через дельта-потенциалы, которые будут добавляться в точках с координатами $z = (N-1)d$ (N – число дельта-потенциалов, d играет роль затравочного периода периодического потенциала в пределе бесконечно большого числа дельта-ям).

Таким образом, нетрудно убедиться, что при итерировании матрица перехода через сложную особенность (N дельта-ям) \hat{G} будет равна произведению N затравочных матриц перехода через одну особенность потенциала \hat{G}

$$\hat{G} = \hat{G}^N.$$

При этом для $z > (N-1)d$ волновая функция имеет вид $\psi_{N+1}(z) = A_{N+1} e^{\kappa(z-Nd+d/2)} + B_{N+1} e^{-\kappa(z-Nd+d/2)}$, где коэффициенты A_{N+1} и B_{N+1} связаны с A_1 и B_1 соотношением

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix}, \text{ или}$$

$$A_1 = G_{11} A_{N+1} + G_{12} B_{N+1}; \quad B_1 = G_{21} A_{N+1} + G_{22} B_{N+1}.$$

Для связанных состояний должны выполняться условия $B_1 \equiv 0$ и $A_{N+1} \equiv 0$, так что получаем характеристическое уравнение

$$G_{22} = 0. \tag{1.95}$$

Далее имеются два пути: либо выполняем итерацию непосредственно, либо используем готовый ответ на основе собственных значений G_1 и G_2 оператора \hat{G} . Этот ответ для $N > 1$ таков:

$$G_{11} = G_{11} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} - \frac{G_1^{N-1} - G_2^{N-1}}{G_1 - G_2}; \quad G_{12} = G_{12} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2};$$

$$G_{21} = G_{21} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2}; \quad G_{22} = G_{22} \frac{G_1^N - G_2^N}{G_1 - G_2} - \frac{G_1^{N-1} - G_2^{N-1}}{G_1 - G_2}.$$

Собственные значения G_1 и G_2 удовлетворяют уравнению

$$\lambda^2 - (G_{11} + G_{22})\lambda + G_{11}G_{22} - G_{12}G_{21} = 0,$$

где для нашего оператора $\text{Sp } \hat{G} = G_{11}G_{22} - G_{12}G_{21} = 1$ и

$$\det \hat{G} = G_{11} + G_{22} = 2 \text{ch}(\kappa d) - \frac{a}{\kappa} \text{sh}(\kappa d).$$

Далее приведем несколько примеров. Начнем со случая одиночной дельта-ямы, т. е. $N=1$. Уравнение для энергетического спектра имеет вид

$$G_{22} = \left(1 - \frac{a}{2\kappa}\right) e^{\kappa d} = 0, \text{ так что для единственного связанного}$$

состояния получаем $\kappa_0 = a/2$ и $e_0 = -a^2/4$. Для двух дельта-ям

$$G_{22} = G_{22}(G_1 + G_2) - 1 = G_{22}(G_{11} + G_{22}) - 1, \text{ или}$$

$$G_{22} = \left(1 - \frac{a}{2\kappa}\right) e^{\kappa d} \left(2 \text{ch}(\kappa d) - \frac{a}{\kappa} \text{sh}(\kappa d)\right) - 1, \text{ так что приходим к}$$

уравнению $\left(1 - \frac{a}{2\kappa}\right) e^{\kappa d} \left(2 \text{ch}(\kappa d) - \frac{a}{\kappa} \text{sh}(\kappa d)\right) - 1 = 0$. Его можно

преобразовать к виду $\kappa = \frac{a}{2}(1 \pm e^{-\kappa d})$, или непосредственно для

энергии
$$e = -\frac{a^2}{4}(1 \pm e^{-\sqrt{|e|}d})^2.$$

При $ad/2 > 1$ получаем в первом приближении типичный результат туннельного расщепления энергии

$$e_{0,1} = -\frac{a^2}{4} (1 \pm e^{-ad/2}).$$

Для трех дельта-ям непосредственное итерирование приводит к уравнению, которое разбивается на три отдельных уравнения:

$$\kappa_2 = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-2\kappa_2 d} - \frac{1}{2} \sqrt{8e^{-2\kappa_2 d} + e^{-4\kappa_2 d}} \right),$$

$$\kappa_1 = \frac{a}{2} (1 - e^{-2\kappa_1 d}),$$

$$\kappa_0 = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{1}{2} e^{-2\kappa_0 d} + \frac{1}{2} \sqrt{8e^{-2\kappa_0 d} + e^{-4\kappa_0 d}} \right).$$

При $ad > 1$ вновь получаем в первом приближении типичный результат туннельного расщепления энергии

$$e_0 = -\frac{a^2}{4} \left[1 + \sqrt{2} e^{-ad} + O(e^{-2ad}) \right],$$

$$e_1 = -\frac{a^2}{4} \left[1 + O(e^{-2ad}) \right],$$

$$e_2 = -\frac{a^2}{4} \left[1 - \sqrt{2} e^{-ad} + O(e^{-2ad}) \right].$$

При $N \rightarrow \infty$ уравнение (1.95) приводит к описанию зоны для $e < 0$ «обратной гребёнки» Дирака (рис.1-4) с законом дисперсии, который получается из формулы

$$\operatorname{ch}(\kappa d) - \frac{a}{2\kappa} \operatorname{sh}(\kappa d) = \cos(pd). \quad (1.96)$$

Еще отметим возможность построения цепочки одинаковых ячеечных потенциалов с граничным условием цикличности.

Более детальную информацию о методе матрицы связи локальных решений с многочисленными приложениями можно почерпнуть из книги [4] и сборника статей [7].

Итоговые замечания к зонам

Мы ограничились некоторыми примерами зонных моделей потенциалов из достаточно большого перечня, представленного на рисунках 1 и 2. Добавим еще несколько примеров.

1. Сначала отметим вариации на тему синусоидального потенциала. Во-первых, можно рассмотреть изменение периода и его влияние на зонную структуру. Если $u(z) = a - a \cos(2tz)$, то период $d = \pi / t$. При этом в соответствии с масштабным преобразованием в уравнении (1.1) приходим к выводу, что структура энергетического спектра будет такой, как при амплитуде a/t^2 , а энергии будут равны et^2 . Во-вторых, можно сформировать кусочно-синусоидальную модель, когда ячейки потенциала построены в виде ям: $u(z) = a - a \cos(2z), |z| \leq \pi/4$. В-третьих, аналогичный случай кусочно-синусоидального потенциала с барьерными ячейками: $u(z) = a \cos(2z), |z| \leq \pi/4$. В-четвертых, к основной синусоидальной гармонике можно добавить еще одну. Впрочем, именно это реализуется в тригонометрической форме периодического спинового потенциала (1.94).

2. Отметим периодические потенциалы с ячейками в виде четверных ям $u(z) = az^4, |z| \leq \pi/2$ и четверных барьеров $u(z) = a\pi^4/16 - az^4, |z| \leq \pi/2$.

3. Еще ряд периодических потенциалов можно реализовать на основе степеней эллиптических функций Якоби: $u(z) = a \operatorname{sn}(m|x), u(z) = a \operatorname{cn}^4(m|x)$ и т. п.

Из квантовых явлений, свойств, особенностей обнаруживаемых периодическими потенциальными системами, в первую очередь можно назвать само существование зон, т. е. полос непрерывного энергетического спектра. Далее следует отметить конечнотонность, спаривание (слипание) зон и существование точных значений граничных энергий зон в некоторых потенциальных полях, а также поведение зон в критическом диапазоне энергий. Как показали исследования конкретных периодических потенциальных моделей, применяемые приближенные методы в сочетании с численными расчетами, с достаточно большой точностью описывают характеристики зон. Многочисленные рисунки с графиками в тексте и в презентации «Зоны», а также анимационные демонстрации должны дать наглядное представление о результатах исследований. Разумеется, многие интересные аспекты зонной тематики остались за рамками наших исследований. Так, не затронуты вопросы влияния различных деформаций потенциальных ячеек, искажений периодичности, примесей, случайных формирований и т. п.

2. ВЫТЕСНЕНИЕ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

*В любом начале волшебство таится,
Оно нам в помощь, в нем защита наша.
Герман Гессе*

Вначале кратко обрисуем общую проблему существования связанных стационарных состояний (ССС).

Речь пойдет о пространственно локализованных полях притяжения, моделируемых потенциальной энергией. Возникают два вопроса. Во-первых, способна ли такая достаточно слабая область удерживать частицу и какова при этом энергия связи? Во-вторых, если при некоторых условиях СССР в слабой области притяжения нет, то каковы критические параметры этого потенциала? В каждой из указанных ситуаций имеются как качественная, принципиальная сторона, так и количественная, выражаемая конкретными формулами.

2.1. Проблема существования связанных состояний

*Аналитик радуется любой возможности
что-то прояснить или распутать.
Эдгар По*

Теоретически весьма подробно данная проблема исследована в монографии одного из авторов данной книги [15]. Причем адекватным аппаратом для изучения этого вопроса оказались интегральные уравнения, которые позволяют не только получать ответы на общие принципиальные вопросы существования и вытеснения СССР, но и выводить конкретные формулы, описывающие эти явления.

Среди важных общих вопросов, на которые даны ответы в упомянутой монографии, нужно назвать, помимо указанных, еще два: влияние вида *закона дисперсии и роль размерности пространства*. Мы же ограничимся компьютерными исследованиями данного явления на примере движения квантовых частиц с *квадратичным законом дисперсии и в одномерных* потенциальных полях.

Вначале рассмотрим случай локализованного поля притяжения, т. е. имеется в виду некая потенциальная яма. Восемь примеров подобных локализованных образований приведены на графиках рисунка 48. Они моделируются потенциалами, описываемыми кусочными функциями: кусочно-постоянной (1 – прямоугольная яма конечной глубины), кусочно-постоянно-квадратичной (2-3 – симметричная и несимметричная параболические ямки), кусочно-постоянно-линейной (4-5 – симметричная и несимметричная линейные ямки), а также экспоненциально убывающими: 6 – экспоненциальная яма и 7 – яма Экарта. Наконец, этот перечень завершает наиболее простая модель 8 – дельта-яма (условно изображенная в виде глубокой узкой воронки), передающая, однако, основные особенности изучаемого явления. Все указанные профили локализованных потенциалов объединяет одно общее свойство: соответствующая задача

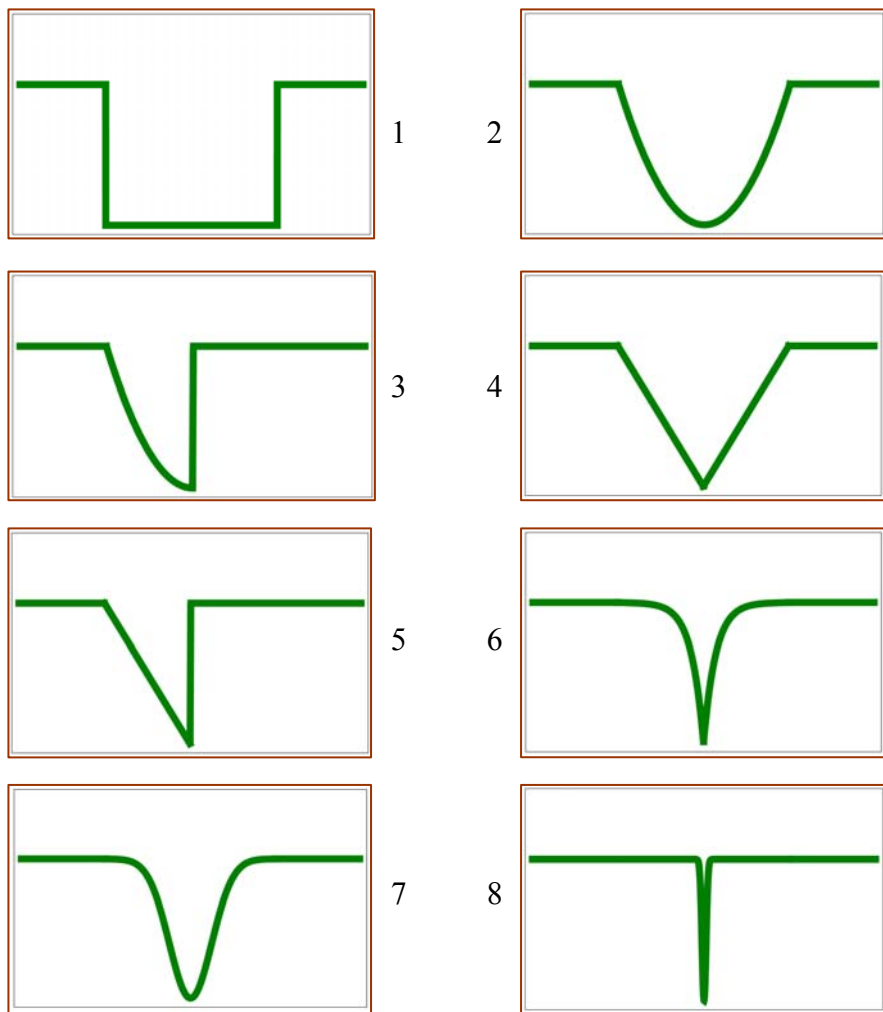


Рис.48. Некоторые локализованные формы потенциальной энергии, допускающие точное решение для связанных стационарных состояний.

допускает точное решение уравнения Шредингера для волновых функций стационарных состояний (от тригонометрических и гиперболических функций до функций Эйри, параболического цилиндра, Бесселя и гипергеометрической). Другие возможные формы локализованных потенциалов (как точно аналитически решаемые, так и допускающие только численное решение) читатель может воспроизвести сам.

Мы здесь ограничимся двумя крайними моделями из указанного перечня. Для прямоугольной одномерной потенциальной ямы глубиной u_0 и шириной d

$$u(z) = \begin{cases} 0, & z < -d/2, \\ -u_0, & -d/2 < z < d/2, \\ 0, & z > d/2 \end{cases} \quad (2.1)$$

волновая функция возможного четного связанного стационарного состояния с энергией $e < 0$ для $z < 0$ равна

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{qz}, & z < -d/2, \\ B \cos kz, & -d/2 < z < 0, \end{cases} \quad (2.2)$$

где $k = \sqrt{u_0 - |e|}$ и $q = \sqrt{|e|}$.

Простое вычисление путем сшивания волновой функции в точке скачка потенциала $z = -d/2$ дает уравнение для уровней энергии четных состояний

$$\operatorname{tg}(kd/2) = \frac{q}{k}. \quad (2.3)$$

Если в (2.3) положить $q = 0$, то это приводит к соотношению $\operatorname{tg}(\sqrt{u_0}d/2) = 0$, что невозможно для слабой ямы, когда произведение $\sqrt{u_0}d$ мало, но отлично от нуля. Значит, в как угодно слабой потенциальной яме связанное состояние существует. Что касается энергии связи, то формула для нее вытекает из того же уравнения (2.3), если считать, что $\sqrt{u_0}d \ll 1$ и $q \ll \sqrt{u_0}$. Получаем в первом приближении, что

$$q = \frac{1}{2}u_0d, \text{ или } e = -\frac{1}{4}(u_0d)^2. \quad (2.4)$$

Таким образом, в как угодно слабой (узкой или мелкой) прямоугольной потенциальной яме связанное состояние существует, а его энергия связи определяется формулой (2.4). Смысл правой части этой формулы – четверть квадрата площади, занимаемой ямой на графике зависимости потенциала от координаты. Полученный результат является общим и не зависит от формы локализованной потенциальной ямы (см. [1] и [15]). Это явление хорошо иллюстрирует модель дельта-ямы $u(z) = -a\delta(z)$, которая обладает единственным и невытесняемым связанным стационарным состоянием с точной энергией $e = -\frac{1}{4}a^2$, что как раз согласуется с формулой (2.4).

На графиках рисунков 49 и 50 представлены отдельные стадии деформаций прямоугольной потенциальной ямы с

сохранением связанного стационарного состояния. То же показывают анимации в исполняемых файлах ANIM-RECT-u0.exe, где изменяется глубина ямы, и ANIM-RECT-d.exe, где изменяется ее ширина.

2.2. Критические условия вытеснения ССС

*Проводя аналогию, нужно знать меру.
Майкл Гилберт*

Далее рассмотрим три вида ситуаций. Во-первых, случай полуограниченного движения, когда происходит перемещение границы либо возникает изменение глубины потенциальной ямы. Во-вторых, случай, когда вытеснителем выступает ступенчатый барьер бесконечной протяженности и происходит либо перемещение его границы, либо изменение его высоты, либо варьирование глубины потенциальной ямы. В-третьих, случай, когда вблизи ямы располагается барьер конечной фиксированной ширины, так что изучаемый эффект достигается за счет изменения его высоты, либо вследствие изменения глубины потенциальной ямы. Разновидностью последнего случая может служить конструкция из двух ям, разделенных барьером.

В качестве конкретных примеров рассмотрим ситуации, когда в качестве потенциальной ямы фигурирует прямоугольный потенциал либо дельта-яма, а барьером-

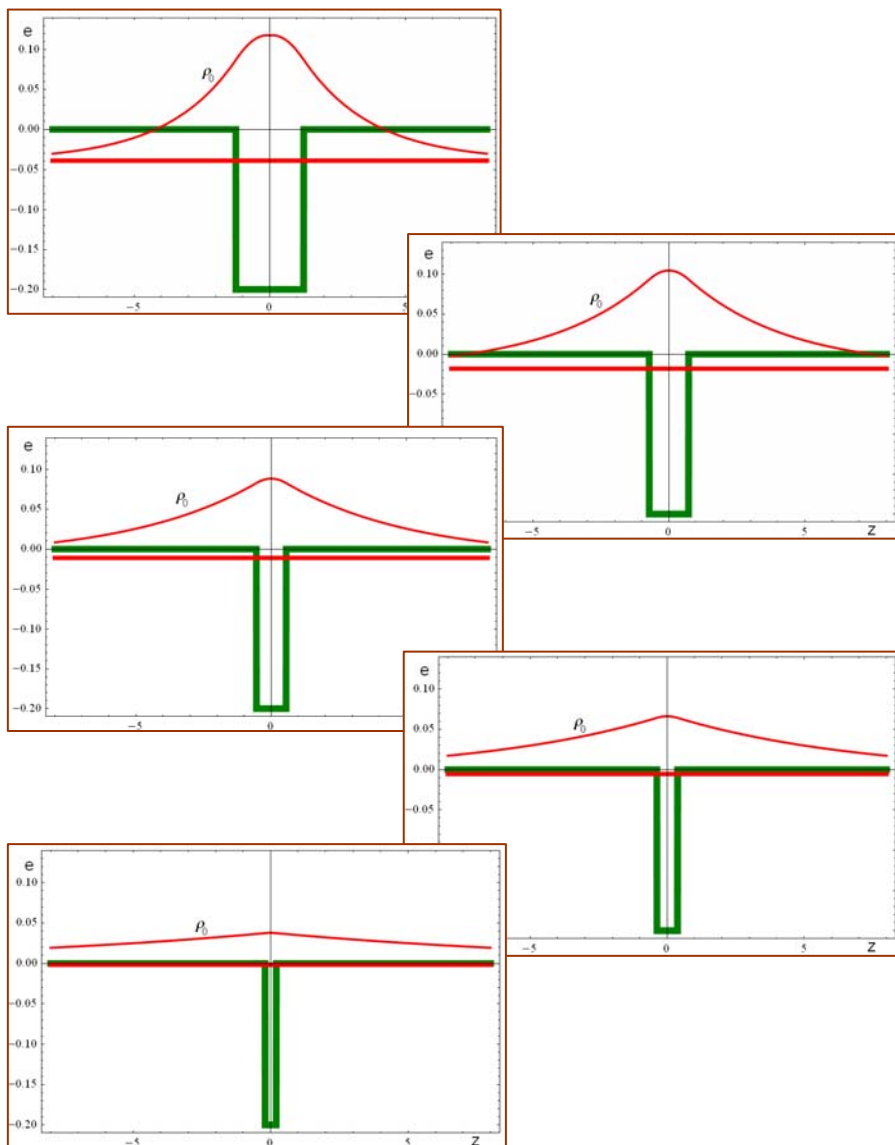


Рис.49. Отдельные стадии попыток вытеснения связанного стационарного состояния в прямоугольной яме при изменении ее ширины.

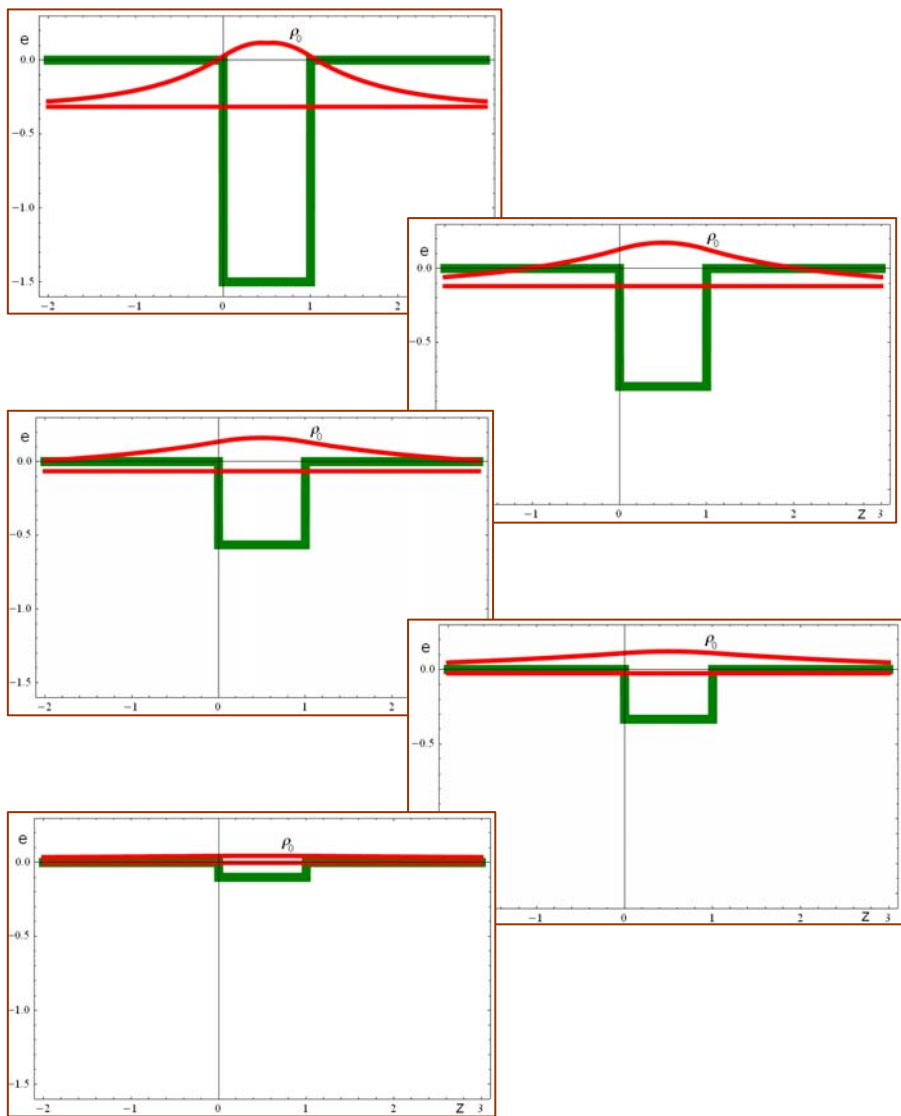


Рис.50. Отдельные стадии попыток вытеснения связанного стационарного состояния в прямоугольной яме при изменении ее глубины.

вытеснителем связанного состояния будут также прямоугольный потенциал либо дельта-барьер.

Такой выбор объясняется простотой решения задачи, чтобы не загромождать изложение более громоздкими выкладками в случае иных конструкций. В то же время, указанные простые конфигурации потенциалов в полной мере демонстрируют все особенности обсуждаемого явления – критической ситуации при вытеснении связанных стационарных состояний в случае одномерного движения квантовой частицы с квадратичным законом дисперсии.

Первый пример иллюстрируют рисунки 51 и 52. Основные «действующие лица» – прямоугольная потенциальная яма глубиной u_0 и шириной d и непроницаемая граница, расположенная у края ямы:

$$u(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ -u_0, & 0 < z < d, \\ \infty, & z > d. \end{cases} \quad (2.5)$$

Волновая функция возможного связанного стационарного состояния с энергией $e < 0$ равна

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{qz}, & z < 0, \\ Be^{ikz} + Ce^{-ikz}, & 0 < z < d, \\ 0, & z > d. \end{cases} \quad (2.6)$$

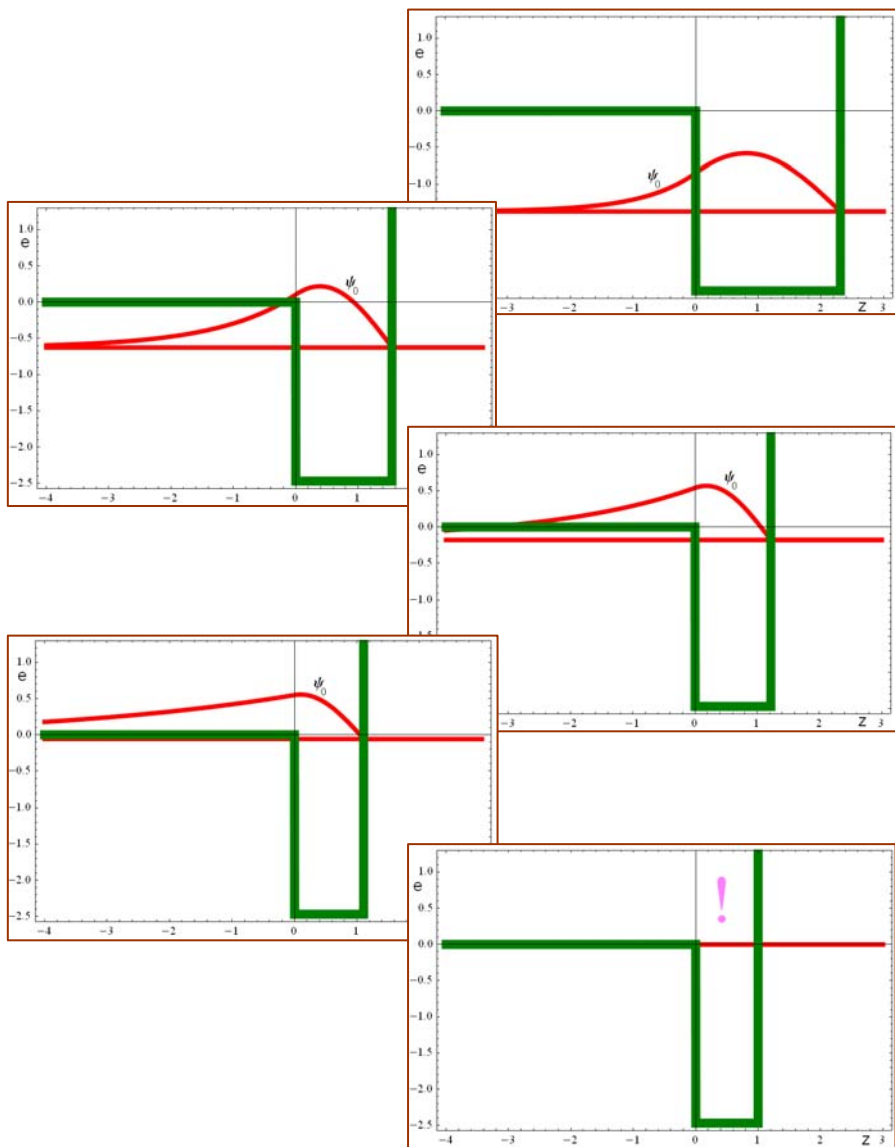


Рис.51. Отдельные стадии вытеснения связанного состояния в прямоугольной яме при смещении непроницаемой границы у ее края.

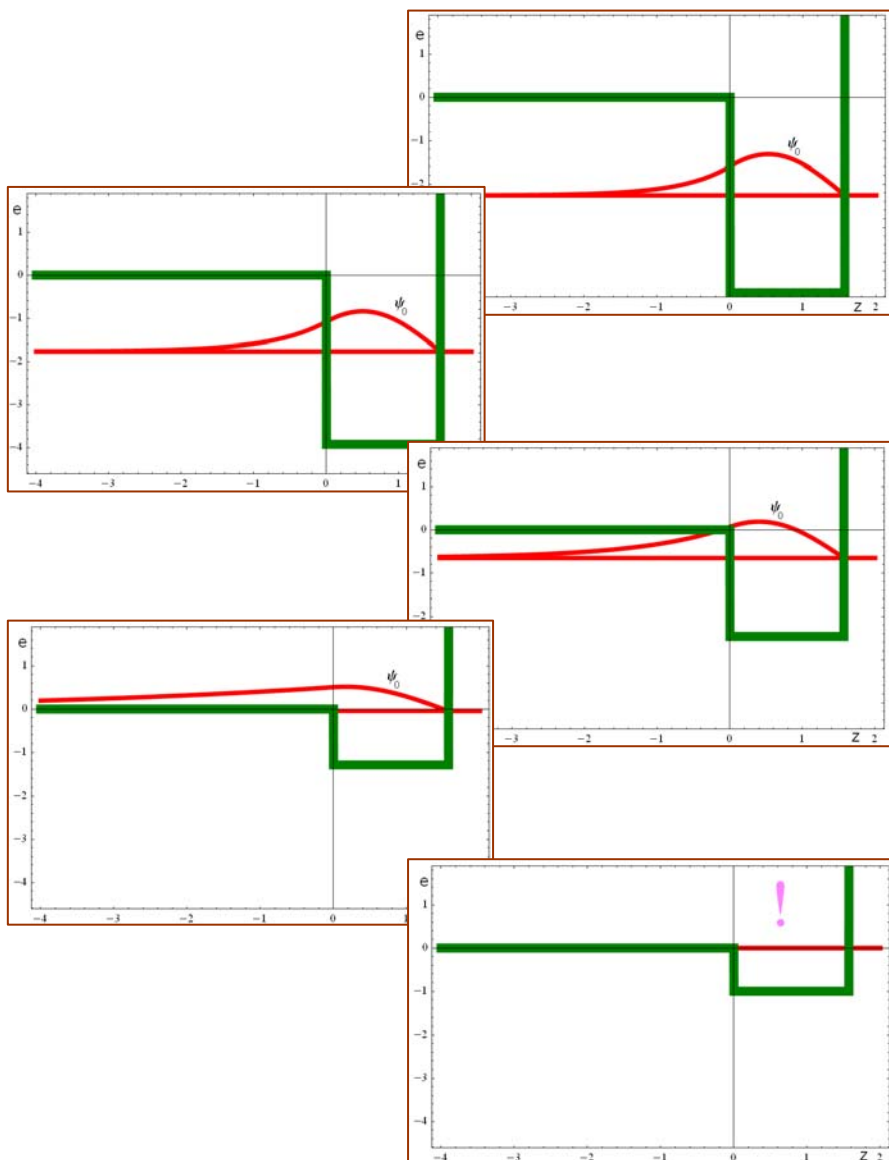


Рис.52. Отдельные стадии вытеснения связанного состояния в прямоугольной яме при изменении ее глубины.

где $k = \sqrt{u_0 - |e|}$ и $q = \sqrt{|e|}$.

Сшивание в точке $z = 0$ и обращение в нуль в точке $z = d$ дают связь ее коэффициентов $B = \frac{1}{2}A(1 + \frac{q}{ik})$ и $C = \frac{1}{2}A(1 - \frac{q}{ik})$, а также уравнение для нахождения возможных уровней энергии

$$\cos kd + \frac{q}{k} \sin kd = 0. \quad (2.7)$$

Теперь волновая функция содержит только один коэффициент A , который будет определяться из условия нормировки:

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{qz}, & z < 0, \\ A \left(\cos kz + \frac{q}{k} \sin kz \right), & 0 < z < d, \\ 0, & z > d. \end{cases} \quad (2.8)$$

Критическое условие вытеснения (или зарождения) связанных состояний вытекает из общего уравнения (2.7) при $e = 0$ и имеет вид

$$\cos(\sqrt{u_0}d) = 0, \quad (2.9)$$

так что

$$\sqrt{u_0}d = \frac{\pi}{2} + \pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

В частности, в достаточно слабой ямке (узкой или мелкой) впервые связанное состояние появляется при

$$u_0 = \frac{\pi^2}{4d^2}. \quad (2.11)$$

В общем же случае из соотношения (2.10) вытекают правила квантования критических параметров ямы: для глубин имеем серию критических величин при фиксированной ширине

$$u_0^{(n)} = \frac{\pi^2}{4d^2} (2n+1)^2, n = 0, 1, \dots, \quad (2.12)$$

а для ширин аналогичную серию при постоянной глубине

$$d^{(n)} = \frac{\pi}{2\sqrt{u_0}} (2n+1), n = 0, 1, \dots \quad (2.13)$$

В формулах (2.12) и (2.13) при $n = 0$ получаются правила для вытеснения (или возникновения) основного связанного состояния, при $n = 1$ – то же для первого возбужденного состояния и т. д.

Анимационная демонстрация в исполняемом файле ANIM-CRITICAL-STATES-1.exe показывает развитие ситуации с передвижением непроницаемой границы, т. е. при изменении ширины ямы. То же делает анимация ANIM-CRITICAL-STATES-2.exe при изменении ее глубины.

Добавим, что возможен еще один вариант с данными объектами: непроницаемая граница может находиться и в удалении от ямы, т. е. вводится еще один параметр – расстояние между ямой и непроницаемой границей. В данной конфигурации оставим этот пример для самостоятельного изучения читателем. Мы же проиллюстрируем такую ситуацию далее на примере с дельта-ямой интенсивностью a и

непроницаемой границей, расположенной на расстоянии b от ямы:

$$u(z) = \begin{cases} -a\delta(z), & z < b, \\ \infty, & z > b. \end{cases} \quad (2.14)$$

Волновая функция возможного связанного стационарного состояния с энергией $e < 0$ равна

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{qz}, & z < 0, \\ Be^{qz} + Ce^{-qz}, & 0 < z < b, \\ 0, & z > b, \end{cases} \quad (2.15)$$

где $q = \sqrt{|e|}$. Сшивание в точке $z = 0$ (с учетом дельта-особенности) и обращение в нуль в точке $z = b$ дают связь коэффициентов $B = A(1 - \frac{a}{2q})$ и $C = A\frac{a}{2q}$, а также уравнение

для нахождения возможного уровня энергии

$$q = ae^{-qd} \operatorname{sh}(qb). \quad (2.16)$$

Волновая функция с нормировочным коэффициентом A

имеет вид

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{qz}, & z < 0, \\ A[e^{qz} - \frac{a}{q} \operatorname{sh}(qz)], & 0 < z < b, \\ 0, & z > b. \end{cases} \quad (2.17)$$

Если непроницаемая граница удаляется при фиксированной интенсивности дельта-потенциала a , т. е. $b \rightarrow \infty$, то $q \rightarrow a/2$ и уровень энергии близок к находящемуся в изолированной дельта-яме: $e \rightarrow -a^2/4$. Если непроницаемая граница

приближается к дельта-яме, то существует некоторое критическое расстояние $b = 1/a$, при котором связанное состояние вытесняется, т. е. $e = 0$. На рисунке 53 показаны отдельные стадии этого явления. Другое развитие событий: если зафиксировать положение непроницаемой границы b , то уменьшением интенсивности дельта-ямы до критического значения $a = 1/b$ можно добиться вытеснения связанного состояния.

Анимационная демонстрация в исполняемом файле ANIM-CRITICAL-STATES-3.exe показывает развитие ситуации с передвижением непроницаемой границы.

Случай вытеснения связанного стационарного состояния в прямоугольной яме на границе двух сред, т. е. при наличии ступенчатого барьера бесконечной протяженности, оставим читателю для детального аналитического расчета. Анимационная демонстрация в исполняемом файле ANIM-CRITICAL-STATES-4.exe показывает развитие ситуации с возрастанием высоты такого прямоугольного ступенчатого барьера бесконечной ширины.

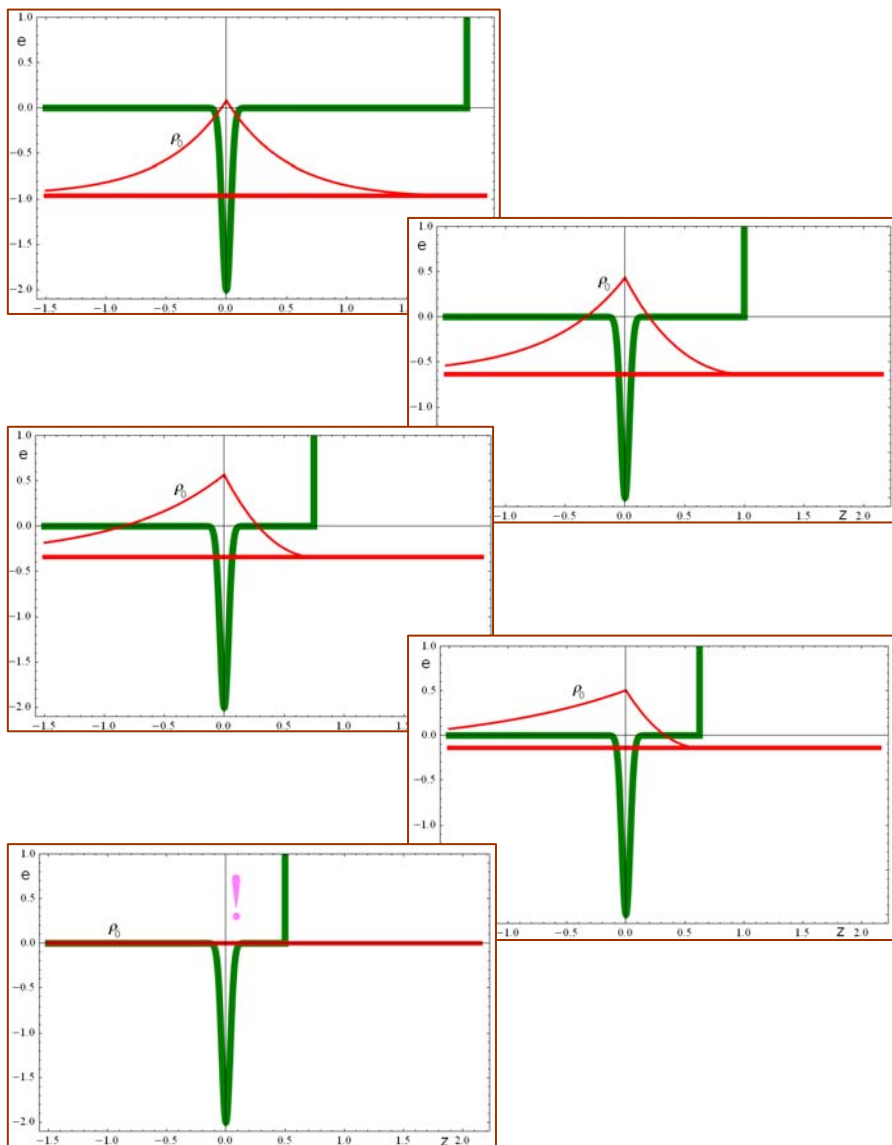


Рис.53. Отдельные стадии вытеснения связанного состояния в дельта-яме при изменении положения непроницаемой границы.

Мы перейдем к еще одной ситуации с вытеснением связанного состояния, когда вытеснителем служит барьер конечной протяженности, но проиллюстрируем это явление на примере двух дельта-потенциалов, а другие варианты оставим читателю.

$$u(z) = -a\delta(z) + b\delta(z-d) \quad (2.18)$$

В таком случае потенциал состоит из дельта-ямы интенсивностью a в начале координат и дельта-барьера интенсивностью b , расположенного на расстоянии d от ямы. Перейдем сразу к решению вопроса об энергии $e < 0$ и критических параметрах, не останавливаясь на расчете волновой функции. Это позволяет сделать метод оператора перехода через систему локализованных потенциалов (см. в конце раздела о зонах). В нашей конфигурации из двух дельта-потенциалов он равен произведению соответствующих операторов перехода через яму $\hat{G}^{(a)}$ и барьер $\hat{G}^{(-b)}$

$$\hat{G} = \hat{G}^{(a)} \hat{G}^{(-b)}. \quad (2.19)$$

Явный вид матричных элементов для ямы таков:

$$\begin{aligned} G_{11}^{(a)} &= \left(1 + \frac{a}{2q}\right) e^{-qd}; G_{12}^{(a)} = \frac{a}{2q}; \\ G_{21}^{(a)} &= -\frac{a}{2q}; G_{22}^{(a)} = \left(1 - \frac{a}{2q}\right) e^{qd}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где $q = \sqrt{|e|}$.

Для барьера получаются аналогичные выражения с заменой a на $-b$. Характеристическое уравнение $G_{22} = 0$, записанное через параметры потенциалов, приводится к виду

$$q^2 - \frac{a-b}{2}q - \frac{ab}{4}(1 - e^{-2qd}) = 0. \quad (2.21)$$

Отсюда вытекает соотношение для критических параметров вытеснения связанного состояния: $q = 0$ при условии $b > a$ и

$$d = \frac{b-a}{ab}. \quad (2.22)$$

Если $d > 1/a$, то даже при как угодно большой интенсивности b выталкивателя связанное состояние будет сохраняться.

Другие детали поведения связанного состояния в системе потенциалов (2.18) также получаются из уравнения (2.21), хотя нельзя забывать, что это «не совсем квадратное» уравнение, поскольку искомая величина q содержится также и в экспоненте.

Серия графиков на рисунке 54 показывает этапы вытеснения связанного состояния в данной системе δ -потенциалов. Как и в других случаях, δ -функции изображаем в виде достаточно узких воронок (или всплесков), глубина (или высота) которых пропорциональна интенсивности данного поля a (или b). Анимационная демонстрация

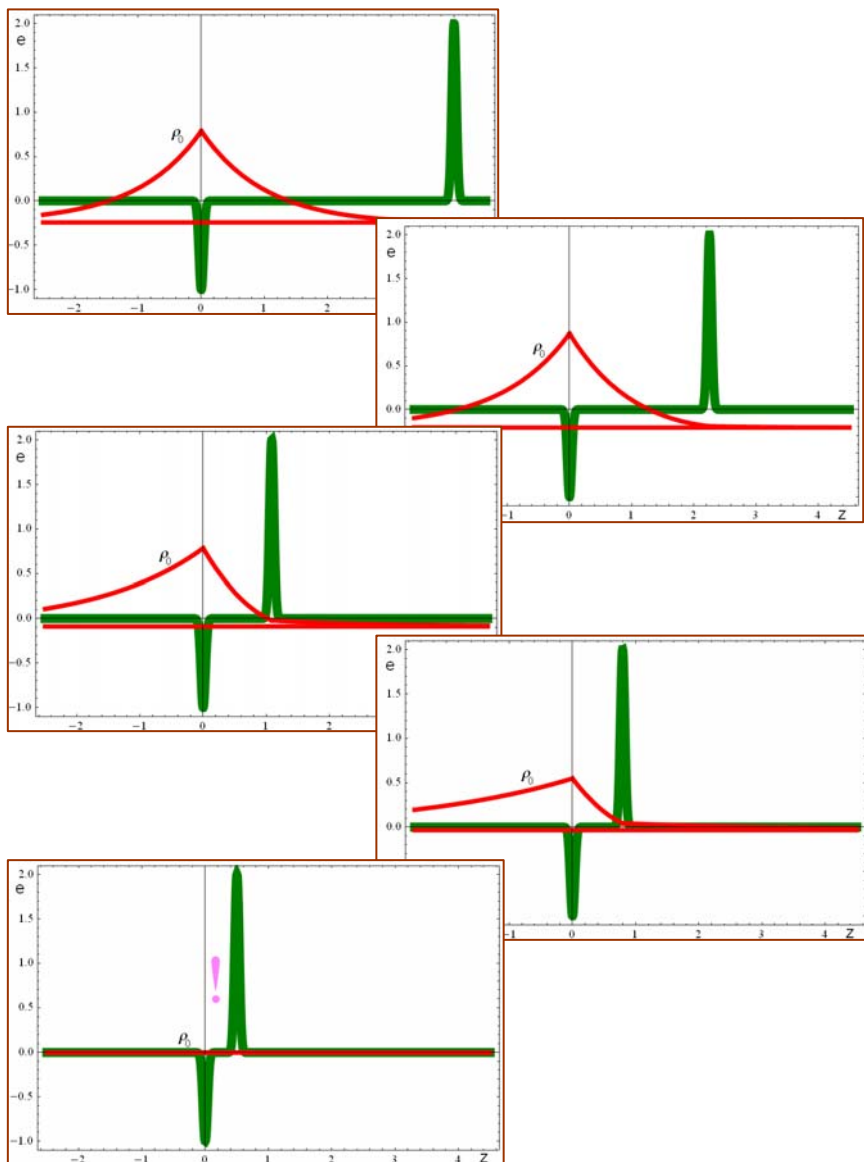


Рис.54. Отдельные стадии вытеснения связанного состояния в дельта-яме при приближении дельта-барьера.

ANIM-CRITICAL-STATES-5.exe также посвящена этой ситуации.

Наконец, рассмотрим еще один пример с вытеснением ССС, когда вытеснитель располагается между двумя областями притяжения. Ограничимся конструкцией с δ -потенциалами

$$u(z) = -a\delta(z) + b\delta(z-d) - a\delta(z-2d). \quad (2.23)$$

В этом случае также удобен метод оператора перехода через особенности поля. Опуская вычислительные детали, отметим, что при достаточно большом расстоянии $d > 1/a$ между δ -ямами в такой системе будут два уровня энергии e_0 и e_1 за счет расщепления уровня в отдельной ямке. При этом вытеснитель ни при какой величине интенсивности b не сможет выполнить своего предназначения, поскольку именно в точке его расположения волновая функция первого возбужденного состояния имеет узел. Его влияние будет сводиться лишь к попыткам воздействия на основной уровень энергии: e_0 будет сдвигаться, приближаясь к e_1 , но вытеснить его не получится, так как уровень энергии первого возбужденного состояния e_1 не сдвигается. Получается любопытное явление *блокировки вытеснения*. Разумеется, если $d < 1/a$, то в данной конфигурации остается только основное состояние и один уровень энергии, так что ничто не мешает вытеснителю

добиться желанного лишения системы этих потенциалов каких-либо ССС при критическом значении интенсивности

$$b = \frac{2a}{1-ad}. \quad (2.24)$$

Для демонстрации этих двух ситуаций созданы две анимации. В исполняемом файле ANIM-CRITICAL-STATES-6-1.exe в системе потенциалов имеется только один уровень энергии, так как $d < 1/a$, и барьеру удастся его вытеснить. В исполняемом файле ANIM-CRITICAL-STATES-6-2.exe в системе потенциалов при $d > 1/a$ имеются два уровня энергии, так что увеличение барьера сдвигает только основной уровень, притискивая его к возбужденному, но никак не лишая систему не только основного, но даже возбужденного состояния.

Рисунки 55-56 содержат примеры различных конфигураций потенциалов для моделирования исследуемого явления вытеснения ССС. Предоставляем изучать возникающие ситуации в таких потенциальных полях любознательному читателю.

Напоминаем, что все упомянутые анимационные исполняемые файлы содержатся на прилагаемом компакт-диске, где также имеются соответствующая презентация и электронная версия данной книги с цветными иллюстрациями.

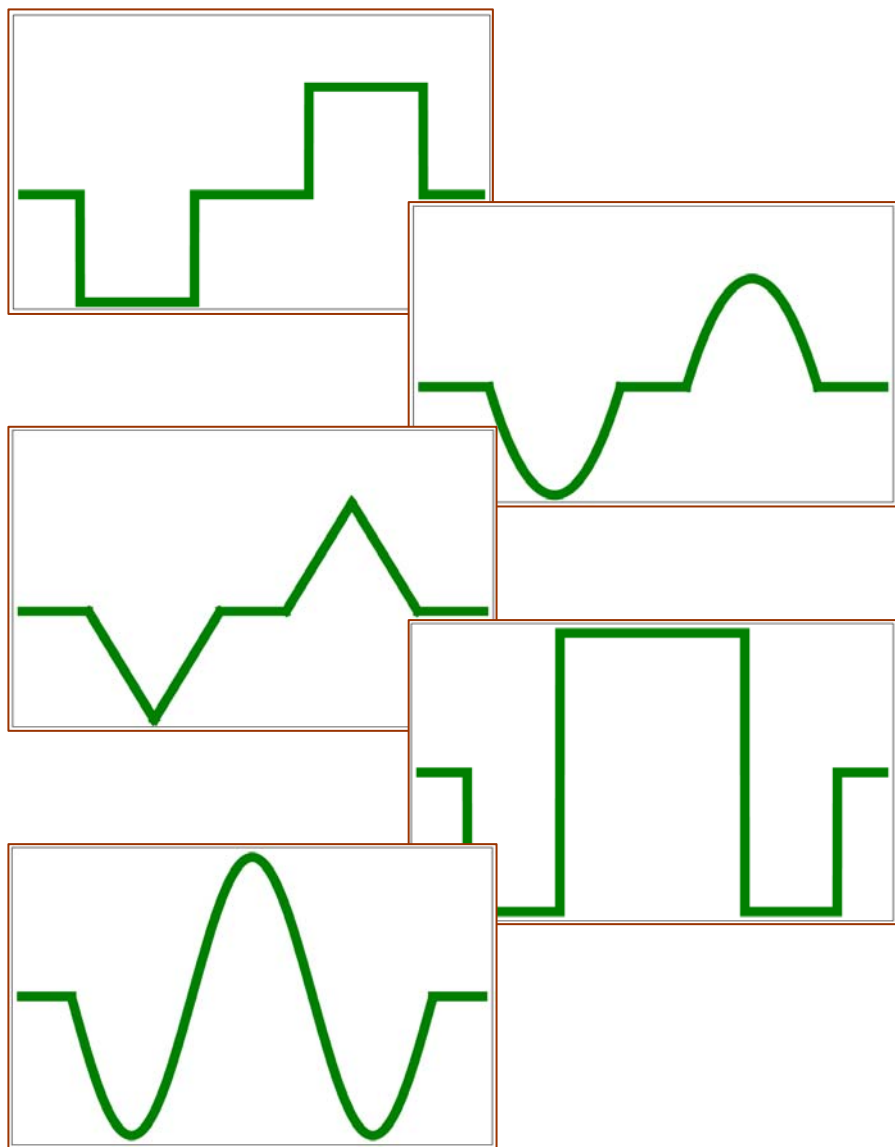


Рис.55. Некоторые формы потенциалов для исследования вытеснения связанных состояний.

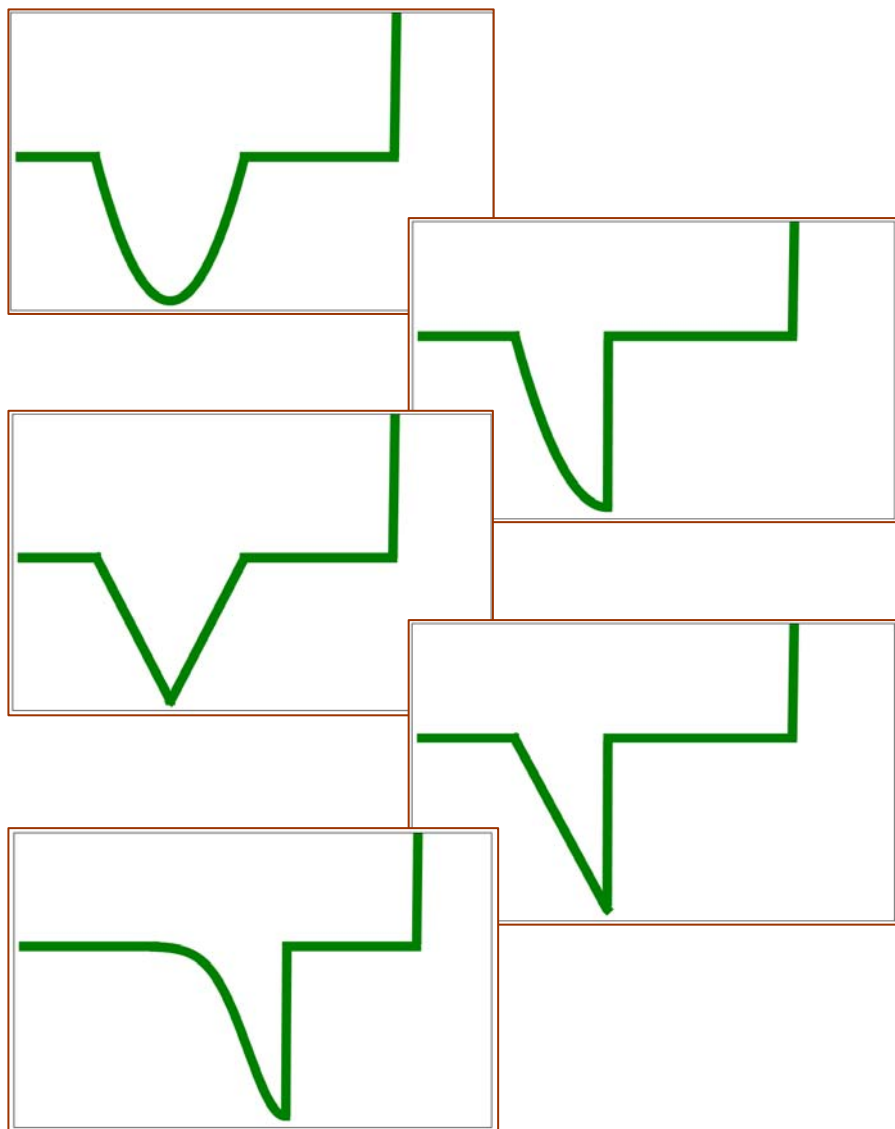


Рис.56. Некоторые формы потенциалов для исследования вытеснения связанных состояний.

2.3. Общие итоговые замечания

*Шагать вперед, идти от дали к дали,
Все шире быть, все выше подниматься.
Герман Гессе*

В заключение добавим небольшие выдержки из раздела о проблеме существования локальных связанных состояний в уже упоминавшейся монографии [15].

Почему существенна размерность пространства? Какие еще факторы способны «вмешаться» в процесс формирования связанных состояний? Каков критерий появления локальных связанных состояний? Как найти критические параметры полей? Каким образом изменяется энергия связи? Какими явлениями сопровождается появление каждого нового связанного состояния? Каковы адекватные квантово-теоретические методы исследования проблемы? Для чего нужно изучать эту проблему? Эти и многие другие вопросы возникают при анализе данной проблемы. Подчеркнем, что речь идет о чисто квантовом явлении, постольку согласно классической механике даже очень слабое поле притяжения приводит к образованию связанных состояний при любых условиях. Простейшие сведения о проблеме мы находим в книгах по квантовой механике. Обычно подчеркивается, что в одномерном случае даже в слабом поле всегда существует хотя бы одно связанное состояние, а в трехмерном отмечается отсутствие связанных состояний в достаточно слабом поле. Наиболее четкая формулировка результатов для простых случаев локализованных полей притяжения дана в книге Ландау и Лифшица [1].

Можно выделить два главных момента: образование новой сущности, нового качества при захвате частиц областью притяжения и резко выраженный резонансный характер рассеяния медленных частиц в критических условиях зарождения связанных состояний. При этом устойчивость возникающего нового физического объекта определяется в первую очередь величиной энергии связи, т. е. энергетической щелью между «отколовшимся» уровнем финитного движения и непрерывной частью энергетического спектра, отвечающего диссоциации системы. С другой стороны, большое значение имеет делокализация частицы в слабосвязанном состоянии, когда движение происходит далеко за пределами области притяжения за счет проникновения в классически недоступную область. Такое состояние обладает очень большими эффективными размерами, повышенной чувствительностью к воздействию на больших расстояниях, к взаимному «перекрыванию» с другими аналогичными объектами. Кроме того, чем слабее связь, тем сильнее резонирующее действие. Тем самым особый интерес представляет задача создания критической ситуации в таких системах, где обычно она не возникает (например, в эффективно одномерных ветвях движения), выяснения, какие факторы способны ослабить связь и даже вытеснить связанное состояние. Речь идет о влиянии граничных условий, дополнительных областей эффективного отталкивания, нелокальностей поля, вида закона дисперсии и т. п. Как будет видно,

пороговое явление вытеснения связанных состояний может возникнуть и в одномерном случае. Так расширяется диапазон задач с исследованием критических свойств локальных связанных состояний. Заметим, что термины, связанные с понятием «локализованный», «локализация», «локальный», отражают различные аспекты пространственного описания. Во-первых, локальный потенциал описывает поле, сосредоточенное либо вблизи некоторой точки пространства (трехмерная локализация), либо в окрестности некоторой плоскости (одномерная локализация в плоскостной среде), либо около оси (двумерная локализация). Считается, что оно резко обрывается за пределами сравнительно малой области пространства соответствующей размерности, хотя во многих случаях требуется лишь достаточно быстрое убывание поля. Потенциальное поле моделирует неоднородности пространства, локализованные области притяжения и отталкивания, образуя системы ям и барьеров. Во-вторых, локальные связанные состояния названы так в противовес зонному характеру энергетического спектра, а также в отличие от состояний, «размазанных» за счет переноса системы как целого (например, электрон связан с ядром, но может передвигаться вместе с ним при перемещениях атома). В-третьих, локальность операторов потенциальной энергии, которые считаются функциями координат и вследствие этого в координатном представлении их действие на волновую функцию сводится к умножению на значение потенциала в точке, соответствующей аргументу функции.

Локальные связанные состояния возникают вблизи областей притяжения как в случае локальных полей типа одной или нескольких потенциальных ям и барьеров, так и нелокальных – перепад значений потенциала на границе двух сред, полуограниченное движение и пр. Для них характерно соприкосновение с непрерывной частью энергетического спектра, соответствующей в одномерном случае либо инфинитному движению с двукратным вырождением энергии, либо полуфинитному движению с отражением без вырождения, либо зонной полосе разрешенных значений энергии для периодического поля. При этом уровни энергии связанных состояний могут быть вытеснены в непрерывную область энергетического спектра. В случае же чисто финитного движения энергетический спектр состоит только из дискретных уровней энергии, все состояния являются связанными. Фактически это лишь математические модели реальных физических ситуаций, приближенно описываемых в некоторой области пространства и значений энергии нелокальными полями с бесконечными асимптотическими значениями во всех направлениях или для одной из ветвей движения. Общие соображения подсказывают, что существует противодействие тенденции локализовать частицу в координатном пространстве в силу соотношения неопределенностей. Оно может привести к столь большому увеличению неопределенности импульса и средней кинетической энергии, что переводит состояние в область непрерывного спектра. Однако при таком рассуждении, во-первых, не учитывается эффект проникновения в подбарьерную область движения, а во-вторых, это есть лишь наводящее соображение о причине возможной несостоятельности области эффективного притяжения, ничего не говорящее о фактической ситуации в случае той или иной размерности пространства. Можно полагать, что в случае трех измерений «поджатие» частицы при попытке ее локализовать происходит с трех сторон и, вопреки эффекту

просачивания за пределы классически доступной области, все же удается заставить частицу локализоваться настолько, что она «вырывается» в область непрерывного спектра энергии (усиленная локализация доводится до крайности и приводит к своей противоположности – к делокализации). Критические условия при этом служат границей, мерой, порогом равновесия различных тенденций: локализующего действия потенциала, которому противостоит конкуренция подбарьерного просачивания и соотношение неопределенностей, и делокализующего действия большей размерности пространства. Образно говоря, в трехмерном случае есть слишком много направлений для рассасывания устойчивого образования, для утечки частицы, слишком много возможностей разрушить локализацию, расплескать связанное состояние. Сказанное, конечно, есть лишь попытка представить себе относительное влияние размерности пространства. Все же общая тенденция делокализации с увеличением размерности пространства должна сохраняться для каждой фиксированной формы закона дисперсии.

Отметим еще один качественный подход к объяснению возникающих явлений. Рассмотрим свойства непрерывной части энергетического спектра до «включения в игру» вызывающего связующий эффект потенциала. Можно предположить, что в случае достаточно большой плотности состояний на границе сплошного спектра энергии (как это имеет место в одномерном движении с обычным законом дисперсии) отклик системы на внешнее воздействие в виде области эффективного притяжения позволит «утащить» одно состояние. В случае же незначительной плотности состояний (как в трехмерном движении) для этого потребуется существенно большее усилие, большее критическое значение поля. Впрочем, такие рассуждения справедливы для локальных полей (это, как мы увидим, подтверждается количественным анализом), а для нелокальных полей необходимо принимать во внимание взаимодействие появляющегося состояния с окружением, а не только с континуумом: нельзя пользоваться невозмущенной картиной. Например, непроницаемая граница, фактически не изменяя плотности состояний, вступает в контакт с возникающим состоянием, уменьшая энергию связи. То же относится и к областям отталкивания локального типа.

Перейдем к общей проблеме существования связанных стационарных состояний частицы, движущейся в локальном поле притяжения в случае n -мерного пространства и некоторого закона дисперсии $H_0 = T(\vec{p}) \dots$

Так, если при малых энергиях плотность состояний имеет степенную зависимость $\nu(\mathcal{E}) \sim \mathcal{E}^{\alpha-1}$, критерий существования связанных состояний имеет вид $\alpha \leq 1$. При $\alpha > 1$ связанное состояние появляется только при критической величине поля. Например, для l -степенного закона дисперсии $T(\vec{p}) \sim |\vec{p}|^l$ в n -мерном пространстве $\alpha = n/l$, так что связанные состояния в слабом поле существуют при $n \leq l$. В частности, для квадратичного закона дисперсии приходим к известному условию $n \leq 2$: как угодно слабые одно- и двумерные поля притяжения способны удерживать частицу в связанном состоянии.

3. РАССЕЙЯНИЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

*Вот ближе, ближе...сердце бьется...
Но мимо, мимо звук несется,
Слабей... и смолкнул за горой...*

А.С.Пушкин

Вначале рассмотрим ситуации, когда рассеивателями являются одиночные барьеры. Во-первых, это могут быть

степенные нелокализованные потенциалы вида $u(z) = -|z|^{\nu}$

среди которых есть две модели с точными решениями: линейная и квадратичная (к ним можно добавить и соответствующие несимметричные – как одностепенные, так и разностепенные).

На рис.57 представлены 12 моделей таких идеализированных нелокализованных потенциальных барьеров: половинная, линейная, квадратичная, кубическая, четверная, пятерная, шестерная, линейная несимметричная, квадратичная несимметричная, четверная несимметричная, квадратично-линейная и квадратично четверная. Во-вторых, локализованные барьеры (с точными решениями и без оных), т. е. барьеры, расположенные на конечном интервале, за пределами которых движение является свободным. На рис.58 приведены 8 примеров таких моделей: дельта-барьер (условно изображаемый неким узким всплеском), квадратичный (параболический), полуквадратичный (со скачком), кусочно-квадратичный (с изломной вершиной), линейный, полулинейный, четверной и прямоугольный. В третьих, еще 8 моделей потенциальных

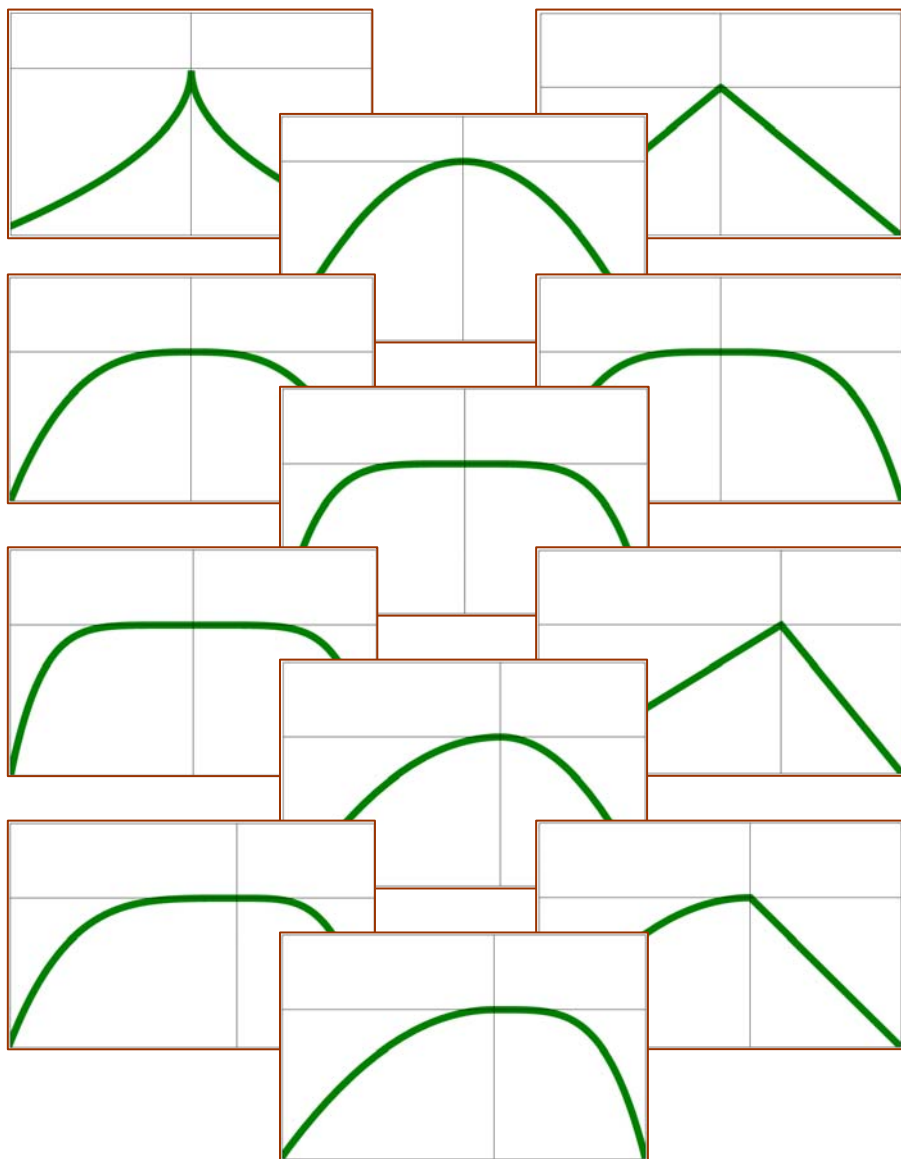


Рис.57. Некоторые примеры степенных потенциальных барьеров для исследования процесса рассеяния квантовых частиц.

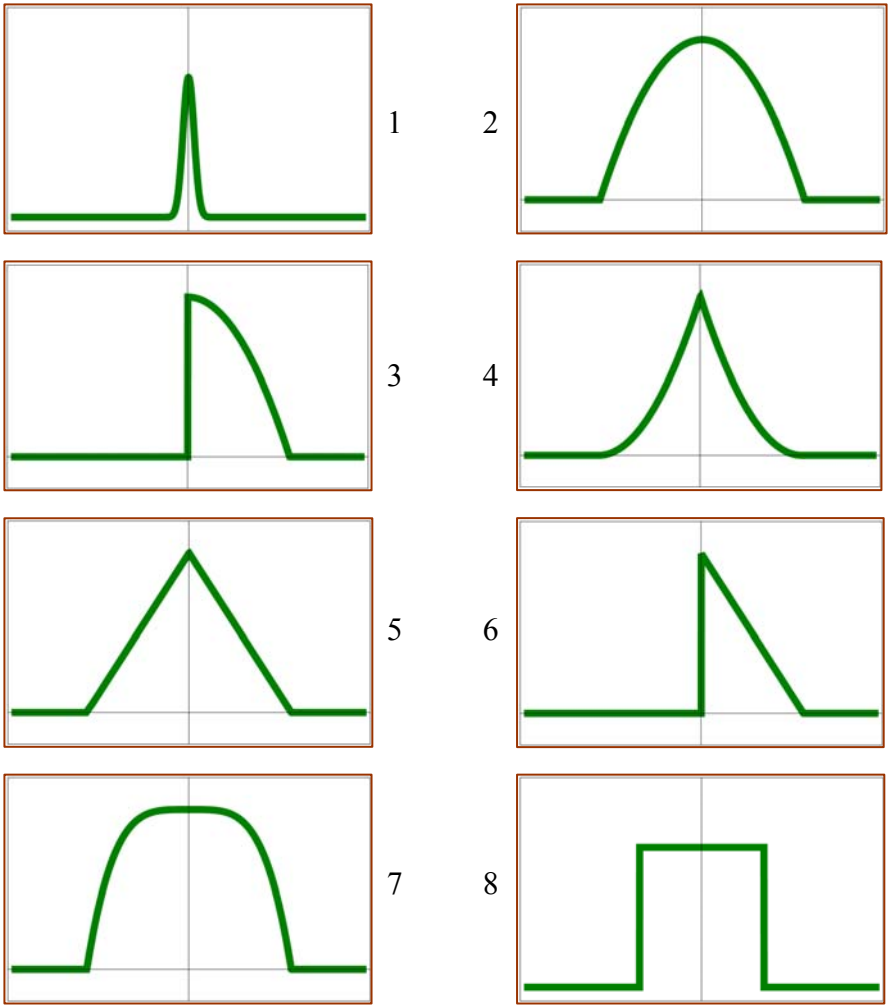


Рис.58. Некоторые примеры одиночных потенциальных барьеров на конечном интервале для исследования процесса рассеяния квантовых частиц.

барьеров с плавным убыванием, контуры которых можно видеть на рис.59: гауссиан и 4-гауссиан (с четверной вершиной), а также модели Лапласа (с изломной линейной вершиной), Коши-Лоренца, 4-Коши-Лоренца, Ферми, Морса и Экарта.

Далее в качестве рассеивателей могут выступить одиночные потенциальные ямы. На рис.60 представлены 8 видов локализованных, т. е. расположенных на конечном интервале, потенциальных ям: дельта-яма (условно изображаемая узким всплеском), квадратичная (параболическая), полуквадратичная (со скачком), кусочно-квадратичная (с изломным дном), линейная, полулинейная, четверная и прямоугольная. К ним добавляем еще 8 моделей потенциальных ям с плавным убыванием на рис.61: гауссиан и 4-гауссиан (с четверным дном), а также модели Лапласа (с изломным линейным дном), Коши-Лоренца, 4-Коши-Лоренца, Ферми, Морса и Экарта.

Затем рассеяние можно исследовать на примерах более сложных образований, к которым относятся потенциальные ямы солитонного происхождения, которые для краткости будем именовать солитонными. На рис.62 показаны некоторые виды таких солитонных формирований. Наконец, рассеиватели могут состоять из нескольких областей неоднородности в виде барьеров и ям.

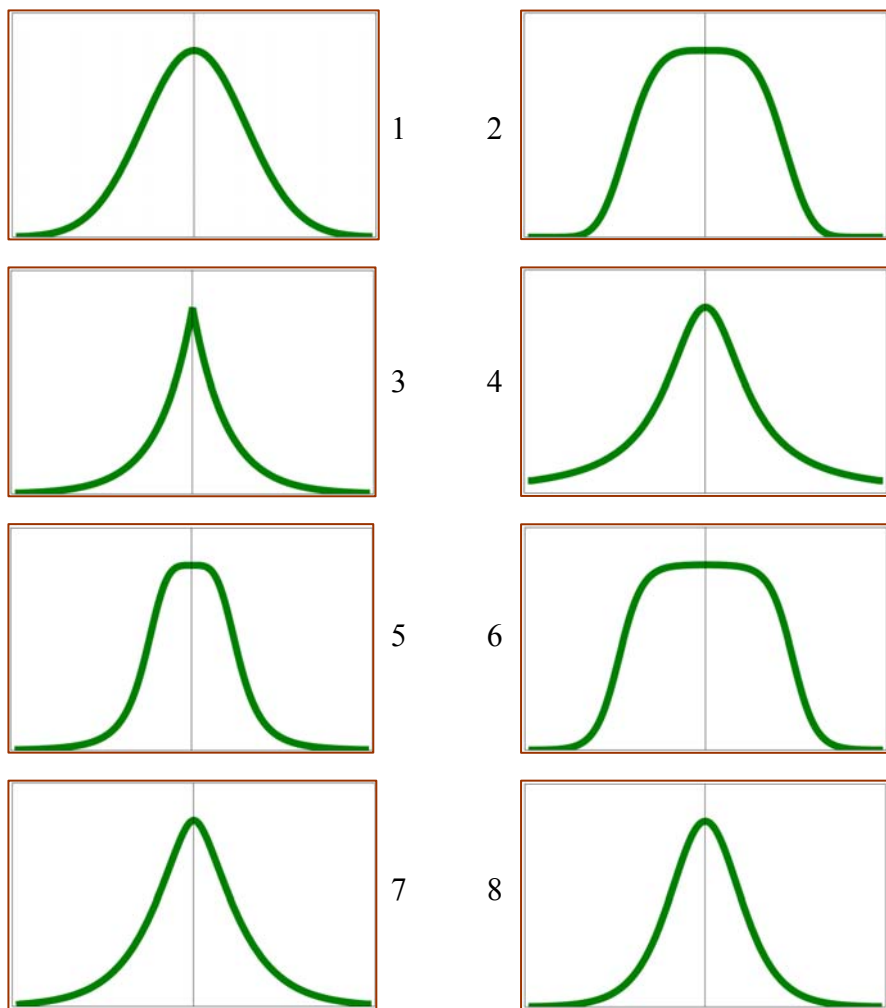


Рис.59. Некоторые примеры одиночных потенциальных барьеров на бесконечном интервале для исследования процесса рассеяния квантовых частиц.

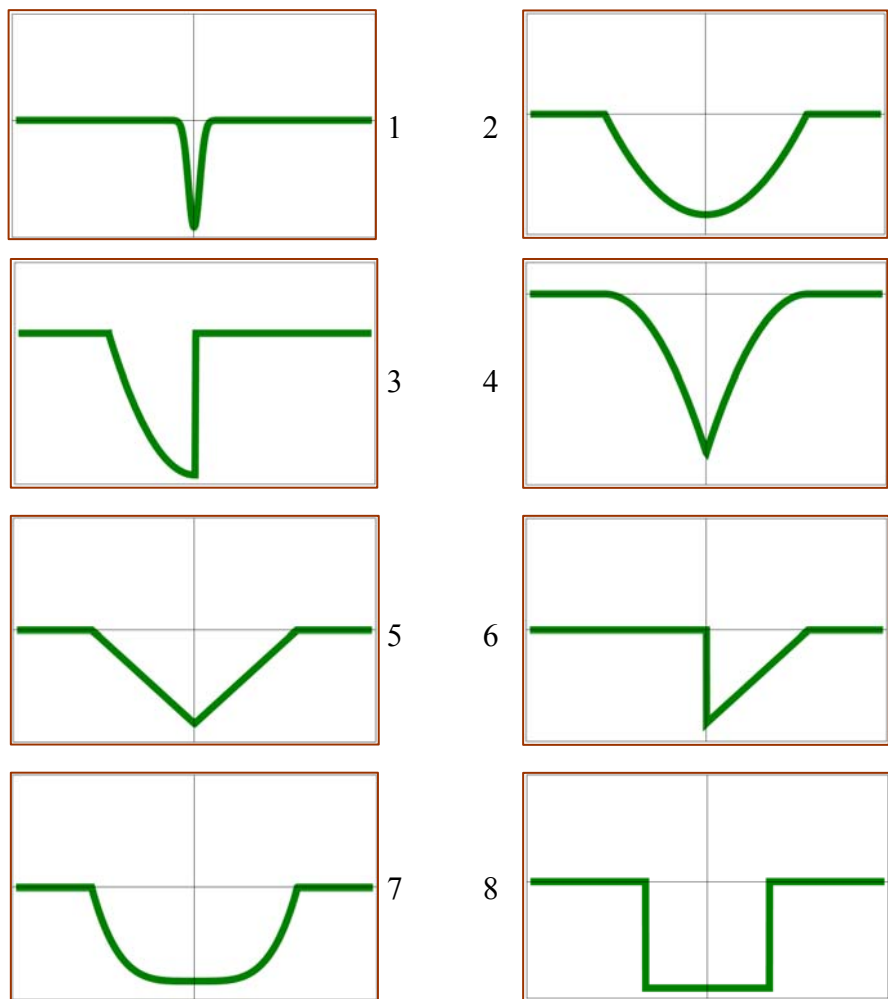


Рис.60. Некоторые формы потенциальных ям на конечном интервале.

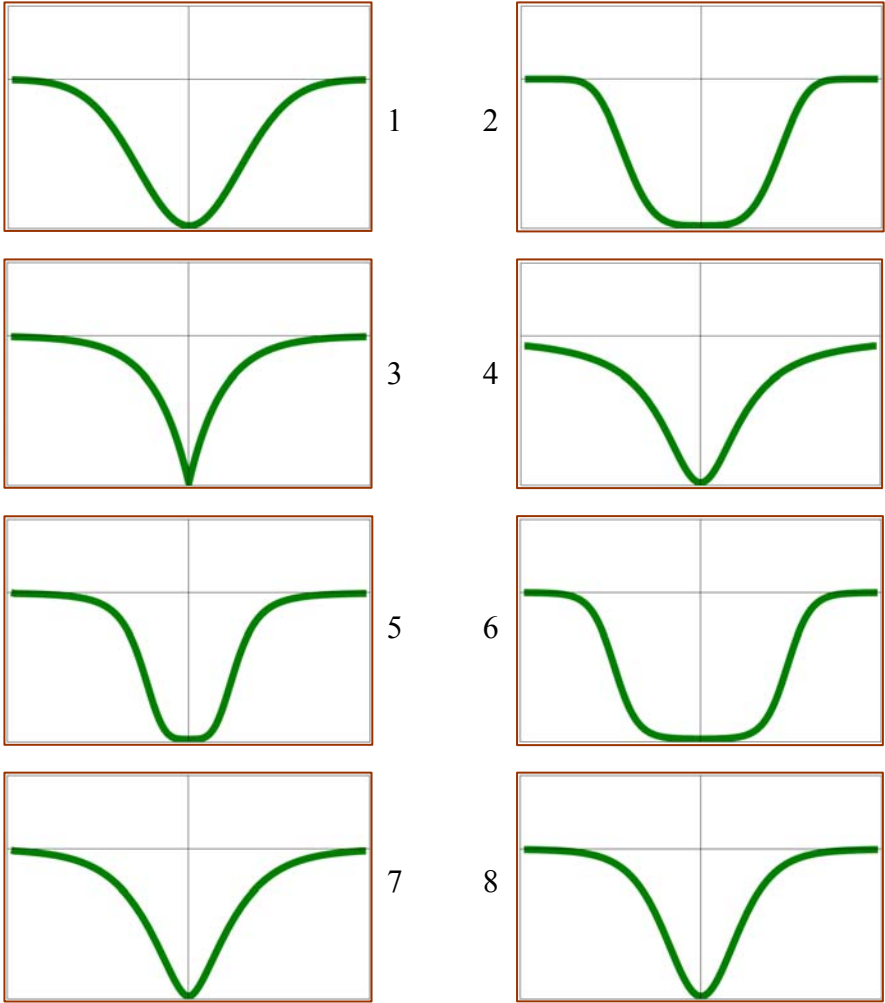


Рис.61. Некоторые формы потенциальных ям на бесконечном интервале.

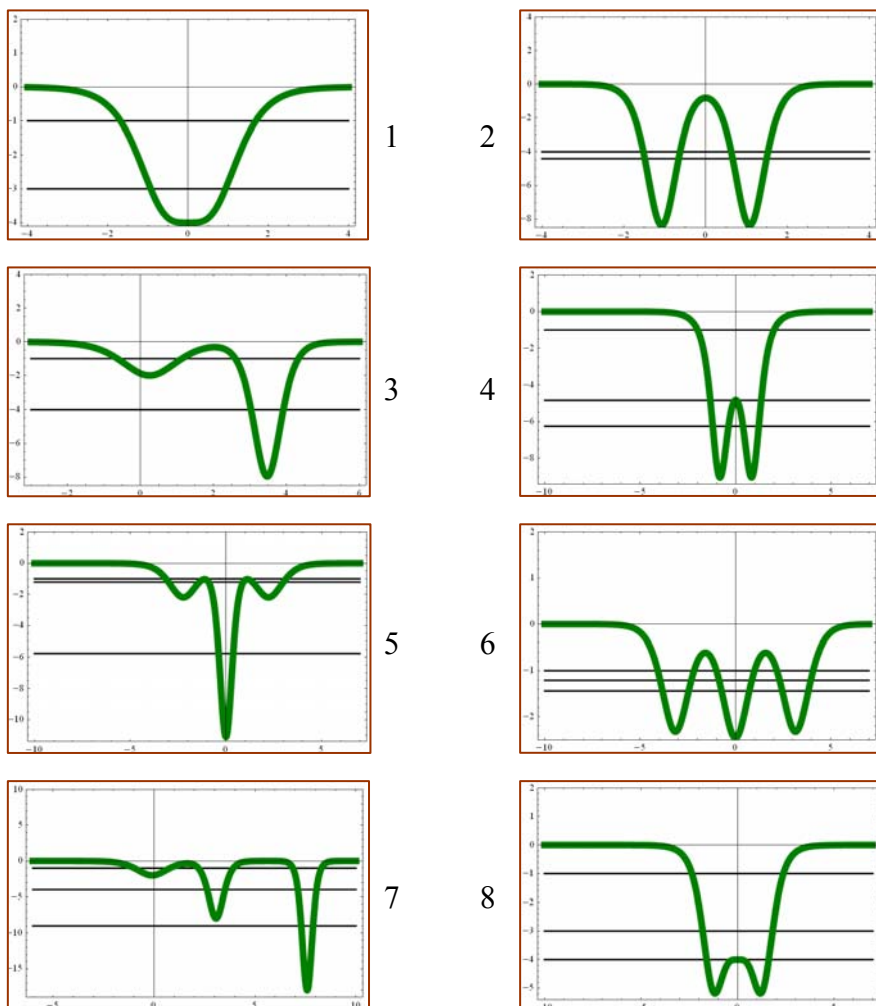


Рис.62. Некоторые солитонные профили безотражательных потенциальных ям с уровнями энергии: 1-3 – двухсолитонные, 4-8 – трехсолитонные.

Что касается конкретных квантовых явлений, свойств, особенностей, проявляемых при рассеянии, то отметим, во-первых, *туннелирование*, приводящее к просачиванию потока частиц сквозь барьеры, а также *надбарьерное и надъямное отражения*. К ним следует добавить наличие особого переходного *критического* диапазона энергий вблизи вершин барьеров. Во-вторых, возникновение разного вида *резонансных* явлений. На фоне непрерывного энергетического спектра могут возникать отдельные *дискретные значения* энергии, для которых наблюдается *полная прозрачность* рассеивающей системы. Так, в потенциальных структурах с малой энергией связи появляются *реальные и виртуальные уровни*, что тесно связывает темы данного и предыдущего разделов нашей монографии. Далее, при рассеянии на потенциальных ямах солитонного происхождения наблюдается уникальная *полная прозрачность при всех энергиях* падающих частиц. Наконец, возникновение в случае нескольких рассеивателей (и не только) так называемых *квазиуровней*, часто характеризующихся комплексным значением энергии, действительная часть которого определяет энергию с полной прозрачностью, а мнимая характеризует ширину пика прозрачности в окрестности резонансной энергии. Все отмеченные резонансные явления дадут возможность плавно перейти к теме следующего раздела данной книги.

О рассеянии на потенциальных моделях, допускающих точное решение. Среди таких моделей можно назвать, во-первых, δ -потенциалы разных знаков и различных сочетаний (по знаку и количеству, вплоть до гребенки Дирака). Во-вторых, прямоугольные потенциалы и ямы в таком же разнообразии. Далее – потенциал Экарта с удивительной принадлежностью к солитонным формам в качестве ямы определенной глубины. Затем – потенциалы Лапласа, Морса, Ферми (условные названия характерных профилей). Разумеется, линейный и квадратичный потенциалы в качестве барьеров (локализованных и нелокализованных) и в качестве ям. Наконец, различные сочетания фрагментов с точными решениями, число которых велико. Все эти точно решаемые задачи наглядно демонстрируют особенности рассеяния, а также позволяют контролировать численные методы и различные приближенные аналитические расчеты. Особый прием при численном интегрировании стационарного уравнения Шредингера позволил вести расчеты характеристик рассеяния на потенциалах любой конфигурации. Правильность результатов и оценка их точности также определялись сопоставлением с упомянутыми точно решаемыми задачами.

3.1. Рассеяние на потенциальных барьерах

*Передо мной был огромный холм,
поднимавшийся к солнцу, как песня.*

Лорд Дансени

Начнем с примера рассеяния на δ -барьере. Хотя задача допускает простое непосредственное решение УШ, мы используем метод матрицы связи локальных решений, который пригодится в конструкциях более сложных. Для дельта-потенциала уже были получены соответствующие матричные элементы и в предыдущем разделе, и в конце первого раздела нашей книги. Итак, пусть рассеиватель описывается предельно короткодействующим потенциалом в виде барьера интенсивностью a , помещенным в точке $z = 0$

$$u(z) = a\delta(z). \quad (3.1)$$

Оператор перехода через такой объект связывает волновые функции стационарных состояний с энергией $e > 0$ перед ним $\psi_1(z) = A_1 e^{ik(z+d/2)} + B_1 e^{-ik(z+d/2)}$ и после него

$$\psi_2(z) = A_2 e^{ik(z-d/2)} + B_2 e^{-ik(z-d/2)}, \text{ так что}$$

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{G} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}; \hat{G} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix};$$

$$A_1 = G_{11}A_2 + G_{12}B_2; B_1 = G_{21}A_2 + G_{22}B_2. \quad (3.2)$$

В данном случае матричные элементы равны

$$G_{11} = \left(1 - \frac{a}{2i\kappa}\right) e^{-ikd}; G_{12} = -\frac{a}{2i\kappa}; G_{21} = \frac{a}{2i\kappa}; G_{22} = \left(1 + \frac{a}{2i\kappa}\right) e^{ikd}, \quad (3.3)$$

где волновое число $k = \sqrt{e}$, а смысл вспомогательного параметра d проясняется при наличии нескольких рассеивателей. Если рассматривается падение частиц на рассеиватель слева, то $B_2 \equiv 0$ и амплитуда A_2 прошедшей волны связана с амплитудой A_1 падающей волны соотношением $A_1 = G_{11}A_2$, так что коэффициент прозрачности

$$T = \frac{|A_2|}{|A_1|} = \frac{1}{|G_{11}|^2}. \quad (3.4)$$

Для нашего потенциала $G_{11} = \left(1 - \frac{a}{2i\kappa}\right) e^{-ikd}$, так что зависимость коэффициента прохождения от энергии и интенсивности потенциала определяется формулой

$$T = \frac{k^2}{k^2 + a^2/4} = \frac{e}{e + a^2/4}. \quad (3.5)$$

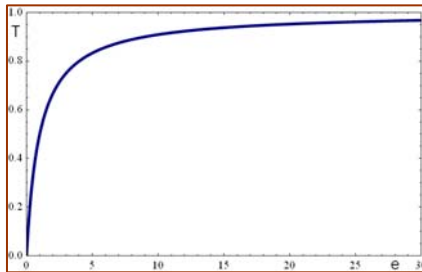


Рис.63. График зависимости коэффициента прозрачности дельта-барьера при $a = 2$.

Добавим, что рассеяние на дельта-яме $u(z) = -a\delta(z)$ описывается теми же формулами с заменой a на $-a$.

На рис.64 представлены отдельные стадии рассеяния на дельта-барьере интенсивностью $a = 2$ при различных значениях энергии падающих частиц. Волновая функция нормирована на единичную амплитуду падающей волны. На графиках показан квадрат модуля волновой функции $\rho(z)$, имеющий смысл относительной плотности вероятности координат. Справа от рассеивателя эта величина равна при указанной нормировке коэффициенту прозрачности барьера $\rho(0) = T$, что наглядно демонстрирует изменение прозрачности в зависимости от энергии. Осцилляции $\rho(z)$ определяются фазовыми соотношениями падающей и отраженной волн, их координатный период равен полуволне $\frac{\pi}{k}$. Отдельные же фазы отраженной и прошедшей волн также нетрудно вычислить, что мы оставляем сделать читателю. Амплитуда осцилляций равна $\frac{\rho_{\max} - \rho_{\min}}{2} = 2\sqrt{1-T}$.

Анимационному показу рассеяния на дельта-барьере посвящен исполняемый файл ANIM-SCATTERING-DELTA.exe. Общий принцип графического представления рассматриваемого явления рассеяния будет касаться и других примеров.

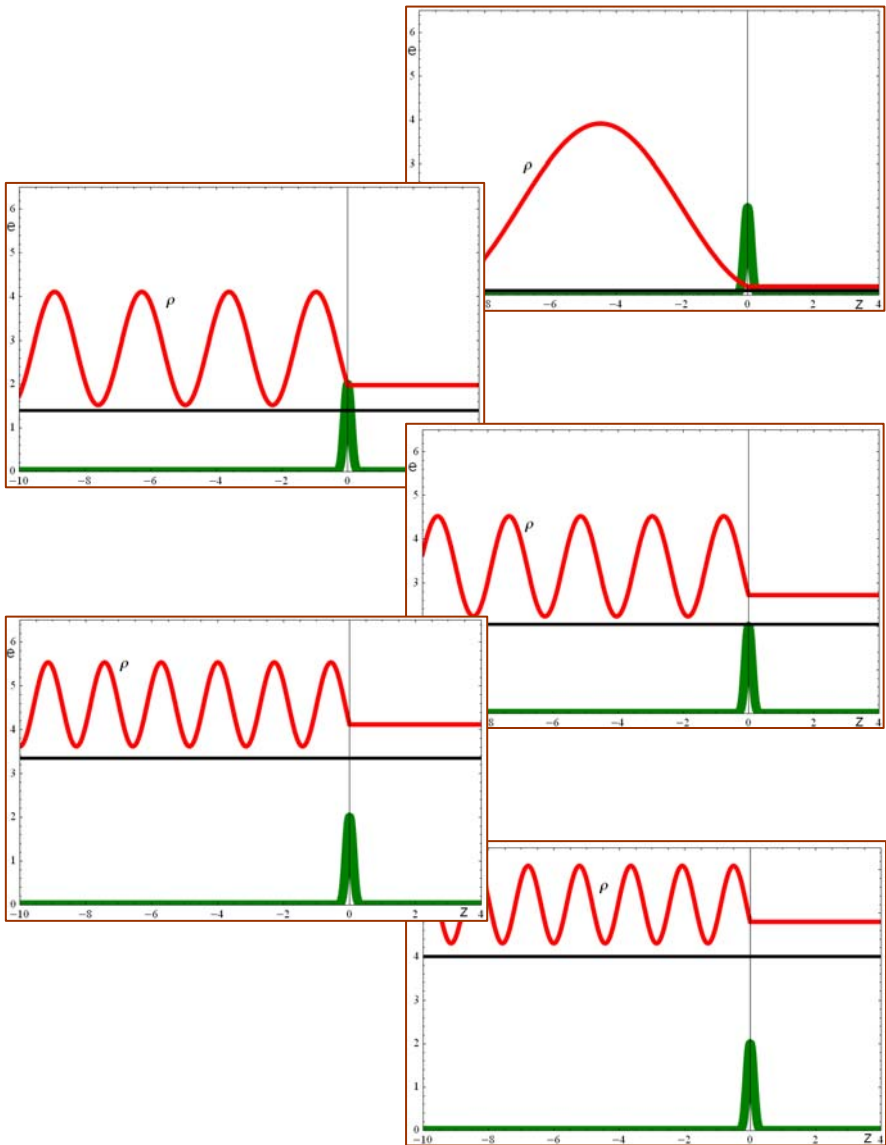


Рис.64. Рассеяние на дельта-барьере для некоторых значений энергии. Дельта-функция условно изображена в виде всплеска высотой, равной интенсивности потенциала.

Относительно подробное описание простого случая с дельта-потенциалом приводим в качестве примера изучения явления одномерного рассеяния. Для других ситуаций ограничимся более коротким изложением.

Далее обсудим случай, когда рассеиватель сосредоточен в некоторой области координат $z_1 < z < z_2$ с точными частными решениями соответствующего уравнения Шредингера $f_1(z)$ и $f_2(z)$. Пусть, как обычно, при прохождении такой области неоднородности рассматривается падение частиц слева, так что при $z < z_1$ волновая функция стационарного состояния состоит из падающей и отраженной волн:

$$\psi(z) = Ae^{ik(z-z_1)} + Be^{-ik(z-z_1)}, \quad (3.6)$$

а при $z > z_2$ она сводится только к прошедшей:

$$\psi(z) = Ce^{ik(z-z_2)}, \quad (3.7)$$

тогда как в области расположения рассеивателя $z_1 < z < z_2$ ее можно записать в виде

$$\psi(z) = C_1 f_1(z) + C_2 f_2(z). \quad (3.8)$$

Условия непрерывности волновой функции и ее производной в точках $z = z_1$ и $z = z_2$ позволяют выразить коэффициенты A, B, C_1, C_2 через амплитуду прошедшей волны C . Прделав несложные выкладки, приходим к следующим формулам:

$$A = C \frac{W_A}{2W}, \quad B = C \frac{W_B}{2W}, \quad C_1 = C \frac{W_{C_1}}{W}, \quad C_2 = C \frac{W_{C_2}}{W}, \quad (3.9)$$

где соответствующие множители выражены через значения волновых функций частных решений и их производных в точках сшивки таким образом:

$$\begin{aligned} W_A &= -[f_2'(z_2) - ikf_2(z_2)][f_1(z_1) + f_1'(z_1)/i/k] + \\ &\quad + [f_1'(z_2) - ikf_1(z_2)][f_2(z_1) + f_2'(z_1)/i/k]; \\ W_B &= -[f_2'(z_2) - ikf_2(z_2)][f_1(z_1) - f_1'(z_1)/i/k] + \\ &\quad + [f_1'(z_2) - ikf_1(z_2)][f_2(z_1) - f_2'(z_1)/i/k]; \\ W_{C_1} &= -[f_2'(z_2) - ikf_2(z_2)]; \\ W_{C_2} &= [f_1'(z_2) - ikf_1(z_2)]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Множитель W представляет собой Вронскиан

$$W = f_1'(z)f_2(z) - f_2'(z)f_1(z), \quad (3.11)$$

так что для его вычисления можно выбирать любую точку в интервале $z_1 \leq z \leq z_2$.

Коэффициент прозрачности выражается через квадраты модулей коэффициентов A и C :

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4|W|^2}{|W_A|^2}. \quad (3.12)$$

Таким образом, задача о прохождении частиц сквозь область рассеивателя полностью решается на основе полученных формул: волновая функция в соответствующих

областях (3.6), (3.7) и (3.8) определяется формулами (3.9) с коэффициентами (3.10-3.11), а интегральный эффект прозрачности обеспечивает (3.12). Можно сформулировать полученный результат на языке матрицы связи локальных решений, что предоставляем сделать читателю самостоятельно.

Добавим, что в некоторых случаях рассеивающий потенциал не локализован строго в определенной области координат. Тогда указанный подход может обеспечивать требуемую точность при выборе точек z_1 и z_2 в тех местах, где потенциал уже достаточно мал по абсолютной величине. Так, среди рассматриваемых нами конкретных моделей рассеивателей такими нелокализованными образованиями служат экспоненциально убывающие модели в форме барьеров

Гаусса
$$u(z) = u_0 \exp(-bz^2), \quad (3.13)$$

Лапласа
$$u(z) = u_0 \exp(-b|z|), \quad (3.14)$$

Эккарта
$$u(z) = \frac{u_0}{\operatorname{ch}^2(bz)}, \quad (3.15)$$

Морса
$$u(z) = u_0 \left[1 - (1 - e^{-b|z|})^2 \right], \quad (3.16)$$

Ферми
$$u(z) = \frac{u_0}{1 + e^{b(|z|-c)}} \quad (3.17)$$

и аналогичные –
$$u(z) = u_0 \exp(-bz^4), \quad (3.18)$$

$$u(z) = \frac{u_0}{\operatorname{ch}(bz)} \quad \text{и т. д.}, \quad (3.19)$$

а также убывающие степенным образом потенциалы типа Коши-

Лоренца
$$u(z) = \frac{u_0}{1+(bz)^2}, u(z) = \frac{u_0}{(1+|bz|)^2}, \quad (3.20)$$

$$u(z) = \frac{u_0}{1+(bz)^4}, u(z) = \frac{u_0}{[1+(bz)^2]^2} \text{ и т. п.} \quad (3.21)$$

Для потенциалов Лапласа, Экарта, Морса и Ферми можно получить точное решение задачи стационарного рассеяния, что позволяет контролировать расчеты для этих моделей, а также для потенциалов без точного аналитического решения на основе численного решения уравнения Шредингера. К решению этого уравнения на основе специального приема мы и переходим.

Учитывается, что в стандартной постановке задачи рассеяния из двух решений стационарного уравнения Шредингера для каждого значения энергии e мы отбираем то, которому отвечает прошедшая волна в области справа от рассеивателя

$$\psi(z) = Ce^{ik(z-z_2)}, k = \sqrt{e}. \quad (3.22)$$

Так как волновая функция описывает относительные вероятности, то можно выбрать условие нормировки с единичной амплитудой прошедшей волны, т. е. положить $C = 1$. Тогда для численного решения уравнения Шредингера в координатном представлении

$$\psi''(z) + [e - u(z)]\psi(z) = 0 \quad (3.23)$$

имеем следующее начальное условие согласно (3.22) для волновой функции и ее производной в точке $z = z_2$:

$$\psi(z_0) = 1; \psi'(z_0) = ik . \quad (3.24)$$

Теперь записываем результат решения нашего УШ (3.23) в точке слева от рассеивателя

$$\psi(z_1) = Ae^{ikz_1} + Be^{-ikz_1} \text{ и } \psi'(z_1) = ik(Ae^{ikz_1} - Be^{-ikz_1}). \quad (3.25)$$

Отсюда для амплитуд падающей и отраженной волн имеем выражения

$$A = \frac{1}{2} \left[\psi(z_1) + \frac{\psi'(z_1)}{ik} \right] \text{ и } B = \frac{1}{2} \left[\psi(z_1) - \frac{\psi'(z_1)}{ik} \right], \quad (3.26)$$

так что коэффициент прозрачности в силу принятой нормировки равен

$$T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{4}{\left| \psi(z_1) + \frac{\psi'(z_1)}{ik} \right|^2} . \quad (3.27)$$

Этот метод мы и используем при составлении программ в системе Mathematica. Получаемые таким способом решения в виде серии графиков используются в компьютерных стендах,

созданных нами на разных языках визуального программирования в виде исполняемых файлов для просмотра анимаций, а отдельные кадры входят в презентации и рисунки в книге и в ее электронной версии (в цвете). Наконец, отдельные разработки с динамической визуализацией представлены в специальном приложении в виде явных программ на языке Mathematica-6 (более поздние версии нам пока недоступны).

Далее перейдем к изучению рассеяния на степенных потенциальных барьерах. Начнем с наиболее популярного примера чисто квадратичного, или параболического, потенциального барьера

$$u(z) = -z^2, \quad (3.28)$$

допускающего точное аналитическое решение задачи рассеяния на основе функций параболического цилиндра

$$D_{-1/2 \pm ie/2}(\sqrt{2} e^{\pm i\pi/4} z). \quad (3.29)$$

Нетрудно убедиться, что волновая функция может быть записана в обычной для рассеяния форме при падении частиц слева с энергией e через следующие конкретные функции параболического цилиндра, переходящие при $|z| \rightarrow \infty$ в соответствующие бегущие волны:

$$\psi(z) = \begin{cases} AD_{-1/2 - ie/2}(-\sqrt{2} e^{i\pi/4} z) + BD_{-1/2 + ie/2}(-\sqrt{2} e^{-i\pi/4} z), & z < 0, \\ CD_{-1/2 + ie/2}(\sqrt{2} e^{-i\pi/4} z), & z > 0. \end{cases} \quad (3.30)$$

Из условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке $z = 0$ получаем, опуская вычислительные детали, связь амплитуд падающей и отраженной волн с амплитудой прошедшей волны

$$A = C \frac{1+i}{2\sqrt{\pi}} \exp(-3\pi e/4) [1 + \exp(\pi e)] \Gamma\left(\frac{1}{2} + i\frac{e}{2}\right),$$

$$B = -iC \exp(-\pi e/2). \quad (3.31)$$

Отсюда вытекает известное выражение для коэффициента прозрачности параболического барьера [1] в виде формулы Кэмбла

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \exp(-\pi e)}. \quad (3.32)$$

Детальное представление о рассеянии при разных значениях энергии падающих частиц дает полученная на основе найденных формул для волновой функции анимационная демонстрация ANIM-SCATTEING-z2-power.exe. Отдельные стадии рассеяния для типичных значений энергии отражены на рис.65. Интегральная характеристика рассеяния на чисто квадратичном барьере (3.28) изображена на рис.66.

Кратко о результатах исследования. Анимация и отдельные кадры показывают, что наблюдается характерное увеличение квадрата модуля волновой функции в непосредственной

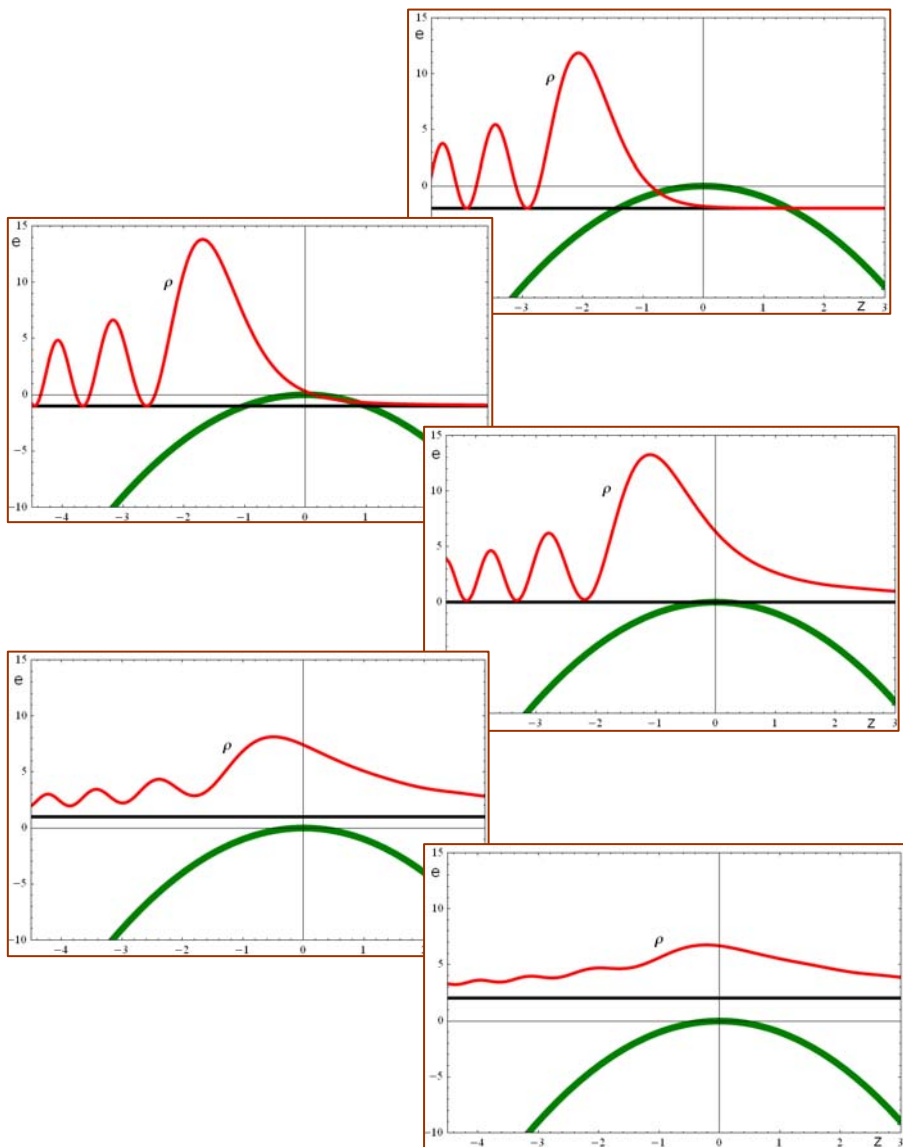


Рис.65. Рассеяние на чисто параболическом барьере для некоторых значений энергии.

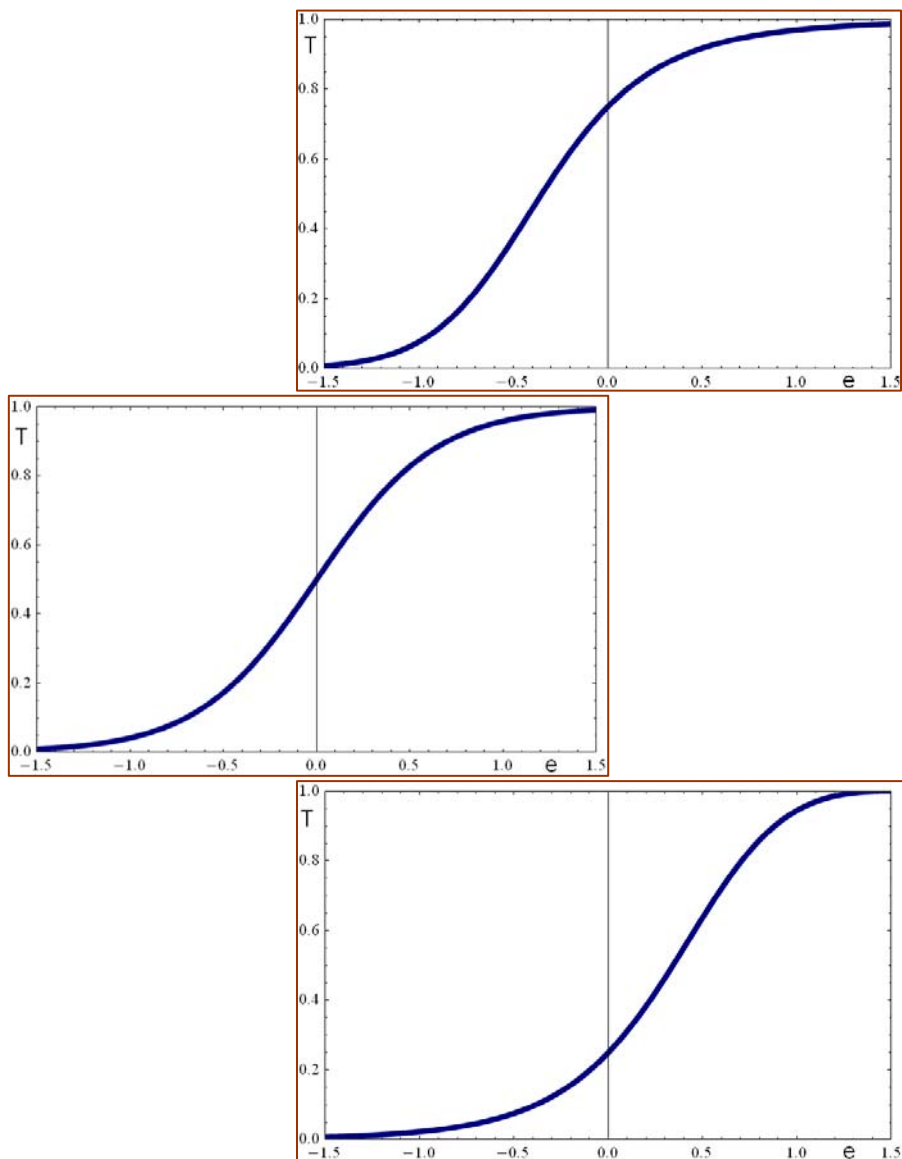


Рис.66. Коэффициенты прозрачности чисто степенных барьеров: линейного (верхний), квадратичного (средний) и четверного (нижний).

близости от рассеивателя, точнее – вблизи классической точки поворота для данной энергии. Это соответствует в классической картине уменьшению кинетической энергии и скорости, т. е. относительная вероятность увеличивается. При этом некоторое локальное ее увеличение происходит и в критическом диапазоне энергий и даже при больших энергиях, в области сильного надбарьера. Интегральная характеристика – коэффициент прозрачности – в зависимости от энергии имеет симметричную форму, что подтверждается записью этой формулы в виде

$$T(e) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\pi e}{2}. \quad (3.33)$$

В соответствии с общими свойствами степенных потенциальных барьеров коэффициент прозрачности при критической энергии $T(0) = 1/2$, а в критическом диапазоне $|e| < 1$ имеет близкую к линейной зависимость от энергии:

$$T(0) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\pi}{2} e + O(e^3) \right]. \quad (3.34)$$

За пределами этого диапазона коэффициент прозрачности экспоненциально приближается к нулю или единице соответственно при уменьшении или увеличении энергии. Грубо можно оценить область энергий, при которых это происходит так, как показано на рис.66, т. е. $|e| \leq 1.5$, что

окажется справедливым и для рассеяния на других симметричных степенных барьерах.

Далее представляет интерес поведение рассеяния в случае несимметричного квадратичного барьера

$$u(z) = \begin{cases} -\beta_1 z^2, & z < 0, \\ -\beta_2 z^2, & z > 0. \end{cases} \quad (3.35)$$

Оставляя исследование деталей рассеяния на таком потенциале читателю, добавим, что при критической энергии в этом случае коэффициент прозрачности будет равен

$$T(0) = \frac{2\beta_1^{1/4}\beta_2^{1/4}}{(\beta_1^{1/4} + \beta_2^{1/4})^2}. \quad (3.36)$$

Заметим, что $T(0) \leq 1/2$ для любых β_1 и β_2 (в силу известного соотношения между средним арифметическим и средним геометрическим). Таким образом, асимметрия квадратичного барьера уменьшает прозрачность при критической энергии. Однако это изменение оказывается незначительным при не очень больших различиях между β_1 и β_2 . Так, при $\beta_2 / \beta_1 = 10$ коэффициент прозрачности $T(0) = 0.46$, а при $\beta_2 / \beta_1 = 100$ он становится равным 0.37.

При малых энергиях прозрачность по-прежнему будет экспоненциально малой (уточнение оставляем читателю), а при больших энергиях, вместо экспоненциального приближения к единице, появляется степенное:

$$T = 1 - \frac{1}{64e^4} (\beta_1 - \beta_2)^2. \quad (3.37)$$

Анимации ANIM-SCATTEING-z2-power-nonsymm.exe и ANIM-TRANS-z2-power-nonsymm.exe посвящены деталям рассеяния на несимметричных параболических барьерах.

В качестве второго чисто степенного примера рассмотрим симметричный линейный потенциал

$$u(z) = -|z|, \quad (3.38)$$

также допускающий точное аналитическое решение задачи рассеяния на основе функций Эйри: $Ai(x)$ и $Bi(x)$. (3.39)

Нетрудно убедиться, что волновая функция может быть записана в обычной для рассеяния форме при падении частиц слева через комплексную комбинацию функций Эйри $y(x) = Ai(x) + iBi(x)$:

$$\psi(z) = \begin{cases} Ay * (-e + z) + By(-e + z), & z < 0, \\ Cy(-e - z), & z > 0. \end{cases} \quad (3.40)$$

Из условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке $z = 0$ получаем, опуская вычислительные детали, связь амплитуд падающей и отраженной волн с амплитудой прошедшей волны, из которой вытекает выражение для коэффициента прозрачности линейного барьера

$$T(e) = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \pi^2 [Ai(-e) Ai'(-e) + Bi(-e) Bi'(-e)]^2}. \quad (3.41)$$

При критической энергии в соответствии с общей формулой для чисто степенных потенциальных барьеров $T(0) = 3/4$.

Детальное представление о рассеянии при разных значениях энергии падающих частиц дает полученная на основе найденных формул для волновой функции анимационная демонстрация ANIM-SCATTEING-z1-power.exe. Отдельные стадии рассеяния для типичных значений энергии отражены на рис.67. Интегральная характеристика рассеяния на чисто линейном барьере (3.38) изображена на рис.66.

Обращаемся к случаю несимметричного линейного барьера

$$u(z) = \begin{cases} \beta_1 z, & z < 0, \\ -\beta_2 z, & z > 0. \end{cases} \quad (3.42)$$

Оставляя исследование деталей рассеяния на таком потенциале читателю, добавим, что при критической энергии в этом случае коэффициент прозрачности будет равен

$$T(0) = \frac{3\beta_1^{1/3}\beta_2^{1/3}}{(\beta_1^{1/3} + \beta_2^{1/3})^2}. \quad (3.43)$$

Следовательно, $T(0) \leq 3/4$ для любых β_1 и β_2 . То, что асимметрия степенных барьеров

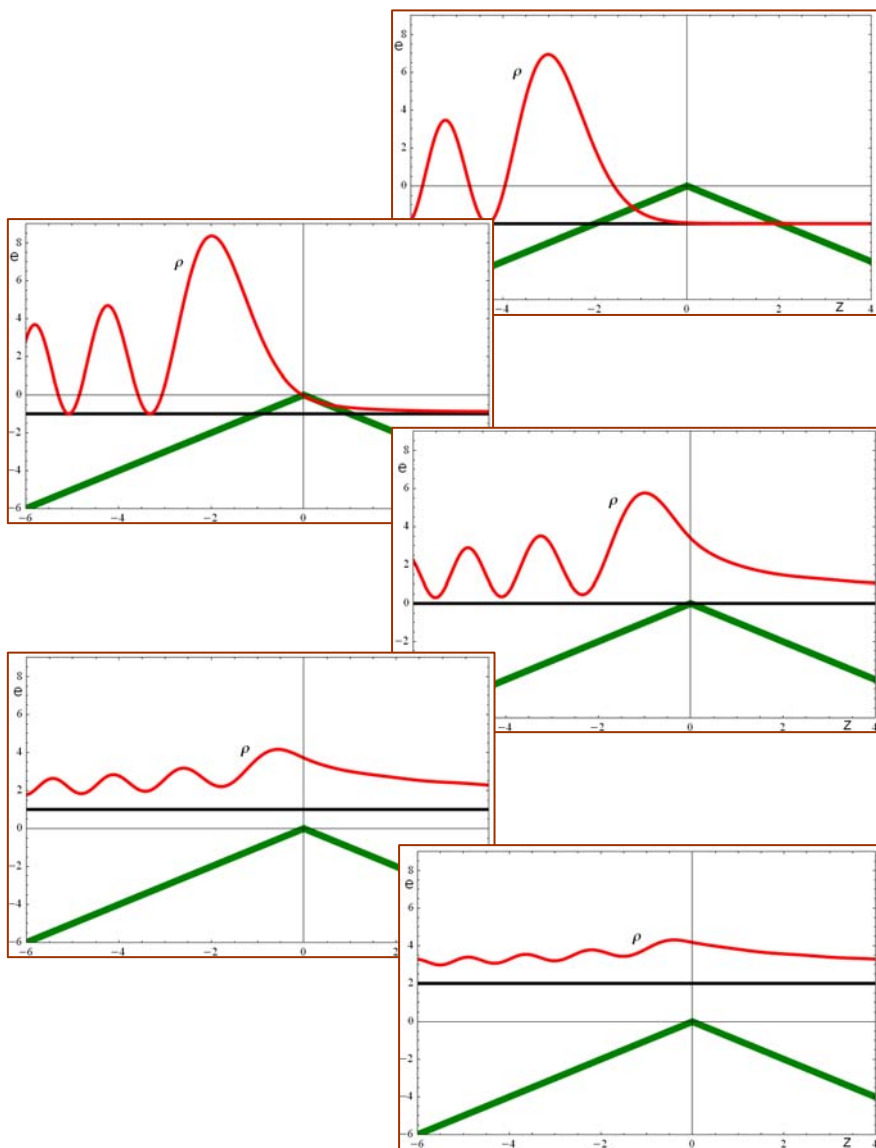


Рис.67. Рассеяние на чисто линейном барьере для некоторых значений энергии.

$$u(z) = -|z|^v \begin{cases} \beta_1, & z < 0, \\ \beta_2, & z > 0 \end{cases} \quad (3.44)$$

всегда уменьшает прозрачность при критической энергии, является общим свойством этих потенциалов и вытекает из формулы [7]

$$T(0) = \frac{4\beta_1^{1/(v+2)}\beta_2^{1/(v+2)}}{(\beta_1^{1/(v+2)} + \beta_2^{1/(v+2)})^2} \left(\sin \frac{\pi}{v+2} \right)^2. \quad (3.45)$$

Анимации ANIM-SCATTEING-z1-power-nonsymm.exe и ANIM-TRANS-z1-power-nonsymm.exe посвящены деталям рассеяния на несимметричных линейных барьерах.

Переходя к четверному потенциальному барьеру, напомним, что точного аналитического решения для рассеяния не существует, но на предыдущих моделях отработаны численные методы решения, так что результаты представлены в анимациях ANIM-SCATTEING-z4-power.exe и ANIM-TRANS-z4-power.exe и отдельных иллюстрациях на рис.68. Интегральный ответ для коэффициента прозрачности дан на рис.66. Что касается несимметричного 4-степенного барьера, то в соответствии с общей формулой (3.45) коэффициент прозрачности при критической энергии равен

$$T(0) = \frac{\beta_1^{1/6}\beta_2^{1/6}}{(\beta_1^{1/6} + \beta_2^{1/6})^2}. \quad (3.46)$$

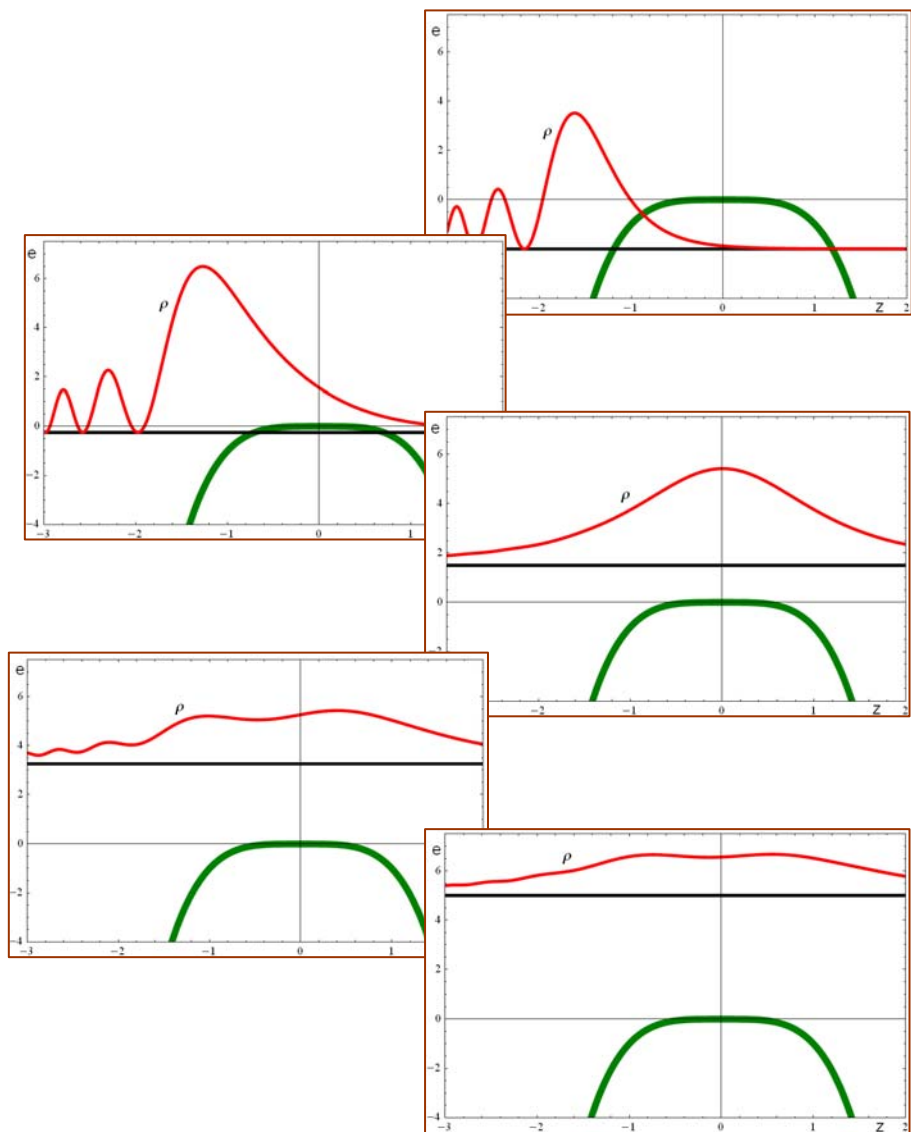


Рис.68. Рассеяние на чисто четверном барьере для некоторых значений энергии.

На этом завершаем исследование чисто степенных барьеров, переходя к другим формам рассеивателей в виде одиночных барьеров (дельта-барьер уже был рассмотрен). Начнем с симметричного параболического (квадратичного) барьера высотой u_0 , локализованного вблизи начала координат в области $-\sqrt{u_0} < z < \sqrt{u_0}$:

$$u(z) = \begin{cases} u_0 - z^2, & z^2 < u_0, \\ 0, & z^2 > u_0. \end{cases} \quad (3.47)$$

Как и в случае примера с дельта-барьером, нас интересуют и детальное поведение волновой функции стационарного состояния для всех значений координат, и интегральная характеристика рассеяния – коэффициент прозрачности. И то, и другое можно получить, решая УШ численно указанным способом либо воспользовавшись известными точными частными решениями в области действия рассеивателя. В последнем случае это функции параболического цилиндра

$$\begin{aligned} f_1(z) &= D_{-i(e-u_0)/2-1/2} [(1+i)z] \quad \text{и} \\ f_2(z) &= D_{-i(e-u_0)/2-1/2} [-(1+i)z]. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Подставляя эти выражения в общие формулы (3.6)-(3.12), получаем полное решение задачи прохождения квантовых частиц сквозь область рассеивателя в виде квадратичного барьера. Параллельно строим соответствующее описание на основе численного решения УШ. Результаты представлены в

виде исполняемого файла с анимацией ANIM-SCATT-z2.exe. Кроме того, отдельные стадии рассеяния на параболическом барьере конкретной высоты приведены на графиках рисунка 69.

Что же нас может заинтересовать в данном случае? Во-первых, детали поведения квадрата модуля волновой функции в области рассеивателя при различных значениях энергии падающих частиц, особенно в критическом диапазоне энергий, близких к максимуму барьера, при заданной высоте барьера. В частности, прозрачность при критической энергии $e = u_0$. Во-вторых, зависимость всех характеристик рассеяния от высоты барьера u_0 . Особенно при больших значениях u_0 , когда происходит переход от локализованного рассеивателя к нелокализованному, чисто степенному параболическому барьеру. В этом случае целесообразно отсчитывать энергию от максимума потенциала, когда известным интегральным результатом является изящная формула Кэмбла

$$T = \frac{1}{1 + e^{-\pi e}}. \quad (3.49)$$

Сколько близки результаты при конечной высоте барьера для коэффициента прозрачности от (3.49) показывает анимационная демонстрация зависимости этого коэффициента от энергии для разных значений максимума барьера. В частности, значение коэффициента прозрачности при

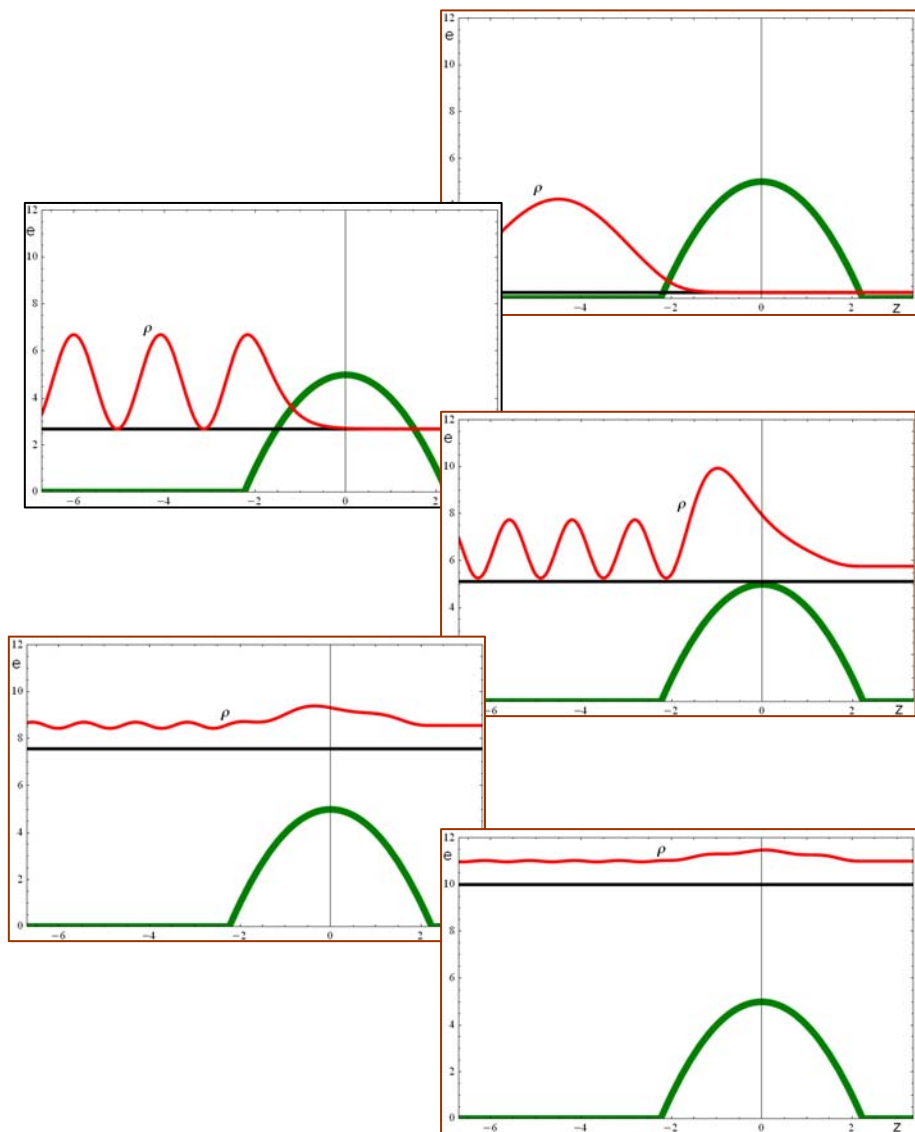


Рис.69. Рассеяние на конечном параболическом барьере для некоторых значений энергии.

критической энергии, которое в предельном случае равно $\frac{1}{2}$. Это файлы ANIM-TRANS-z2-u0.exe, ANIM-TRANS-z2-u0-2-6.exe и ANIM-TRANS-z2-u0-e.exe, а также графики на рисунке.70. Любопытен осциллирующий характер приближения коэффициента прозрачности к (3.49) при стремлении u_0 к бесконечности для всех энергий. Оставим читателю исследование несимметричного параболического барьера, а также «полупараболического» (см. рис.71-72).

Мы же перейдем к симметричному линейному рассеивателю в виде барьера высотой u_0 , локализованного вблизи начала координат в области $-u_0 < z < u_0$:

$$u(z) = \begin{cases} u_0 - |z|, & |z| < u_0, \\ 0, & |z| > u_0. \end{cases} \quad (3.50)$$

В данном случае нужно предварительно указать частные решения УШ, которые построены из функций Эйри. Нетрудно убедиться, что такими решениями могут служить следующие конструкции:

если $z < 0$, то $f_1(z) = \text{Ai}\left[zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right]$ и

$$f_2(z) = \text{Bi}\left[zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right];$$

если $z > 0$, то (3.51)

$$f_1(z) = c1 \text{Ai}\left[-zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right] + c2 \text{Bi}\left[-zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right] \text{ и}$$

$$f_2(z) = c3 \text{Ai}\left[-zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right] + c4 \text{Bi}\left[-zu_0^{1/3} - (e - u_0)/u_0^{2/3}\right].$$

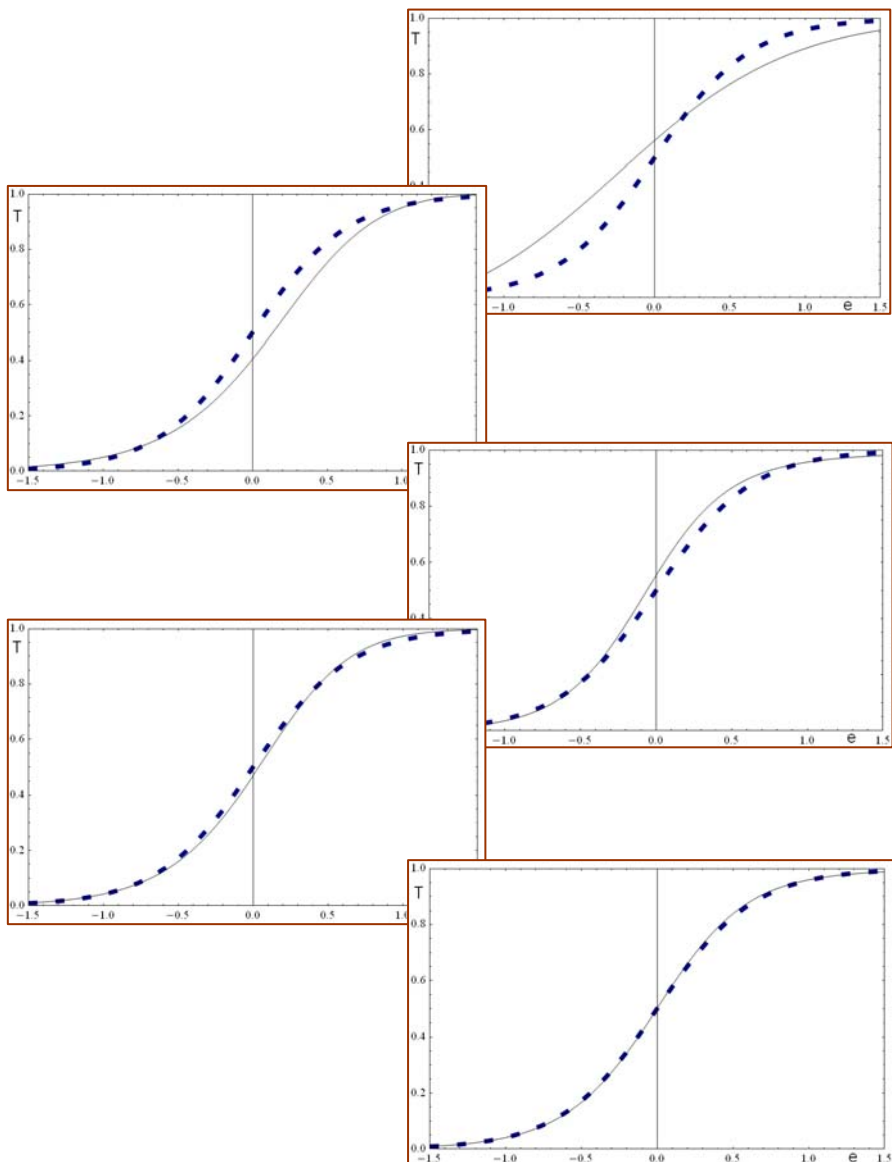


Рис.70. Сравнение коэффициентов прозрачности чисто параболического барьера (штрихи) и таких же барьеров на конечном интервале шириной 1.5, 3, 6, 10 и 30 (сверху вниз).

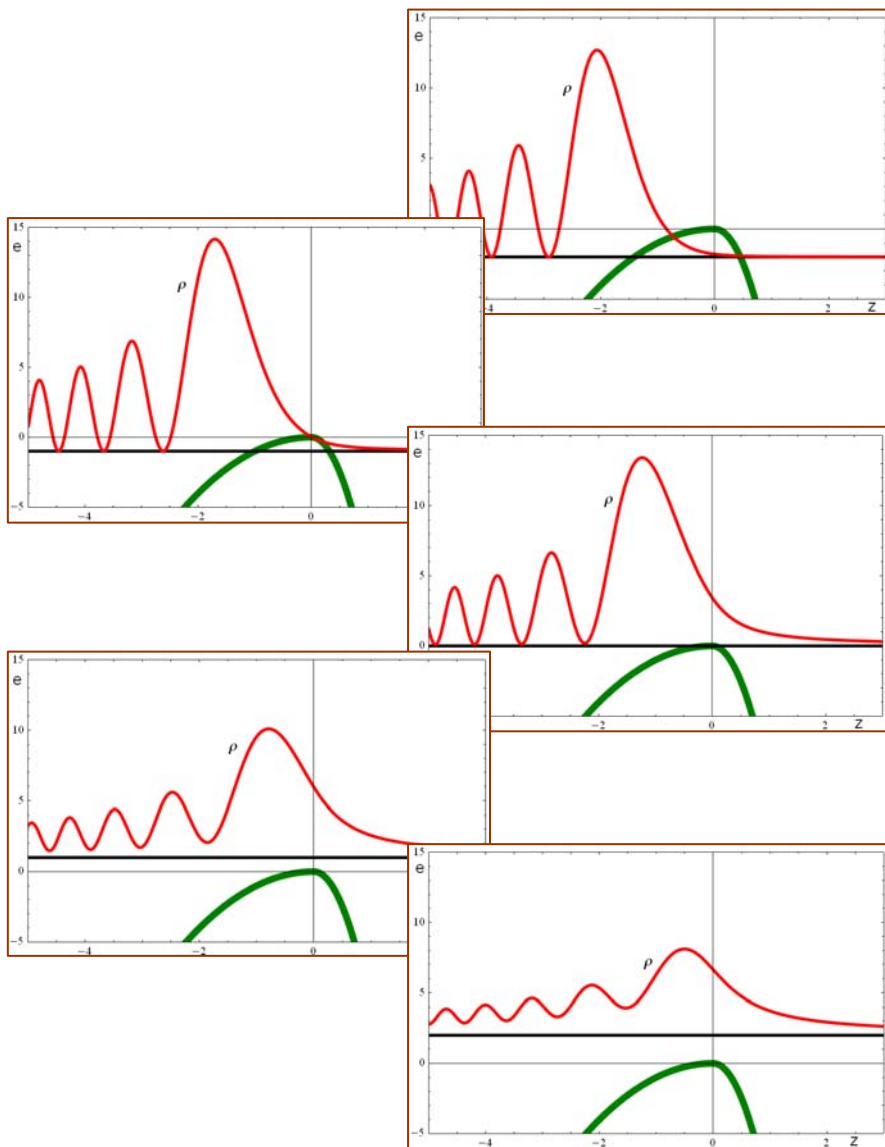


Рис.71. Рассеяние на несимметричном параболическом барьере для некоторых значений энергии.

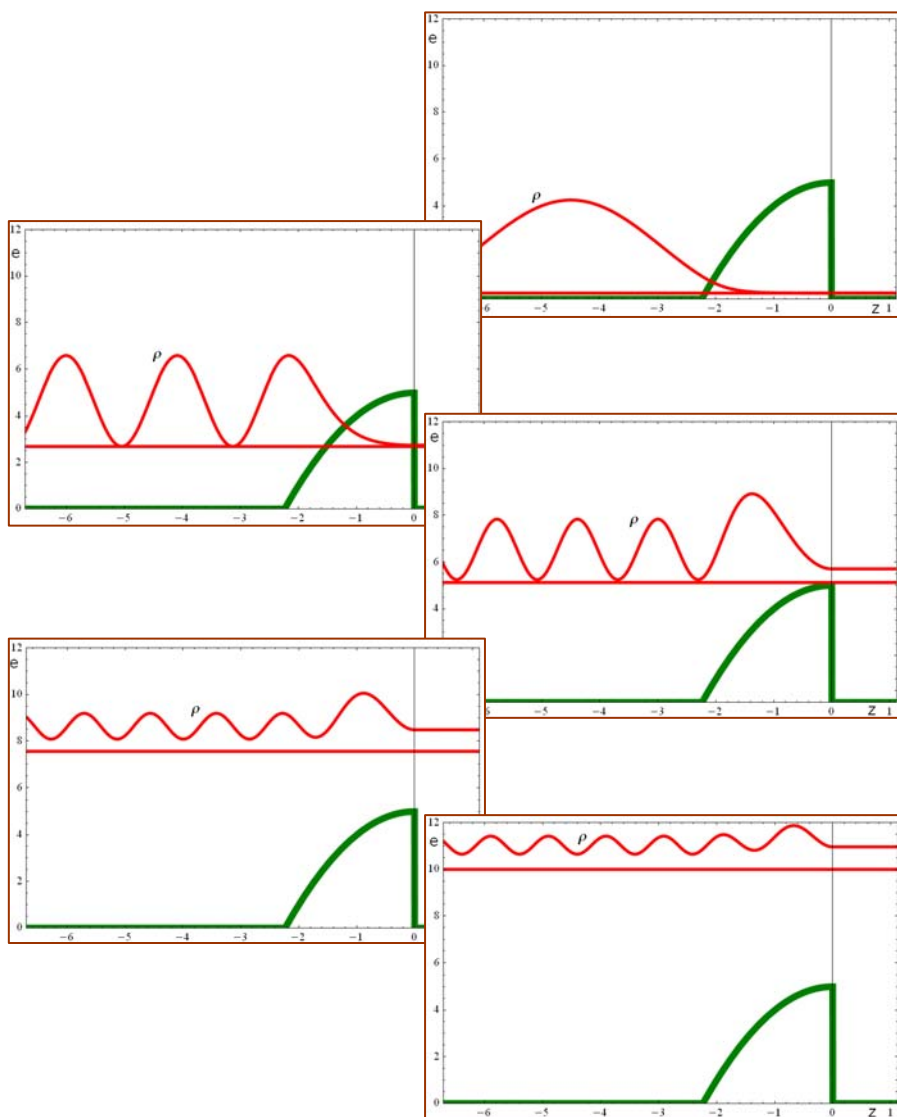


Рис.72. Рассеяние на полупараболическом барьере для некоторых значений энергии.

Постоянные коэффициенты в (3.51) определяются из условия непрерывности функций $f_{1,2}(z)$ и их производных в точке $z = 0$. Явные выражения для этих коэффициентов приводить не станем ради сокращения изложения.

Далее поступаем так, как в случае с квадратичным потенциалом. Подставляя найденные выражения для частных решений (3.51) в общие формулы (3.6)-(3.12) получаем полное решение задачи прохождения квантовых частиц сквозь область рассеивателя, которым является линейный барьер на конечном интервале (3.50). Параллельно строим соответствующее описание на основе численного решения УШ. Результаты представлены в виде исполняемого файла с анимацией ANIM-SCATT-z1-u0.exe. Кроме того, отдельные стадии рассеяния на линейном барьере конкретной высоты приведены на графиках рисунка 73. На рисунке 74 сравниваются коэффициенты прозрачности линейного барьера на конечном интервале и чисто степенного линейного барьера.

Наконец, особенности рассеяния четверным барьером на интервале передает анимационный исполняемый файл ANIM-SCATT-z4-u0.exe, а также графики рисунка 75. На рисунке 76 сравниваются коэффициенты прозрачности четверного барьера на конечном интервале и чисто степенного четверного барьера.

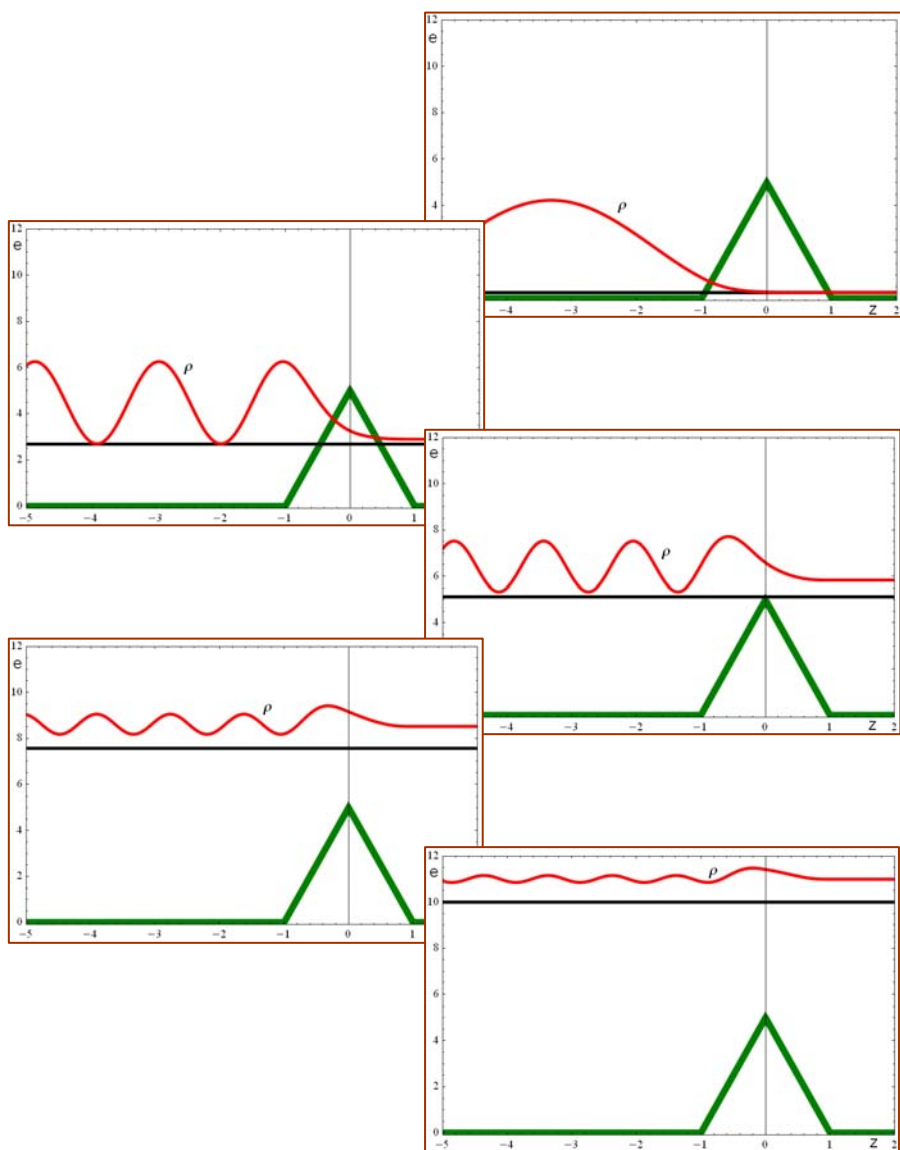


Рис.73. Рассеяние линейным барьером на конечном интервале для некоторых значений энергии.

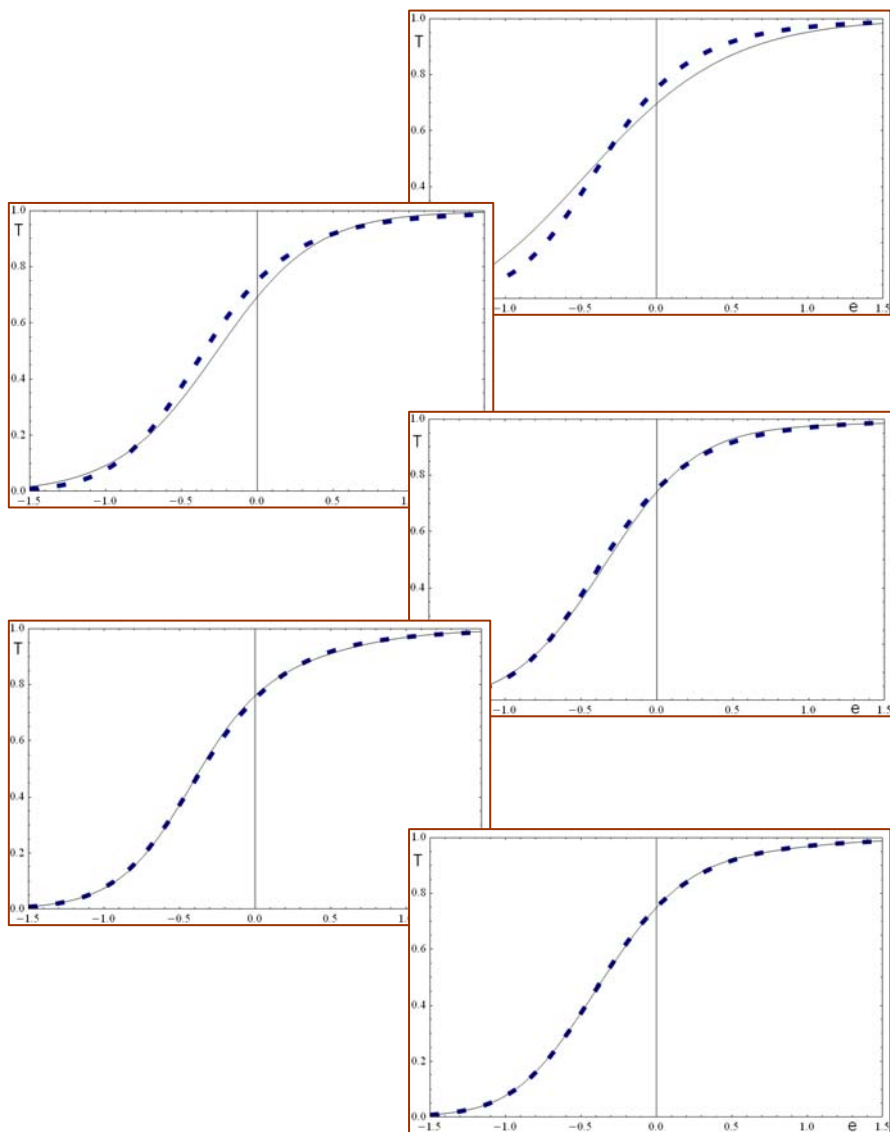


Рис.74. Сравнение коэффициентов прозрачности чисто линейного барьера (штрихи) и таких же барьеров на конечном интервале шириной 1.5, 2, 4, 6 и 10 (сверху вниз).

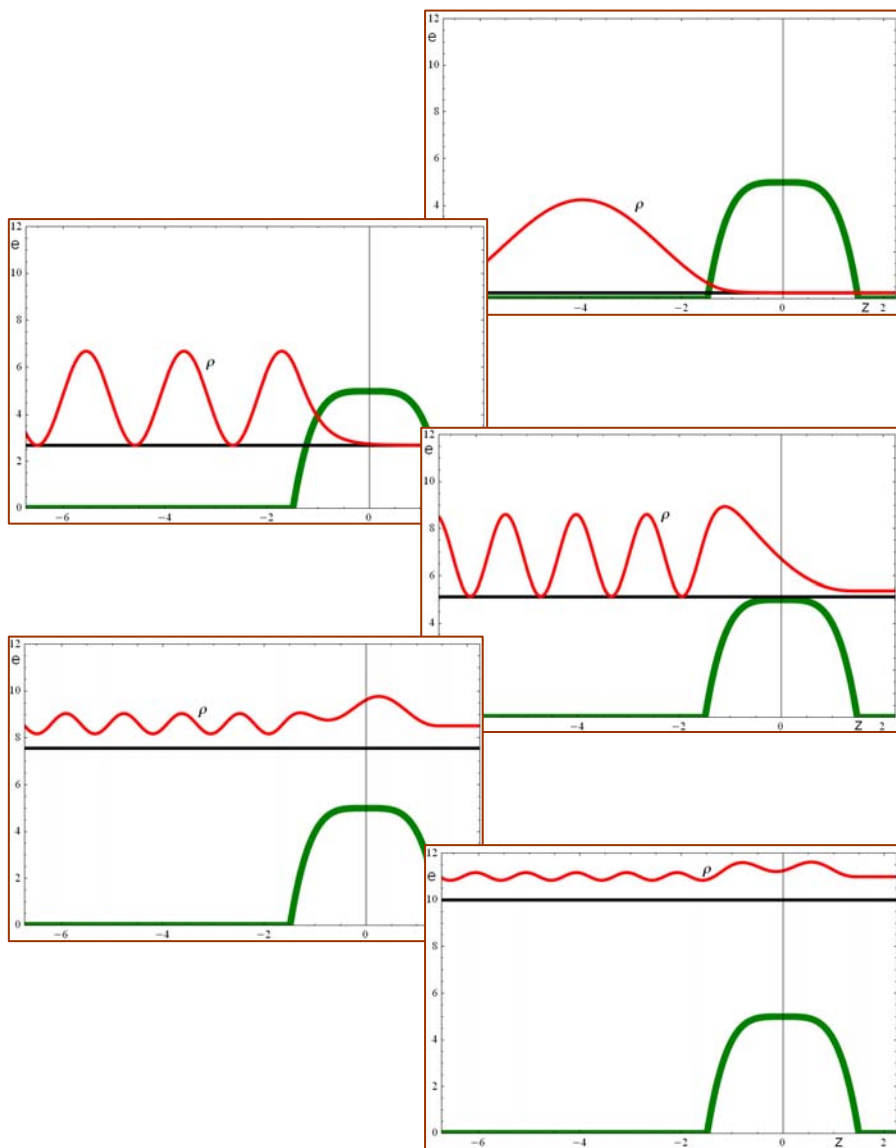


Рис.75. Рассеяние четверным барьером на конечном интервале для некоторых значений энергии.

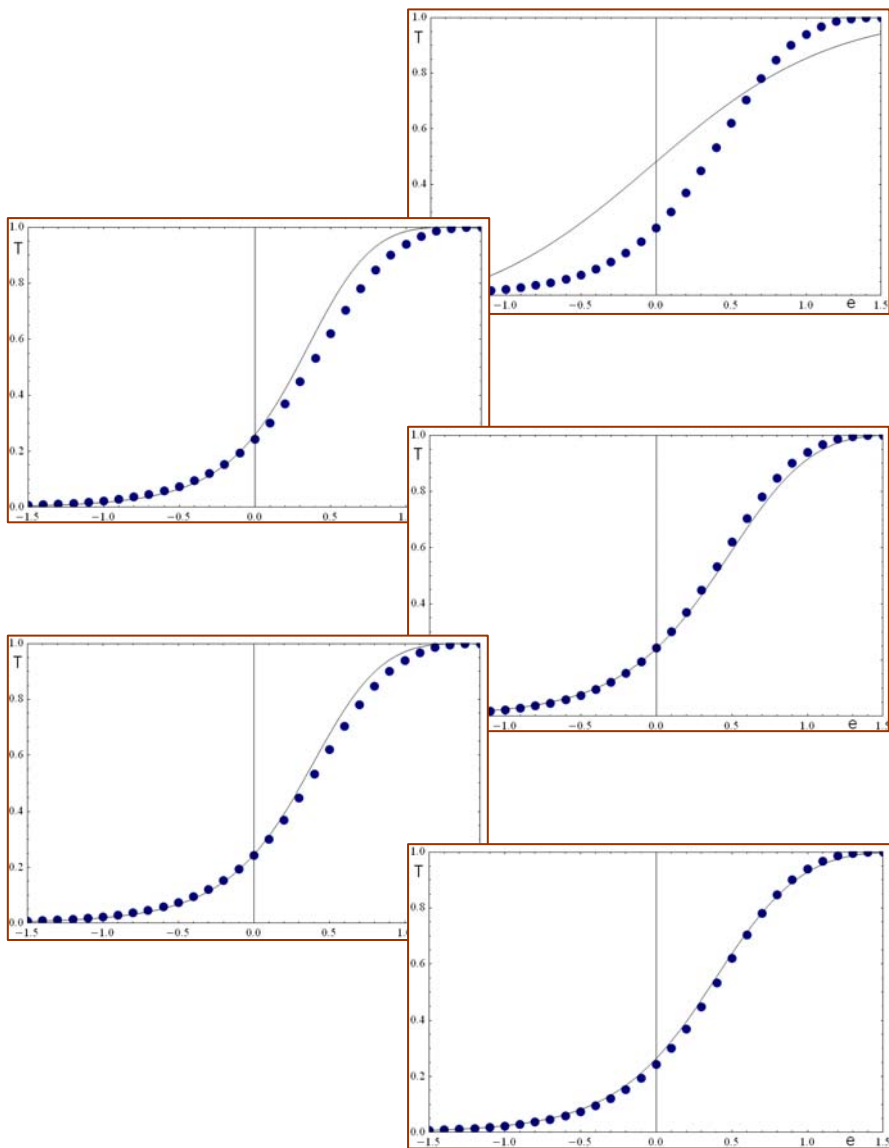


Рис.76. Сравнение коэффициентов прозрачности чисто четверного барьера (крупные точки) и таких же барьеров на конечном интервале шириной 1.5, 15, 28, 42, 55 (сверху вниз).

Далее переходим к рассеянию на прямоугольном барьере

$$u(z) = \begin{cases} u_0, & z_1 < z < z_2, \\ 0, & z < z_1 \text{ и } z > z_2. \end{cases} \quad (3.52)$$

В случае $e < u_0$ волновая функция для типичной конфигурации рассеяния имеет вид

$$\psi(z) = \begin{cases} A e^{ik(z-z_1)} + B e^{-ik(z-z_1)}, & z < z_1; \\ C_1 e^{q(z-z_2)} + C_2 e^{-q(z-z_2)}, & z_1 < z < z_2; \\ C e^{ik(z-z_2)}, & z > z_2, \end{cases} \quad (3.53)$$

где $k = \sqrt{e}$ и $q = \sqrt{u_0 - e}$. Сшивание при $z = z_1$ и при $z = z_2$ дает связь амплитуд падающих и отраженных волн с амплитудой прошедшей волны

$$\begin{cases} A = C \left[\operatorname{ch} q(z_1 - z_2) + \frac{i}{2} \operatorname{sh} q(z_1 - z_2) \frac{k^2 - q^2}{qk} \right], \\ B = \frac{iC}{2} \operatorname{sh} q(z_1 - z_2) \frac{k^2 + q^2}{qk}. \end{cases} \quad (3.54)$$

Отсюда для коэффициента прозрачности получаем известную

формулу [1]
$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{u_0^2}{(u_0 - e)e} \operatorname{sh}^2 q(z_1 - z_2)}. \quad (3.55)$$

Аналогично получаются результаты и в случае $e > u_0$.

Формально можно просто подставить везде вместо q мнимую

величину $i\sqrt{e-u_0}$. В частности, для коэффициента прозрачности получается выражение

$$T = \frac{1}{1 + \frac{u_0^2}{4(e-u_0)e} \sin^2 \sqrt{e-u_0} (z_1 - z_2)}. \quad (3.56)$$

При $e = u_0$ предельный переход дает

$$T = \frac{1}{1 + \frac{u_0}{4} (z_1 - z_2)^2}. \quad (3.57)$$

Исследование начинаем с моделирования деталей рассеяния на барьере фиксированной ширины $d \equiv z_2 - z_1 = \pi$. Для определенности выбираем случай с высотой барьера $u_0 = 1$. Анимационный файл ANIM-SCATT-RECT-u0-1.exe детально иллюстрирует поведение квадрата модуля ВФ в координатном представлении в зависимости от энергии падающих частиц. Внимание обращаем на характер рассеяния отдельно при $e < u_0$, при $e = u_0$ и при $e > u_0$. Как видно из приведенных формул, в случае $e = u_0 + 1$ будет наблюдаться резонансная прозрачность с $T = 1$. То же происходит при $e = u_0 + 4$ и т. д. Следует обратить внимание на вид $\rho(z) \equiv |\psi(z)|^2$ в области рассеивателя, т. е. при $z_1 < z < z_2$, в резонансных состояниях. Профиль $\rho(z)$ повторяет

характерные контуры для частицы, запертой в данном интервале: один максимум, два максимума и т. д.

Отдельные стадии описанной картины рассеяния на прямоугольном барьере представлены на графиках рисунка 77.

Наконец, представляет интерес переход от прямоугольного барьера к дельта-барьеру. Здесь мы следим за трансформацией мер рассеяния при увеличении высоты барьера u_0 и одновременном уменьшении ширины барьера d по закону

$$d = \frac{a}{u_0}, \text{ где } a \text{ интенсивность ожидаемого предельного}$$

рассеивателя – δ -барьера $u(z) = a\delta(z)$. Анимационные файлы ANIM-SCATT-RECT-DELTA-1.exe и ANIM-SCATT-RECT-DELTA-2.exe показывают насколько быстро совершается ожидаемый переход при увеличении высоты барьера u_0 .

Добавим, что есть одна деталь: можно совершать переход при фиксированной величине z_1 , так что изменяется вслед за u_0 только z_2 , а можно сделать это симметричным образом: $z_1 = -d/2$, $z_2 = d/2$. Именно так построены указанные анимации для деталей рассеяния. Во всех случаях преобразование для коэффициента прозрачности совершается единым образом, поскольку в формулу для T входит лишь ширина $d = z_1 - z_2$. Анимационный файл ANIM-TRANS-RECT-

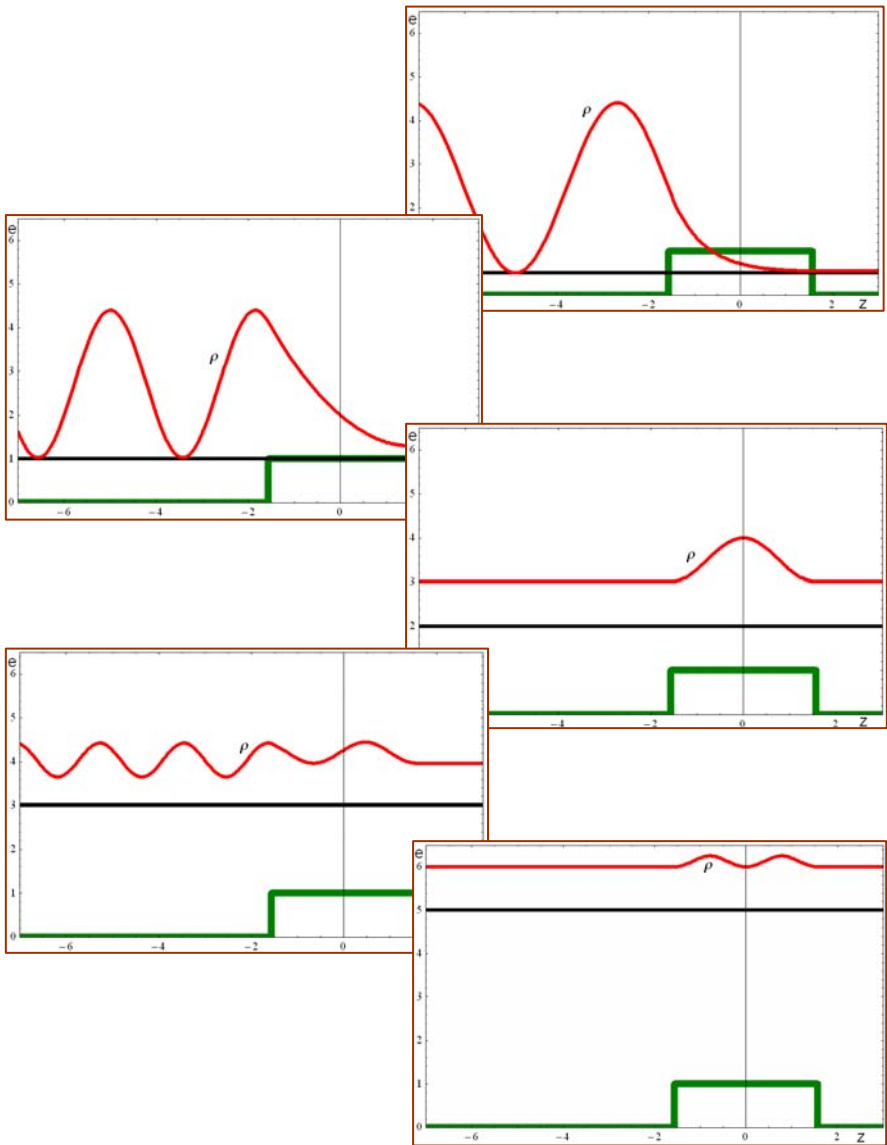


Рис.77. Рассеяние прямоугольным барьером шириной $d = \pi$ и высотой $u_0 = 1$ для некоторых значений энергии.

DELTA.exe показывает, как именно совершается указанный переход к прозрачности δ -барьера с $a = 2$ в зависимости от увеличивающейся высоты барьера.

Еще один вид трансформаций, связанных с прямоугольным барьером, состоит в переходе к сглаженным его краям. Анимационные файлы ANIM-FORMS-RECT-LAPLACE.exe, ANIM-FORMS-RECT-v.exe, ANIM-FORMS-RECT-vGAUSS.exe и ANIM-FORMS-RECT-FERMI.exe демонстрируют различные потенциальные профили, которые с изменением одного из параметров приближаются к прямоугольной форме. Особый интерес представляет модель Ферми, представленная последней из указанных анимаций. Для более детальной иллюстрации этих взаимопереходов между фермиевскими и прямоугольным потенциалами созданы анимации ANIM-TRANS-FERMI-RECT.exe и ANIM-TRANS-FERMI-RECT-2.exe.

В первом случае демонстрируется прозрачность прямоугольного барьера высотой $u_0 = 1$ и шириной $d = \pi$, нанесенная на графике коэффициента прозрачности T от 0 до 1 жирными точками для энергий e от 0 до 7. С нею сравниваются

прозрачности барьеров Ферми $u(z) = \frac{u_0}{1 + e^{\frac{|z-d/2|}{b}}}$ с той же высотой

$u_0 = 1$ и средней шириной $d = \pi$, а также параметром b , задающим ширину области сглаживания барьера. Именно

изменение этой величины в интервале от 2 до $1/20$ ($b = 2; 1.5; 1; 0.5; 0.05$) и определяет наблюдаемое явление перехода от весьма сглаженных барьеров к почти прямоугольному. Видны две резонансные энергии данного прямоугольного барьера $e_1 = 2$ и $e_2 = 5$, а также приближающиеся к ним резонансные энергии барьеров Ферми. Чтобы более детально проследить за этими изменениями прозрачности барьеров Ферми, выбран другой масштаб картинок: область энергий e от 1 до 5 и интервал коэффициента прозрачности T от 0.96 до 1. В такой анимации ANIM-TRANS-RECT-FERMI-2.exe четко просматривается первый резонансный уровень энергии, поскольку резонансы с более высокими энергиями размываются.

Наконец, еще четыре анимации ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e8.exe, ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e10.exe, ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e11.exe и ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e14.exe показывают детали рассеяния на потенциалах Ферми с некоторой фиксированной энергией и изменяющимся параметром размытости в сравнении с тем, что получается на прямоугольном барьере.

Добавим еще трансформации степенных барьеров на конечном интервале, переходящих в прямоугольный барьер. Они описываются анимациями ANIM-TRANS-RECT-u01-dPi-v2-32-e1-5.exe и ANIM-TRANS-RECT-u01-dPi-v2-32-e0-7.exe.

Добавим еще ряд трансформаций, касающихся потенциальных барьеров, расположенных на бесконечном интервале. Начнем с барьера Гаусса (рис. 59-1) $u(z) = u_0 \exp(-\alpha z^2)$. Рассеяние на таком барьере с высотами $u_0 = 1$ и $u_0 = 5$ демонстрируют анимационные файлы ANIM-SCATT-GAUSS-u02.exe и ANIM-SCATT-GAUSS-u05.exe. Профиль данного барьера наводит на мысль о возможных преобразованиях. Это типичный всплеск. Именно такую модель мы используем обычно при изображении дельта-потенциала. Второе впечатление – имеется квадратичная вершина, так что можно сопоставить данный гауссиан с чисто квадратичным барьером. Действительно, при $\alpha = \pi u_0 / 4$ и $u_0 \rightarrow \infty$ наш барьер превращается в дельта-барьер вида $2\delta(z)$. Насколько близки результаты для рассеяния квантовых частиц на этих двух потенциалах иллюстрирует анимация ANIM-SCATT-GAUSS-DELTA.exe. Во втором случае при отсчете энергии от вершины барьера, т. е. для потенциала $u(z) = u_0 \exp(-\alpha z^2) - u_0$, при $\alpha = 1/u_0$ и $u_0 \rightarrow \infty$ получаем чисто параболический рассеиватель. Этот переход иллюстрирует анимационный файл ANIM-SCATT-GAUSS-z2.exe.

Другие возможные трансформации мы опишем более сжато, опуская соотношения между параметрами. Так, в случае барьера типа Гаусса (рис. 59-2) с четверной вершиной

$u(z) = u_0 \exp(-\alpha z^4)$ рассеяние иллюстрируют файлы ANIM-SCATT-4GAUSS-u02.exe и ANIM-SCATT-4GAUSS-u05.exe, а переходу к дельта-барьеру посвящена анимация ANIM-SCATT-4GAUSS-DELTA.exe. В случае барьера (см. рисунок 59-4) Коши-Лоренца $u(z) = u_0 / (1 + \alpha z^2)$ рассеяние иллюстрируют файлы ANIM-SCATT-LORENZ-u02.exe и ANIM-SCATT-LORENZ-u05.exe, а переходу к дельта-барьеру посвящена анимация ANIM-SCATT-LORENZ-DELTA.exe. Аналогично в случае барьера (рис. 59-5) с четверной вершиной типа Коши-Лоренца $u(z) = u_0 / (1 + \alpha z^4)$ рассеяние иллюстрируют файлы ANIM-SCATT-4LORENZ-u02.exe и ANIM-SCATT-4LORENZ-u05.exe, а переход к δ -барьеру – ANIM-SCATT-4LORENZ-DELTA.exe. В случае барьера (рис.59-3) Лапласа $u(z) = u_0 \exp(-\alpha |z|)$ рассеяние иллюстрируют файлы ANIM-SCATT-LAPLACE-u02.exe и ANIM-SCATT-LAPLACE-u05.exe, переход к дельта-барьеру – анимации ANIM-SCATT-LAPLACE-DELTA.exe, а приближение к линейному – ANIM-TRANSLAPLACE-z1.exe. В случае барьера Морса $u(z) = u_0 [2 \exp(-\alpha |z|) - \exp(-2\alpha |z|)]$ (рис. 59-7) рассеяние описывают файлы ANIM-SCATT-MORSE-u02.exe и ANIM-SCATT-MORSE-u05.exe, а переход к дельта-барьеру – анимация ANIM-SCATT-MORSE-DELTA.exe.

Наконец, наряду с упомянутыми плавно изменяющимися барьерами, особое внимание привлекает модель Эккарта $U(z) = \frac{u_0}{\text{ch}^2 \alpha z}$ (рис. 59-8). Во-первых, задача рассеяния на таком барьере допускает точное аналитическое решение. Во-вторых, при некоторых соотношениях между параметрами u_0 и α потенциал Эккарта превращается в солитонный. В-третьих, при определенной связи между u_0 и α можно аппроксимировать барьер Эккарта чисто параболическим барьером (и наоборот). В-четвертых, возможен переход к дельта-барьеру. В [1] получено точное аналитическое решение задачи рассеяния на потенциале Эккарта. Интегральная характеристика рассеяния – коэффициент прозрачности – для энергии частиц e и волнового числа $k = \sqrt{e}$ записывается в виде компактной формулы в двух явных выражениях в зависимости от соотношения параметров потенциала u_0 и α

$$T(e) = \begin{cases} \frac{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha}}{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha} + \text{ch}^2 \pi \sqrt{\frac{u_0}{\alpha^2} - \frac{1}{4}}}, u_0 > \frac{\alpha^2}{4}; \\ \frac{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha}}{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha} + \cos^2 \pi \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{u_0}{\alpha^2}}}, u_0 < \frac{\alpha^2}{4}. \end{cases} \quad (3.58)$$

При $u_0 = \frac{\alpha^2}{4}$ получаем $T(e) = \frac{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha}}{\text{sh}^2 \frac{\pi k}{\alpha} + 1} = \text{th}^2 \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{e}{u_0}}$. (3.59)

В случае $u_0 = n(n+1)\alpha^2, n=1,2,\dots$ потенциал Экарта превращается в n -солитонные решения уравнения Кортевега-де Фриза симметричной формы.

Переход от барьера Экарта к чисто квадратичному степенному барьеру совершаем, отсчитывая энергию от вершины барьера, т. е. заменяя e на $e + u_0$ и полагая параметр

$\alpha = \frac{1}{\sqrt{u_0}}$, так что $T_{u_0}(e) = \frac{\text{sh}^2 \pi \sqrt{u_0(u_0 + e)}}{\text{sh}^2 \pi \sqrt{u_0(u_0 + e)} + \text{ch}^2 \pi \sqrt{u_0^2 - \frac{1}{4}}}$. (3.60)

Если $u_0 \gg 1$, то $u(z) = \frac{u_0}{\text{ch}^2 \alpha z} - u_0 = -u_0 \alpha^2 z^2 + o\left(\frac{z^4}{u_0}\right) =$

$= -z^2 + o\left(\frac{z^4}{u_0}\right)$. В результате из (3.60) в пределе при $u_0 \rightarrow \infty$

получается формула Кэмбла: $T(e) \rightarrow \frac{1}{1 + e^{-\pi e}}$.

Можно проследить за тем, как зависимость $T_{u_0}(e)$ переходит в $T_\infty(e)$ при различных значениях u_0 (и $\alpha = \frac{1}{\sqrt{u_0}}$).

Завершаем обсуждение особенностей рассеяния на барьере Экарта детальным рассмотрением явления с помощью

аналитического решения УШ для волновой функции. Как показано в [1], оно связано с гипергеометрической функцией:

$$\psi(z) = (1 - \text{th}^2 \alpha z)^{-\frac{ik}{2\alpha}} F\left(-\frac{ik}{\alpha} - s, -\frac{ik}{\alpha} + s + 1, -\frac{ik}{\alpha} + 1, \frac{1 - \text{th} \alpha z}{2}\right),$$

где $s = \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{1 - \frac{4u_0}{\alpha^2}})$, так что

$$\rho(z) = \left| F\left(-\frac{ik}{\alpha} - s, -\frac{ik}{\alpha} + s + 1, -\frac{ik}{\alpha} + 1, \frac{1 - \text{th} \alpha z}{2}\right) \right|^2. \quad (3.61)$$

На основе этих данных построена анимационная демонстрация деталей рассеяния на потенциале Экарта при различных параметрах u_0 и α . Сопоставление этого решения с численным решением УШ при различных прицельных точках z_{\max} позволяет судить о точности численного решения УШ (а также, с другой стороны, удостовериться в правильности точного решения).

Следующие анимационные демонстрации иллюстрируют отмеченные особенности потенциального барьера Экарта: ANIM-SCATT-ECKART-u02.exe и ANIM-SCATT-ECKART-u05.exe посвящены рассеянию на этом барьере, ANIM-SCATT-ECKART-DELTA.exe и ANIM-TRANS-ECKART-DELTA.exe – переходу к дельта-барьеру, а ANIM-TRANS-ECKART-z2-u032-3.exe – связи с чисто квадратичным барьером.

3.2. Рассеяние на потенциальных ямах

*Внутри стояло большое блюдо со свежими
бутербродами и две тарелки печенья.*

Майкл Гилберт

На рис.60 уже были показаны некоторые примеры потенциальных ям. Первой изображена дельта-яма (как обычно, в виде всплеска), о которой уже было сказано ранее. Общие способы исследования рассеяния, приведенные в предыдущем подразделе, касаются любых форм потенциальной энергии, так что перейдем к конкретным примерам. Начнем с хорошо известной [1] модели прямоугольной ямы (рис.60-8) глубиной u_0 и шириной d :

$$u(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ -u_0, & 0 < z < d, \\ 0, & z > d. \end{cases} \quad (3.62)$$

Волновая функция стационарного состояния с энергией e и волновыми числами $k = \sqrt{e}$ и $q = \sqrt{e + u_0}$ при падении частиц на рассеиватель слева может быть записана в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} A e^{ikz} + B e^{-ikz}, & z < 0, \\ C_1 e^{iqz} + C_2 e^{-iqz}, & 0 < z < d, \\ C e^{ikz}, & z > d. \end{cases} \quad (3.63)$$

Учет непрерывности этой функции и ее производной в точках скачков потенциала $z = 0$ и $z = d$ приводит к следующим

формулам связи амплитуд A и B падающей и отраженной волн, а также коэффициентов C_1 и C_2 в области рассеивателя с амплитудой прошедшей волны C :

$$\begin{aligned}
 A &= C \left[\cos(qd) - \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \sin(qd) \right], \\
 B &= C \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \sin(qd), \\
 C_1 &= C \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k}{q} \right), \quad C_2 = C \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k}{q} \right).
 \end{aligned} \tag{3.64}$$

Отсюда получаем интегральную характеристику прямоугольной ямы – коэффициент прозрачности

$$T = \frac{1}{1 + \frac{u_0^2}{4e(e+u_0)} \sin^2(\sqrt{e+u_0}d)}, \tag{3.65}$$

а также локальное поведение относительной плотности вероятности координат – квадрат модуля волновой функции

$$\begin{aligned}
 \rho(z) &= \\
 &= |C|^2 \begin{cases} \left[\left[\cos(qd) - \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right) \sin(qd) \right] e^{ikz} + \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \sin(qd) e^{-ikz} \right]^2, & z < 0, \\ \left[\cos(q(z-d)) + \frac{k}{q} \sin(q(z-d)) \right]^2, & 0 < z < d, \\ 1, & z > d. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3.66}$$

Выражение при $z < 0$ оставляем преобразовать читателю.

Нормировку волновой функции целесообразно выбирать полагая амплитуду прошедшей волны $C = \sqrt{T}$, что позволяет придать наглядности значению постоянной величины при $z > d$ на графиках: это будет коэффициент прозрачности T . Детально можно проследить за рассеянием на прямоугольной яме с помощью файлов анимации ANIM-SCATT-RECT-WELL.exe и динамической визуализации Math-6-SCATT-WELL-RECT-u01.nb и Math-6-SCATT-WELL-RECT-u04.nb.

Из выражения (3.65) видно, что при некоторых значениях энергии наступает полная прозрачность. Этот своеобразный резонансный размерный эффект мы уже наблюдали при рассеянии на прямоугольном барьере. Сейчас обратим внимание на новое явление, возникающее при малых значениях энергии падающих частиц. Если $e \rightarrow 0$, обычно при рассеянии и $T \rightarrow 0$, что вытекает также и из формулы (3.61). Однако при определенных глубинах ямы, когда в ней появляется очередное связанное состояние, дело обстоит иначе: возникает новый эффект – *рассеяние на реальном или виртуальном уровне энергии* связанного состояния. В нашем случае первое возбужденное связанное состояние возникает, если глубина ямы $u_{01} = \pi/d$. Тогда коэффициент прозрачности (3.65) $T \rightarrow 1$ при $e \rightarrow 0$. Возникают два вопроса. Во-первых, как ведет себя T в зависимости от энергии при близком к критическому значению глубины ямы. Во-вторых, как он зависит от энергии при

критической глубине. Разумеется, ответы на эти вопросы дает формула (3.65) при аккуратном разложении аргумента синуса в знаменателе. Пусть глубина ямы незначительно отличается от критической, т. е. $u_0 = u_{01} + \delta$ с $|\delta| \ll u_{01}$. Тогда в случае энергий $e \ll u_{01}$ получаем выражение, содержащее ответы на оба

вопроса:

$$T = \frac{e}{e + \frac{d^2}{16}(\delta + e)^2}. \quad (3.67)$$

Если $e \ll |\delta|$, получаем формулу, описывающую рассеяния на реальном или виртуальном уровне энергии данной ямы

$$T = \frac{e}{e + \frac{d^2}{16}\delta^2}. \quad (3.68)$$

Если $\delta > 0$, т. е. глубина ямы несколько превышает критическую, то нетрудно показать, что стоящая в знаменателе величина $d^2\delta^2/16$ представляет собой абсолютную величину энергии первого возбужденного связанного состояния $|e_1|$. В этом случае говорят о рассеянии на реальном уровне энергии. Если же $\delta < 0$, т. е. глубина ямы меньше критической и еще нет очередного реального уровня энергии связанного состояния, то считается, что рассеяние происходит на виртуальном уровне энергии. Во всех случаях формулу (3.68) можно записать через соответствующие волновые числа $k^2 = e$ и $\chi^2 = d^2\delta^2/16$:

$$T = \frac{k^2}{k^2 + \chi^2}. \quad (3.69)$$

Заметим, что все сказанное относится и к окрестностям других критических глубин ямы.

Ответ на второй вопрос получаем, полагая в формуле (3.67)

$$\delta = 0, \text{ так что } T = \frac{1}{1 + \frac{d^2}{16} k^2}. \quad (3.70)$$

Примеру прямоугольной ямы мы уделяем достаточно много внимания, поскольку здесь задача о рассеянии решается аналитически точно и наглядно иллюстрируются все интересующие нас явления. Важно также и то, что в других аналогичных случаях физические результаты оказываются подобными.

Отдельного внимания заслуживает область самого рассеивателя для $\rho(z)$. Во-первых, эта величина при всех энергиях имеет минимум. С классической точки зрения это соответствует уменьшению относительной плотности вероятности координат при движении частицы в яме, поскольку там скорость частицы увеличивается. Для барьеров, как мы уже отмечали, при надбарьерном движении скорость частицы уменьшается, что приводит к увеличению относительной плотности вероятности координат (образуется горб $\rho(z)$). Во-вторых, с ростом энергии число минимумов растет. Можно

полагать, что подобными свойствами обладают и другие потенциальные ямы на конечном интервале (рис. 60). Среди них – параболическая и линейная ямы, также допускающие точное аналитическое решение, хотя и не столь простое и наглядное, как в случае прямоугольной ямы.

Однако для плавно изменяющихся ям (рис. 61) ситуация требует особого внимания. Здесь выделяются яма Лапласа, допускающая точное аналитическое решение на основе функций Бесселя, и яма Экарта для которой также возможно точное аналитическое решение на основе гипергеометрической функции, а также имеется явная простая формула для коэффициента прозрачности, позволяющая выявить основные интегральные особенности рассеяния.

Конкретные вопросы по рассеянию на ямах плавных контуров (бесконечный интервал). Имеются ли энергии $e > 0$, при которых коэффициент прозрачности равен 1? При $e \rightarrow 0$ всегда $T \rightarrow 1$, если яма имеет критические параметры, т. е. в ней появляется очередной возбужденный уровень энергии. Для ямы Экарта ответ двузначный: при произвольных параметрах ямы такого не может быть, но зато при критических параметрах $T = 1$ для всех энергий (а не только для $e \rightarrow 0$). Для ямы Лапласа $u(z) = -u_0 e^{-|z|}$ критические глубины $u_0 = 1.4458; 3.67048; 7.61782; 12.3046; 18.7218; 25.8749; 34.7600; 44.3802;$

55.7331. Для ямы Гаусса $u(z) = -u_0 e^{-z^2}$ критические глубины $u_0 = 2.6833; 8.6481; 17.7945$.

Вопросы в связи с рассеянием на ямах. Что означает полная прозрачность для некоторых значений энергии $e > 0$ при рассеянии на ямах? Отдельный случай ям на конечном интервале, когда типичным примером служит прямоугольная яма с ее резонансными надъямными состояниями. Тогда можно объяснить это явление резонансным свойством интервала с учетом профиля ямы. Однако в случае плавно убывающих ям возникает вопрос о природе возможных безотражательных состояний. С другой стороны, яма Экарта с произвольными параметрами такими свойствами не обладает, хотя при определенных параметрах имеет сверхпрозрачность при всех энергиях. Чем объясняется особое поведение ямы Лапласа с выборочным набором параметров, у которых есть безотражательные энергии, тогда как для других наборов их нет? Каковы особенности других гладких ям (гауссовы, лоренцевы)? Что наблюдается в случае ям Морса и Ферми?

Заключительные замечания к рассеянию на ямах

Надъямное отражение – чисто квантовый эффект. По классическим представлениям все частицы проходят область расположения такого потенциала. При этом в яме кинетическая энергия и с нею скорость увеличиваются, так что относительная вероятность обнаружения классической частицы в яме уменьшается. В квантовой картине это приводит к впадине на графике зависимости квадрата модуля волновой функции от координаты в области ямы. При изменении параметров ямы и появлении очередного возбужденного связанного состояния возникает полная прозрачность при $e \rightarrow 0$, тогда как во всех других случаях $T \rightarrow 0$ при $e \rightarrow 0$. При подходе к этой ситуации, когда уже есть связанное состояние или вот-вот появится, наблюдается так называемое рассеяние соответственно на реальном или виртуальном уровне энергии. На фоне непрерывного спектра могут возникать отдельные значения энергии, при которых наблюдается полная прозрачность, т. е. $T = 1$. Существует множество особых потенциальных ям солитонного происхождения, обладающих безотражательностью для всех энергий рассеиваемых частиц. К их числу относится яма Экарта с определенным соотношением своих параметров. К этим сверхпрозрачным потенциалам мы и переходим в следующем подразделе.

3.3. Безотражательность (сверхпрозрачность) потенциалов солитонной природы

Когда она двигалась, казалось, что она скользит по воздуху, а не проходит сквозь него.

Рекс Стаут

Заканчиваем раздел о рассеянии особым случаем *безотражательности*, или *сверхпрозрачности*, потенциалов солитонного происхождения. Оказывается, существует целый класс потенциальных полей, для которых отсутствует отражение *при всех значениях энергии*. Последнее замечание существенно, так как при отдельных значениях энергии такой эффект возможен, что уже встречалось в этом разделе и будет предметом более детального изучения в следующем.

Вначале рассмотрим рассеяние на потенциальной яме Экарта произвольной формы
$$u(z) = -\frac{u_0}{\text{ch}^2(\alpha z)}. \quad (3.71)$$

Задача допускает точное решение [1] при всех значениях энергии e , однако мы ограничимся тем, что приведем окончательный ответ для уровней энергии связанных состояний

$$e_n = -\alpha^2 \left(\sqrt{\frac{u_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - n \right)^2, \quad n = 0, 1, \dots < \sqrt{\frac{u_0}{\alpha^2} + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \quad (3.72.)$$

и коэффициента прозрачности

$$T = \frac{\text{sh}^2(\pi k / \alpha)}{\text{sh}^2(\pi k / \alpha) + \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + 4u_0 / \alpha^2}\right)}, \quad (3.73)$$

где волновое число $k = \sqrt{e}$. Видно, что при рассеянии на таком потенциале с параметрами, связанными соотношением

$$\frac{u_0}{\alpha^2} = N(N+1), \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.74)$$

наступает *полная прозрачность для всех значений энергии*.

Именно такие значения параметров при $N > 0$ соответствуют симметричным профилям N -солитонных решений уравнения Кортевега-де Фриза [14].

Для связанных стационарных состояний целые числа N определяют количество уровней энергии в соответствующей потенциальной яме. При $N = 0$, т. е. $u_0 = 0$, яма отсутствует, связанных состояний еще нет, но уже ожидается появление основного уровня энергии при как угодно малой глубине ямы;

при $N = 1$, т. е. $\frac{u_0}{\alpha^2} = 2$, имеется основное связанное состояние

с энергией нулевых колебаний $e_0 = -\alpha^2 = -\frac{1}{2}u_0$, а первое

возбужденное состояние «проклевывается», ожидается, и т. д.

Другими словами, значения параметров u_0 и α в (3.74)

отвечают критическим профилям ям при появлении очередных уровней энергии в них.

Вначале рассмотрим рассеяние на потенциальной яме Экарта небольшой глубины $u_0 \ll \alpha^2$, когда имеется лишь одно

связанное стационарное состояние $|e| \approx \frac{u_0}{\alpha^2} u_0 \ll u_0$. Нетрудно убедиться, что для медленных частиц с $e \ll \alpha^2 / \pi^2$ коэффициент прозрачности (3.73) имеет типичное поведение (см. рис.78)

$$T \approx \frac{e}{e + |e_0|} . \quad (3.75)$$

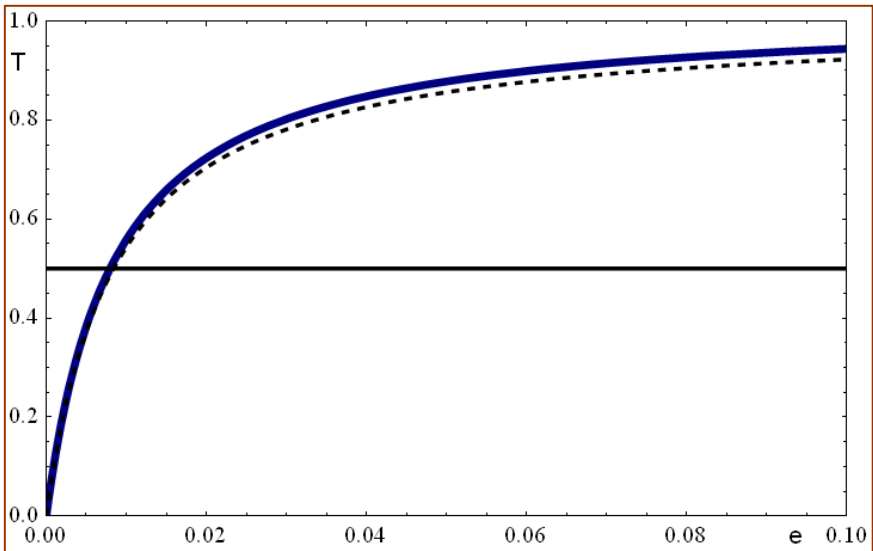


Рис.78. Низкоэнергетическое поведение прозрачности в сопоставлении с приближенной формулой (3.75), отображаемой штрихами.

Если же глубина ямы близка к первому критическому размеру

$$\frac{u_0}{\alpha^2} = 2 + \delta , \quad (3.76)$$

то для медленных частиц получаем также подобное выражение

$$T \approx \frac{e}{e + \frac{\alpha^2 \delta^2}{9}}. \quad (3.77)$$

Как можно убедиться, добавка к энергии в знаменателе при $\delta > 0$ имеет смысл абсолютной величины энергии первого возбужденного связанного состояния, так как $e_1 \approx -\frac{\alpha^2 \delta^2}{9}$.

Коэффициент прозрачности (3.75) в таком случае описывает явление *рассеяния на реальном уровне энергии*. При $\delta < 0$ яма еще не достигла критической глубины, но вот-вот новый уровень энергии связанного состояния должен появиться. В этом случае получаем *рассеяние на виртуальном уровне энергии*. Наконец, при $\delta = 0$ яма приобретает критические очертания, а прозрачность согласно (3.77) становится полной. В этом состоит различие между формулами (3.75) и (3.77), внешне похожими, но существенно различающимися в силу того, что энергия связи нулевых колебаний в как угодно слабой ямке остается конечной величиной, тогда как энергия связи первого возбужденного состояния может обращаться в ноль при критической глубине ямы (как при рассеянии на прямоугольной яме). Анимационный файл ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-e.exe демонстрирует низкоэнергетическое рассеяние на яме Экарта при изменении

ее глубины вблизи первого критического значения. Штрихи соответствуют приближенной формуле (3.77).

Добавим, что более наглядную картину ситуации с рассеянием на виртуальном уровне энергии дают графики зависимости коэффициента прозрачности от волнового числа

$$T \approx \frac{k^2}{k^2 + q^2}, \quad q = \frac{\alpha}{3} \delta. \quad (3.78)$$

Мы рассмотрели ситуацию с рассеянием на реальном и виртуальном уровнях энергии в первой критической ситуации, но то же касается всех других новых связанных состояний в яме.

Анимационные исполняемые файлы ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-k1.exe и ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-k2.exe показывают зависимость прозрачности от волнового числа при низкоэнергетическом рассеянии на яме Экарта вблизи первой и второй ее критических глубин. Штрихи соответствуют приближенным формулам вида (3.78).

С ростом энергии прозрачность ямы Экарта в общем случае стремится к единице по закону

$$T = 1 - 4 \exp\left(-\frac{2\pi k}{\alpha}\right) \cos^2\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 + \frac{4u_0}{\alpha^2}}\right). \quad (3.79)$$

При фиксированной энергии будет наблюдаться указанный немонотонный характер поведения прозрачности в зависимости от глубины ямы Экарта u_0 , что иллюстрируют рисунок 81 и анимация ANIM-TRANS-ECKART-u0-e.exe.

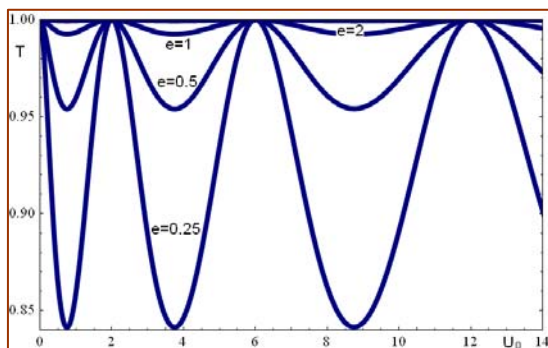


Рис.79. Зависимость коэффициента прозрачности T от глубины потенциальной ямы Экарта u_0 при $\alpha = 1$ и разных значениях энергии падающих частиц.

Еще раз подчеркнем особенность модели Экарта. С одной стороны, она является типичным представителем потенциальных ям, рассмотренных в предыдущем подразделе. С другой стороны, при определенных значениях параметров она превращается в симметричный потенциал солитонного происхождения с *полной прозрачностью для всех энергий*. Это демонстрируют файлы ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u02.exe, ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u06.exe и ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u012.exe.

Далее переходим к рассеянию на других потенциалах солитонной природы. Представителями многочисленных двухсолитонных формирований служат симметричный потенциал в виде ямы с двумя минимумами (помимо уже

рассмотренного с одним минимумом) и несимметричный, также с двумя минимумами. Три анимационных файла с разными параметрами ANIM-SCATT-2SOLIT-....exe (для краткости записи эти параметры явно не указываем) посвящены этим случаям рассеяния с полной прозрачностью при всех энергиях падающих частиц. То же касается трехсолитонных конфигураций с некоторыми профилями и соответствующих восьми анимационных исполняемых файлов ANIM-SCATT-3SOLITE-....exe.

Отметим то, что присуще всем случаям безотражательного рассеяния на солитонных ямах: на графиках зависимости квадрата модуля волновой функции от координат наблюдаются минимумы. Это характерно для всех примеров с ямами, что соответствует классическому увеличению скорости движения в области каждой ямы. При этом в солитонных ямах таких минимумов несколько: их число отвечает числу солитонов, или числу уровней энергии в этих ямах. При явном разделении ямы на отдельные солитонообразные профили это естественно, но такой эффект сохраняется и при других профилях данного семейства. Все это отчетливо демонстрируют указанные анимации для разных солитонных ям.

4. КВАЗИУРОВНИ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛОВУШКАХ

*Под ним струя светлей лазури,
Над ним луч солнца золотой...*

М.Ю.Лермонтов

Заключительный раздел нашей монографии мы посвящаем еще одному увлекательному квантовому явлению. Это – так называемые квазиуровни. Они пронизывают лоно сплошного энергетического спектра при особых условиях резонанса в потенциальных ловушках. Вычленим два типа таких ловушек. Во-первых, открытые, двусторонние ловушки, соответствующие инфинитному движению в двух направлениях при рассеянии (уровни энергии двукратного вырождения). Во-вторых, полуоткрытые, односторонние ловушки, соответствующие инфинитному движению в одном направлении (уровни энергии без вырождения). Вопросы, которые отнесены к данному разделу, тесно связаны с теми, которые служили предметом нашего рассмотрения в предыдущем разделе. От рассеяния на отдельных потенциальных барьерах и ямах, мы переходим к более сложным структурам, которые имеют физический смысл ловушек для квантовых частиц. Прежде всего, это двусторонние ловушки, которым отвечает инфинитное движение в двух направлениях, т. е. задача одномерного рассеяния в своеобразных полях, некоторые профили которых изображены на рисунке 80.

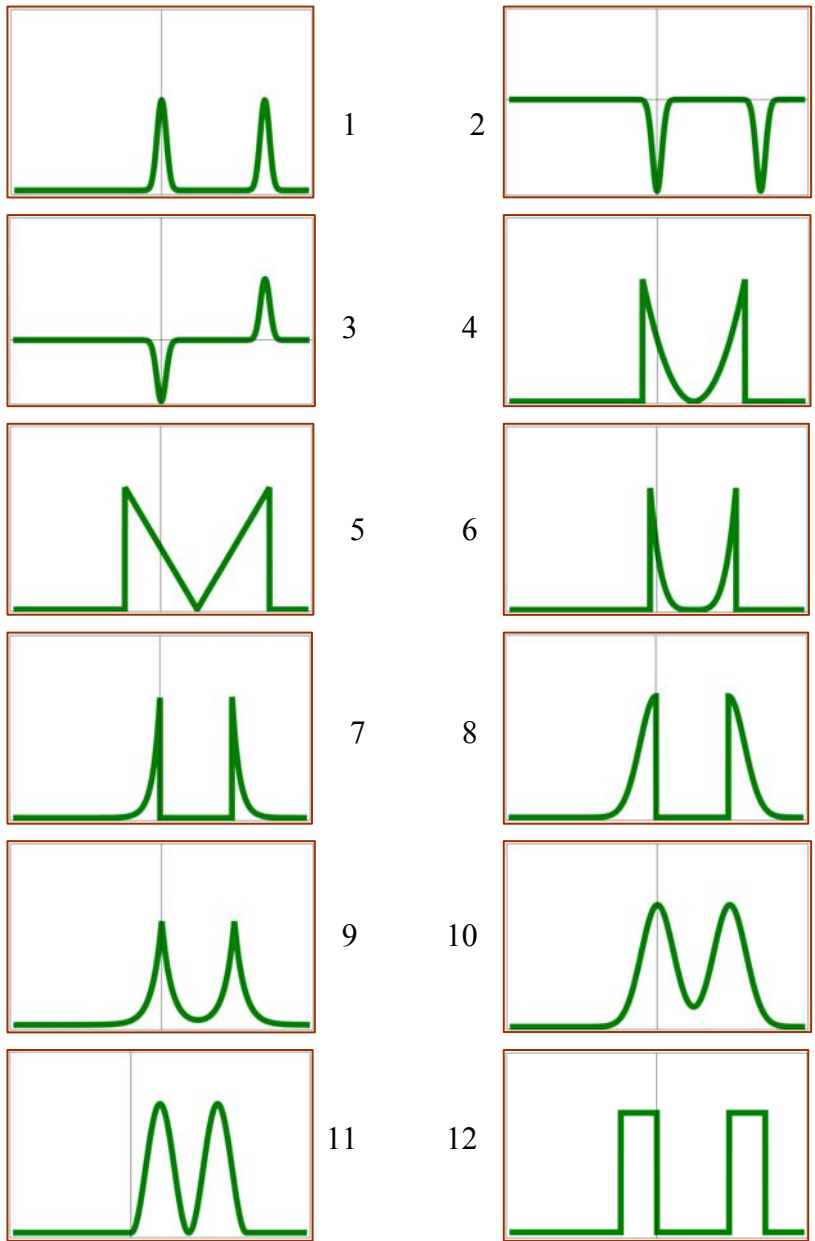


Рис.80. Формы двусторонних потенциальных ловушек.

4.1. Квазиуровни в двусторонних ловушках

*Темное небо прорезала
широкая серая полоса.
Гилберт Честертон*

Начнем с ловушки, построенной на основе двух дельта-потенциалов с интенсивностями a_1 и a_2 , расстояние между которыми равно d : $u(z) = a_1\delta(z) + a_2\delta(z - d)$. (4.1)

В задаче рассеяния при падении частиц слева записываем волновую функцию стационарного состояния в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{ikz} + Be^{-ikz}, & z < 0, \\ C_1e^{ikz} + C_2e^{-ikz}, & 0 < z < d, \\ Ce^{ikz}, & z > d. \end{cases} \quad (4.2)$$

Учитывая непрерывность волновой функции и скачки ее производной в точках действия дельта-барьеров, получаем связь амплитуд падающей и отраженной волн с амплитудой прошедшей:

$$A = C \left[\left(1 - \frac{a_1}{2ik}\right) \left(1 - \frac{a_2}{2ik}\right) + \frac{a_1 a_2}{4k^2} e^{2ikd} \right], \quad (4.3)$$

$$B = C \left[\frac{a_1}{2ik} \left(1 - \frac{a_2}{2ik}\right) + \left(1 + \frac{a_1}{2ik}\right) \frac{a_2}{2ik} e^{2ikd} \right], \quad (4.4)$$

а также коэффициенты ВФ в области между дельта-потенциалами $C_1 = C \left(1 - \frac{a_2}{2ik}\right)$ и $C_2 = C \frac{a_2}{2ik} e^{2ikd}$. (4.5)

Найденные выражения для амплитуд полностью решают задачу прохождения через систему из двух барьеров, поскольку волновая функция определяется с точностью до

нормировочного множителя. Так, для коэффициента прозрачности согласно (4.3) получаем общую формулу

$$T = \frac{1}{\left|1 + i(a_1 + a_2)/2/k - a_1 a_2 / 4/k^2 (1 - e^{2ikd})\right|^2}. \quad (4.6)$$

Оставим читателю возможность преобразовать это выражение с произвольными значениями интенсивностей барьеров к виду, показывающему осциллирующий характер прозрачности. Мы же преобразуем выражения (4.6) для трех конкретных примеров при $|a_1| = |a_2|$: два дельта-барьера, две дельта-ямы и дельта-яма и дельта-барьер. В первом случае, при $a_1 = a_2 = a > 0$, получаем коэффициент прозрачности

$$T = \left\{1 + \frac{a^2}{k^2} \left(1 + \frac{a^2}{4k^2}\right) \sin^2 [kd + \arctg(ka)]\right\}^{-1}. \quad (4.7)$$

Во втором случае, при $a_1 = a_2 = -a < 0$, он равен

$$T = \left\{1 + \frac{a^2}{k^2} \left(1 + \frac{a^2}{4k^2}\right) \sin^2 [kd - \arctg(ka)]\right\}^{-1}. \quad (4.8)$$

В третьем случае, при $a_1 = -a_2 = a > 0$, он выглядит еще проще:

$$T = \left\{1 + \frac{a^2}{k^2} \left(1 + \frac{a^2}{4k^2}\right) \sin^2 [kd]\right\}^{-1}. \quad (4.9)$$

Любопытно, что амплитуды осцилляций одинаковы во всех трех случаях. Полная прозрачность также наблюдается для всех трех вариантов при некоторых значениях энергии. Эти

дискретные элементы непрерывного энергетического спектра и являются *квазиуровнями*. Так, для сочетания яма-барьер имеем явное простое выражение для квазиуровней (рисунок 81)

$$e_n = \frac{\pi^2}{d^2} n^2, n = 1, 2, \dots \quad (4.10)$$

Поведение коэффициента прозрачности вблизи квазиуровней (рис. 82) описывается формулой Коши-Лоренца

$$T = \frac{\Gamma_n^2}{\Gamma_n^2 + (e - e_n)^2}, \quad (4.11)$$

где полуширины резонансов $\Gamma_n = \frac{2e_n}{ad} / \sqrt{1 + \frac{a^2}{4e_n}}$. (4.12)

Вторая особенность резонансного рассеяния заключается в резком возрастании квадрата модуля волновой функции внутри ловушки. Профиль этих пиков соответствует распределению координатных вероятностей в соответствующих связанных стационарных состояниях внутри ловушек: первый резонанс – основному состоянию с одним максимумом, второй резонанс – первому возбужденному состоянию с двумя максимумами и т. д. С ростом энергии ширины квазиуровней увеличиваются и резонансы размываются (как по энергии, так и по координатам). Подобными свойствами обладают и резонансные явления в тандемах дельта-потенциалов барьер-барьер и яма-яма.

Исследованию квазиуровней в других двусторонних ловушках посвящена серия наших интерактивных разработок с динамической визуализацией, выполненных в компьютерной системе Mathematica-6 (примеры см. на рис.86). Некоторые слайды на эту тему помещены в презентации «Квазиуровни».

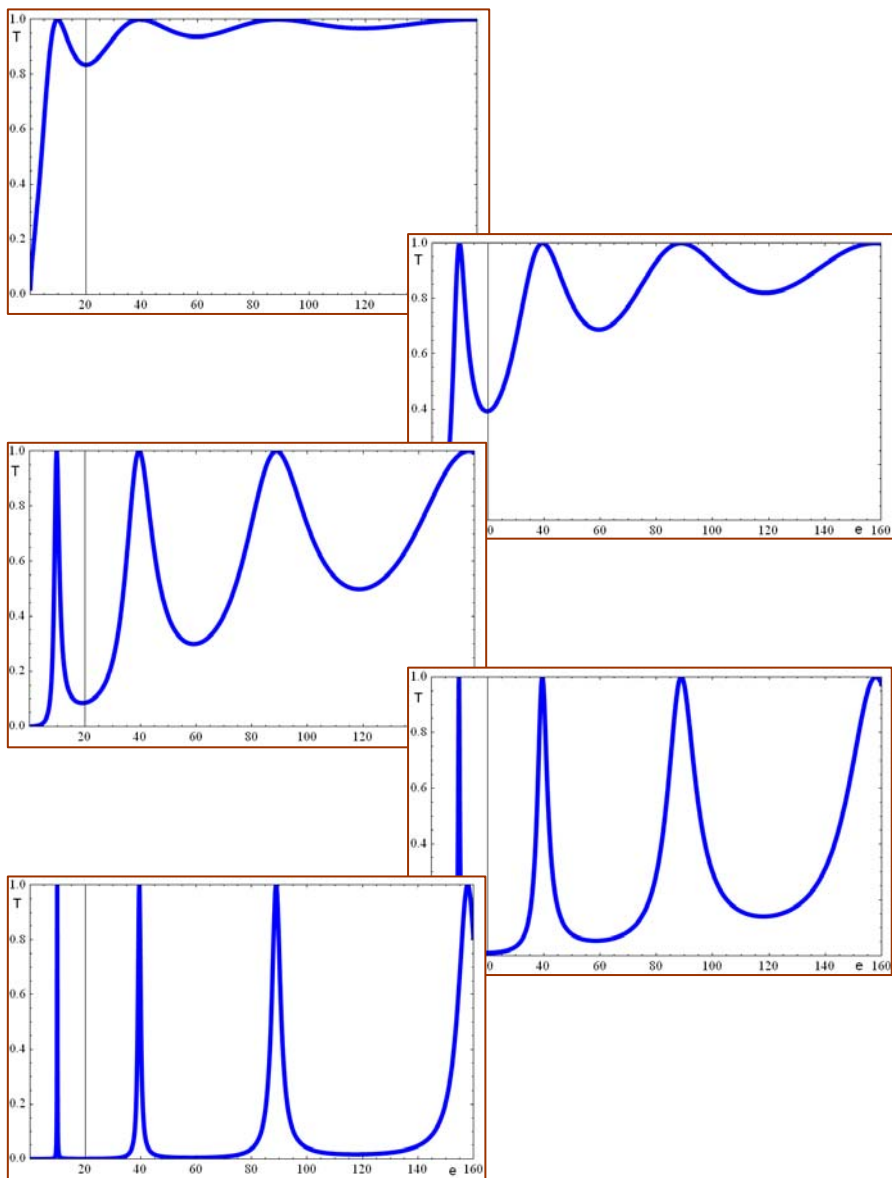


Рис.81. Резонансная прозрачность тандема яма-барьер из дельта-потенциалов при интенсивностях $a(2, 5, 10, 20, 40)$.

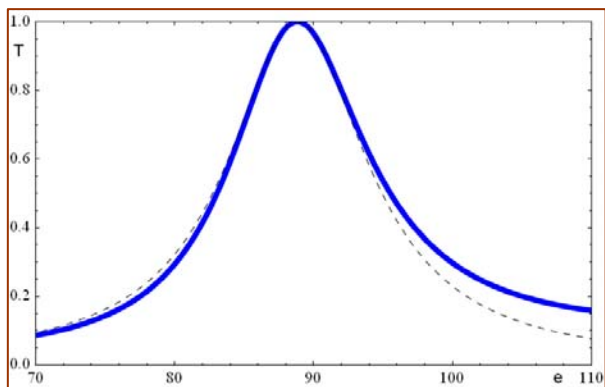
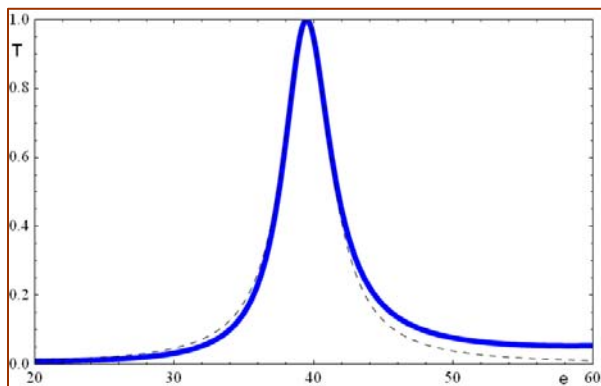
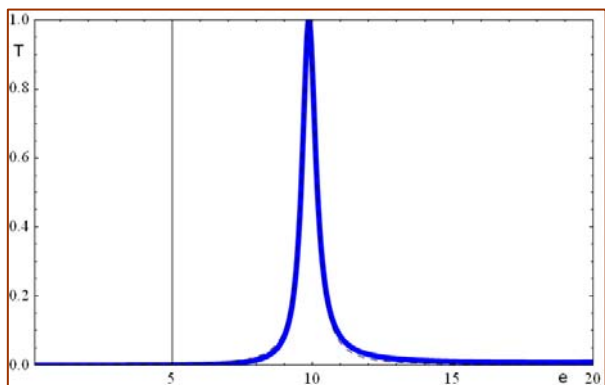


Рис.82. Пики прозрачности тандема яма-барьер из дельта-потенциалов при $a = 20$ (штрихи – по формуле Коши-Лоренца).

4.2. Квазиуровни в односторонних ловушках

*Через сонный пруд тянулся золотой искрящийся брод.
Юрий Поляков*

Теперь мы переходим к теме квазиуровней в потенциальных полях с граничными условиями непроницаемости, т. е. к полуограниченному движению. Энергетический спектр по-прежнему является непрерывным, но вырождение уровней энергии отсутствует. В соответствующих моделях потенциалов возникает ситуация, аналогичная прохождению частиц сквозь двусторонние ловушки. Примеры таких потенциальных конфигураций даны на рисунке 83. Как и в других случаях, задача может допускать точное решение стационарного УШ, что служит контролем для тех потенциалов, которые мы изучаем на основе численного решения. Начнем с примера, изображенного на рис.83-1. Имеется в виду случай, когда ловушку формирует дельта-барьер, который на рисунках мы изображаем, как и ранее, в виде всплеска высотой, равной интенсивности барьера a . Итак, потенциальная энергия равна

$$u(z) = a\delta(z - d), \quad z > 0, \quad (4.12)$$

а ограниченность движения $z > 0$ требует граничного условия $\psi(0) = 0$, так что ВФ стационарного состояния с энергией e и волновым числом $k = \sqrt{e}$ может быть записана в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} C \sin(kz), & 0 < z < d, \\ A \sin[k(z - d) + \delta], & z > d. \end{cases} \quad (4.13)$$

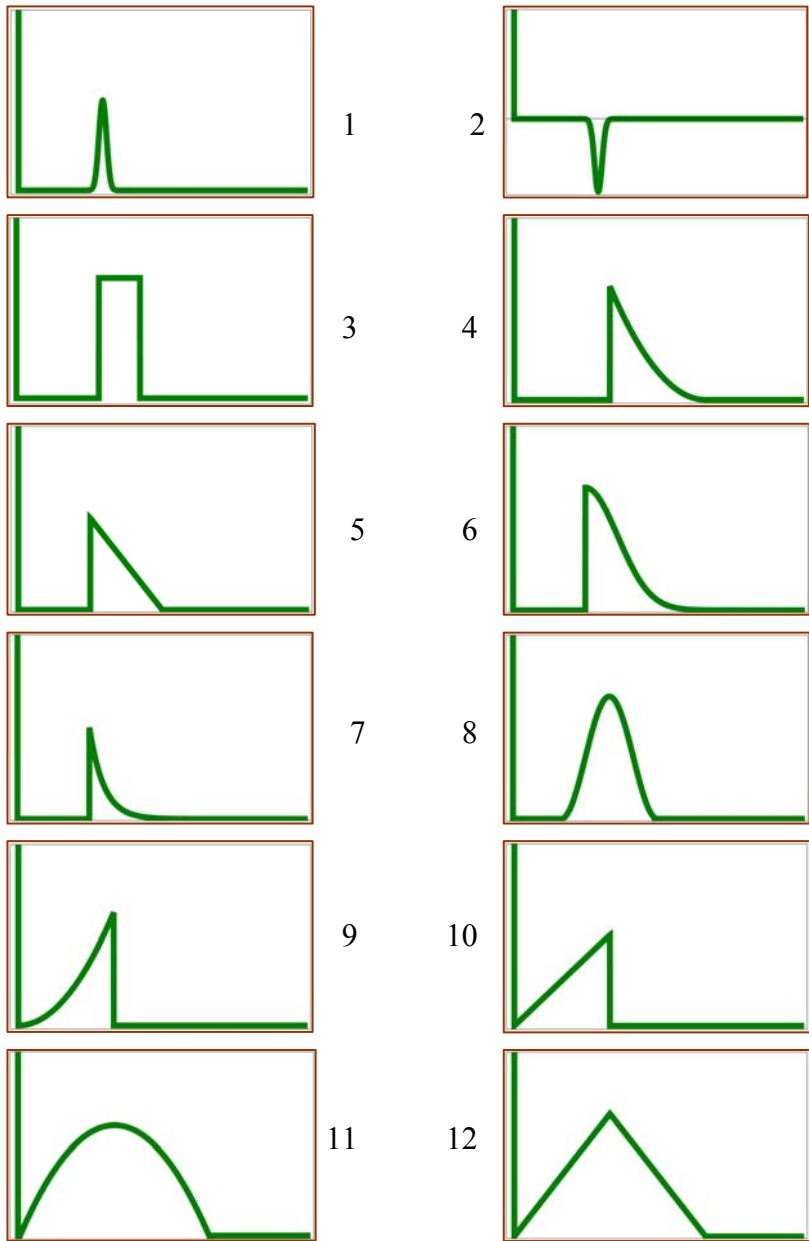


Рис.83. Формы односторонних потенциальных ловушек.

Условие непрерывности этой функции и скачка ее производной в точке действия дельта-потенциала $z = d$ приводит к следующим формулам для квадратов модулей амплитуд и фазовому сдвигу δ :

$$|A|^2 = |C|^2 \left[1 - \frac{a^2}{2k^2} \left(\sqrt{1 + \frac{4k^2}{a^2}} - 1 \right) + \frac{a^2}{k^2} \sqrt{1 + \frac{4k^2}{a^2}} \sin^2 \left(kd + \frac{1}{2} \arctg \frac{2k}{a} \right) \right],$$

$$\delta = \arctg \frac{\operatorname{tg}(kd)}{1 + \frac{a}{k} \operatorname{tg}(kd)}. \quad (4.14)$$

Ситуация напоминает ту, что наблюдается и в двусторонних ловушках: на фоне малой вероятности пребывания внутри ловушки при небольших энергиях появляются отдельные значения энергии, при которых возникает увеличение этой вероятности и даже резкие всплески ее. В нашем примере при

$$kd = \pi n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.14)$$

амплитуды сравниваются, сдвиг фазы отсутствует, так что барьера частицы не ощущают. При достаточно большой интенсивности барьера $a \gg 1/d$ вблизи указанных волновых чисел находятся еще более интересные величины

$$kd \approx \pi \left(1 - \frac{1}{ad} \right) n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.15)$$

Они соответствуют энергиям, при которых вероятность пребывания частиц внутри ловушки существенно возрастает и соотношение амплитуд таково:

$$|C|^2 \approx |A|^2 \frac{(ad)^2}{(\pi n)^2} \gg |A|^2. \quad (4.16)$$

Серия картинок на прилагаемом рисунке 84 иллюстрирует типичные резонансные ситуации в данной ловушке. Ту же цель преследует анимационная демонстрация в виде исполняемого файла ANIM-TRAP-DELTA.exe, а также динамическая визуализация Math-6-TRAPPING-DELTA.nb.

В случае других ловушек есть два пути решения задачи. Во-первых, барьерная область может быть построена из потенциала, допускающего частные решения УШ. Если барьер при этом примыкает к непроницаемой границе $z = 0$ и простирается до $z = d$, как условно изображено в примерах рис.83-9-12, то нужно построить частное решение $f(z)$, обращающееся в ноль на непроницаемой границе, т. е. $f(0) = 0$.

Тогда волновая функция может быть записана в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} Cf(z), & 0 < z < d, \\ A \sin[k(z-d) + \delta], & z > d. \end{cases} \quad (4.17)$$

Условие непрерывности этой функции и ее производной при $z = d$ дает возможность установить соотношение между амплитудами C и A , а также сдвиг фазы δ :

$$A^2 = C^2 \left\{ [f(d)]^2 + \frac{[f'(d)]^2}{k^2} \right\}, \quad \delta = \arctg \frac{kf(d)}{f'(d)}. \quad (4.18)$$

В качестве конкретного примера рассмотрим случай ловушки с полупараболическим барьером (рис.83-9)

$$u(z) = \begin{cases} az^2, & 0 < z < d, \\ 0, & z > d. \end{cases} \quad (4.19)$$

Частное решение, обращающееся в ноль при $z = d$, есть разность соответствующих функций параболического цилиндра

$$f(z) = D \frac{e^{-1}}{2\sqrt{a} - 1/2}(\sqrt{2}a^{1/4}z) - D \frac{e^{-1}}{2\sqrt{a} - 1/2}(-\sqrt{2}a^{1/4}z). \quad (4.20)$$

Полное решение задачи дают формулы (4.17) и (4.18). Оно лежит в основе иллюстраций на рис.85 и анимации ANIM-TRAP-z20.exe, а также интерактивной разработки с динамической визуализацией Math-6-TRAPPING-z20.nb.

Наконец, самый общий метод пригоден для любых форм односторонних ловушек и заключается в численном решении УШ с начальным условием $y(0) = 0$ и $y'(0) = 1$ и заданным потенциалом $u(z)$, простирающимся до некоторой точки $z = d$. Получаемое численное решение УШ и соответствующая производная в этой точке определяют амплитуду и сдвиг фазы по формуле (4.18) с $C = 1$. Ряд анимаций и файлов с динамической визуализацией посвящены исследованию квазиуровней в односторонних ловушках (см. Приложение 2).

4.3. Общие замечания о ловушках

*Наука никогда не решает вопроса,
не поставив при этом десятка новых.*

Дж.Б.Шоу

Подробное обсуждение физического смысла явлений, связанных с ловушками, и качественных деталей на основе аналитических расчетов см. в монографии [15]. Мы оставляем читателю также подобрать оптические и акустические аналоги ловушек, изучить влияние несимметричного построения двусторонних ловушек на прозрачность. Детально исследовать окончательные аналитические формулы на основе точных решений в предельных случаях входящих в них параметров. Обращаем внимание также на примеры, когда двусторонние ловушки состоят из цепочек потенциальных барьеров. Метод матрицы связи локальных решений особенно удобен для аналитического исследования квазиуровней в таких ловушках. Эти формирования дают еще один подход к пониманию образования зон, так что мы завершаем разговор о явлениях в системах с непрерывным энергетическим спектром объектами, с которых и начинали вторую часть нашей монографии. Добавим, что подробное исследование на основе интегральных уравнений см. в монографии [15], а также описание на основе квазиклассических методов дано в [7].

Заметим, что более полное представление о физических явлениях в ловушках можно получить лишь в условиях нестационарных состояний, что надеемся проиллюстрировать в третьей части нашей книги. Именно пакетное движение «в реальном времени» дает более наглядное представление о резонансных процессах с захватом (и распадом) частиц в ловушках разных типов.

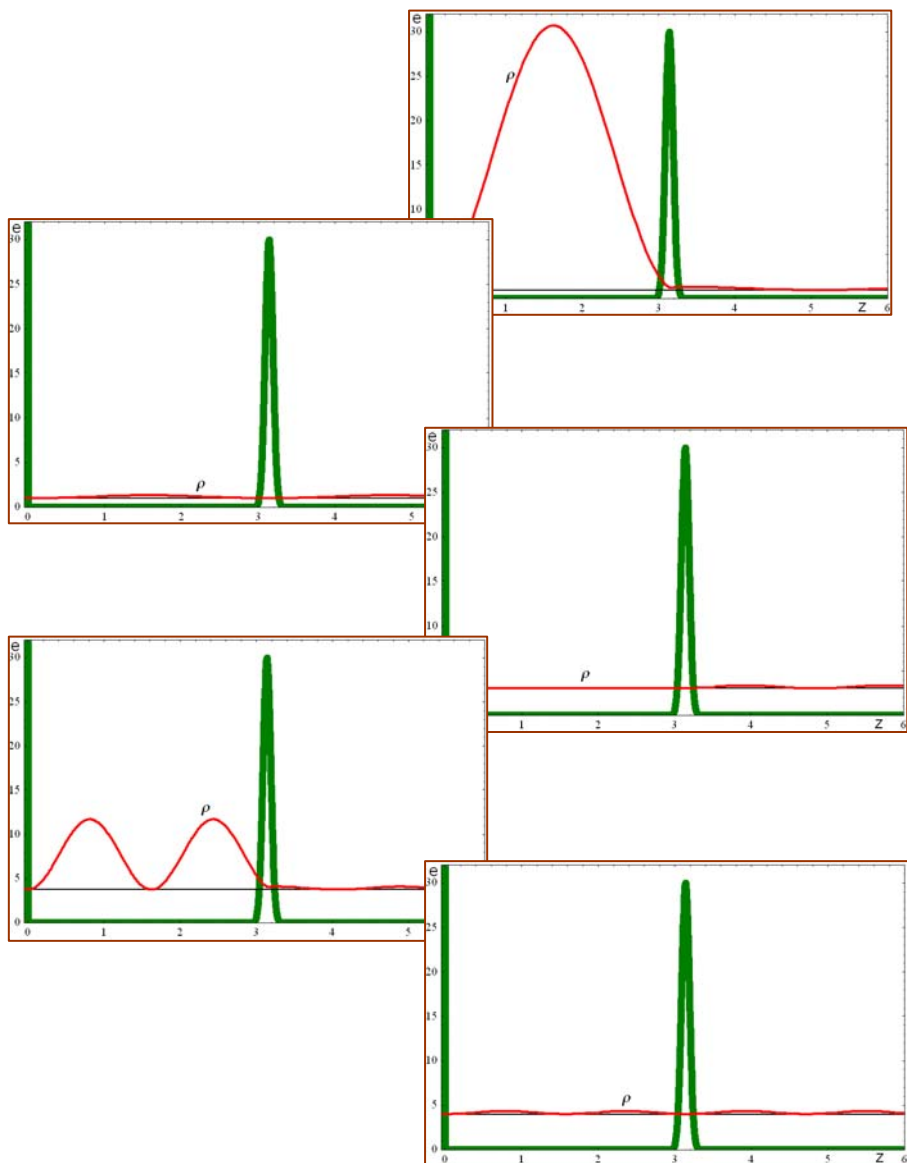


Рис.84. Односторонняя ловушка шириной π с дельта-барьером интенсивностью 10. Стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни 0.9374 и 3.749.

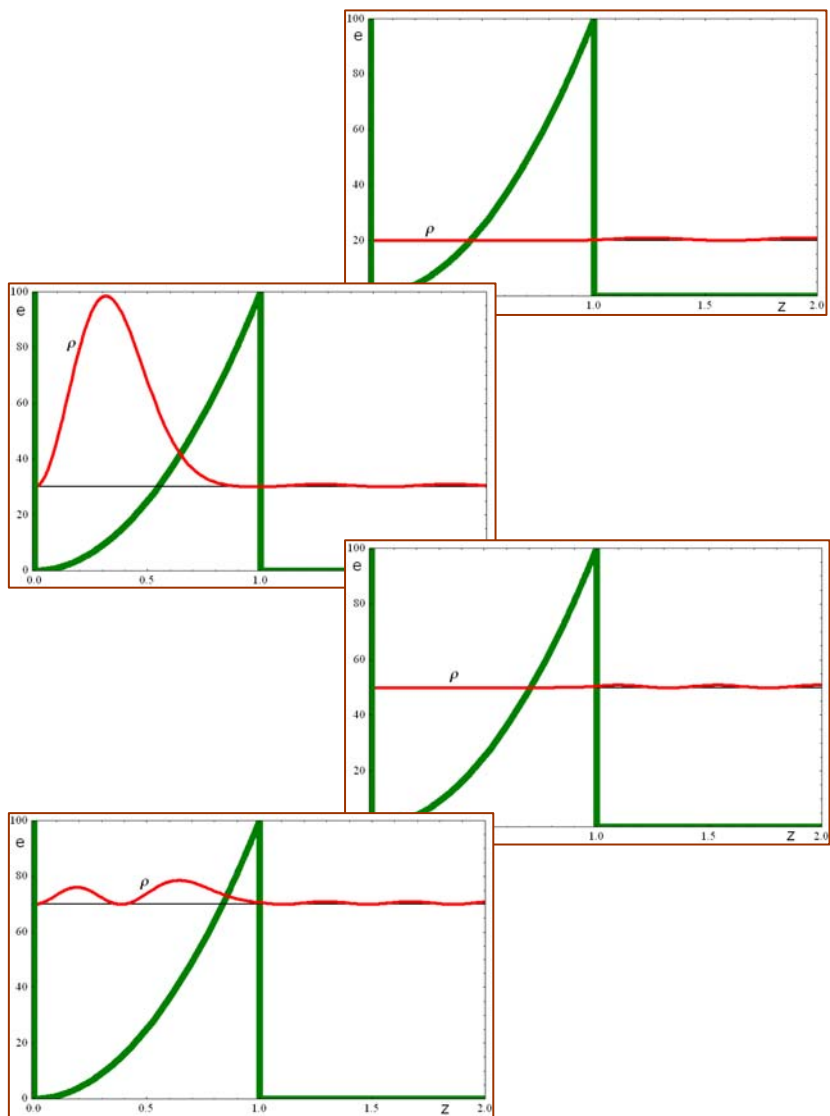


Рис.85. Односторонняя ловушка с полупараболическим барьером высотой 100. Стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни 30 и 70.

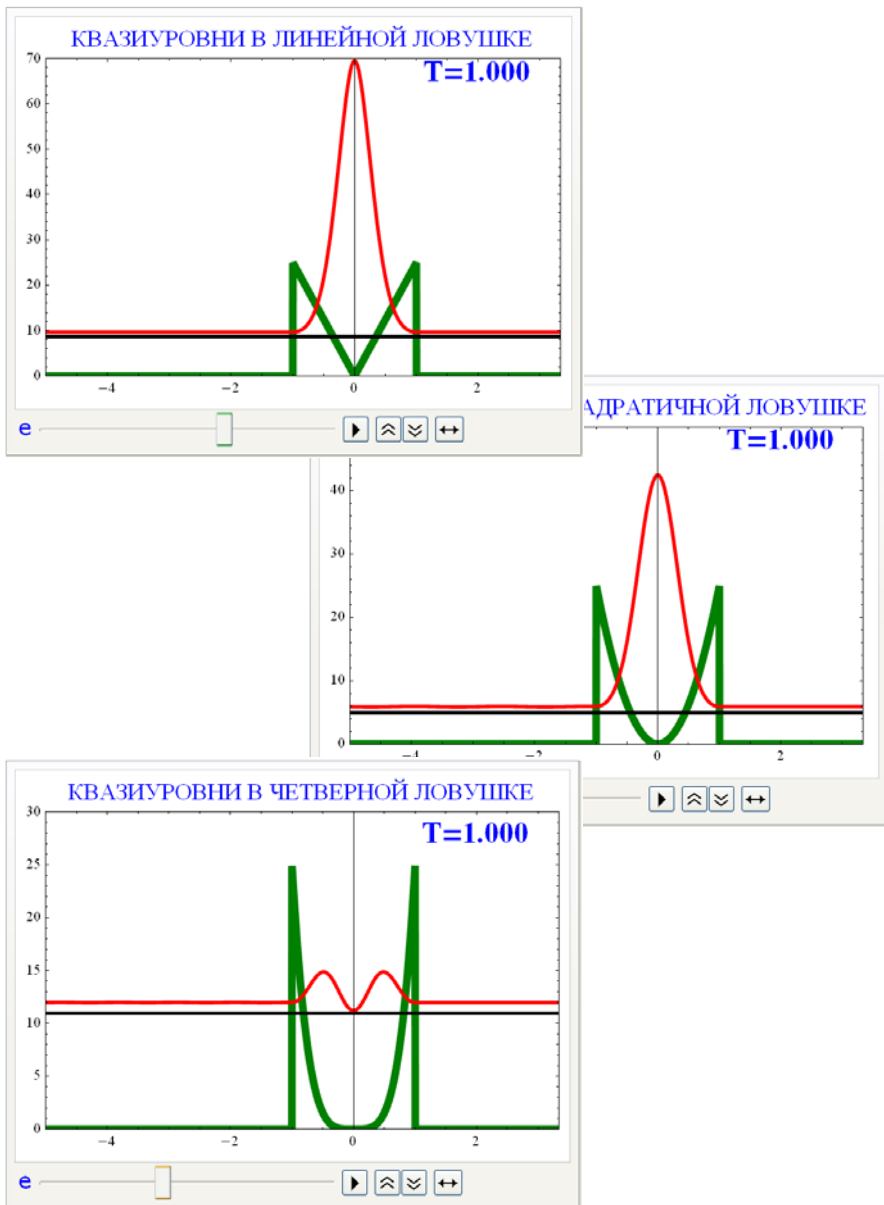


Рис.86. Примеры с динамической визуализацией рассеяния в случае двусторонних степенных ловушек.

ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В завершение еще раз подытожим то, что относится к квантовым явлениям, послужившим объектами наших исследований.

В разделе об энергетических зонах: расположение полос разрешенных энергий (зон) и запрещенных (щелей, лагун), закон дисперсии и блоховские волны, структурные преобразования в зонах спиновых потенциалов, конечнозонность.

В разделе о вытеснении ССС: критические условия, существование ССС в как угодно слабых локализованных потенциальных полях притяжения и возможность вытеснения ССС в случае различных влияний (соседние области отталкивания, границы и т. д.).

В разделе о рассеянии: детальный ход рассеяния в координатном представлении и интегральный результат в виде зависимости коэффициента прозрачности от энергии, надъямное отражение, рассеяние в критическом диапазоне энергий, резонансные состояния, квазиуровни, рассеяние на реальных и виртуальных уровнях, безотражательность (сверхпрозрачность).

В разделе о квазиуровнях: резкое возрастание относительной плотности вероятности координат частицы в области ловушек при некоторых резонирующих значениях уровней энергии на фоне непрерывного энергетического спектра.

При компьютерном исследовании чаще всего обнаруживаются предсказуемые свойства изучаемых явлений, но иногда попадаются и неожиданные особенности.

Во многих случаях мы оставляем читателю делать выводы на основе полученных результатов, представленных на графиках многочисленных рисунков и в анимационных демонстрациях.

Замечания о компьютерной системе Mathematica

В новых версиях этой системы (начиная с 6-й) появилась так называемая *динамическая интерактивность* при графической визуализации. Достигается чрезвычайно важный эффект непосредственного наблюдения влияния изменений различных параметров на исследуемое явление в диалоговом режиме.

Так, в разделах о рассеянии и квазиуровнях мы приводим некоторые разработки в качестве примеров применения новых возможностей этой компьютерной системы. Они собраны отдельно на прилагаемом компакт-диске.

Однако следует иметь в виду, что неудобство для широкого круга пользователей состоит в необходимости иметь под рукой саму систему, поскольку Mathematica не дает возможности создавать исполняемые файлы, не зависящие от среды программирования. Поэтому большинство наших разработок на конечном этапе выполнены с помощью других языков визуального программирования в виде исполняемых файлов, хотя все предварительные операции осуществляются именно с помощью аппарата системы Mathematica (аналитически, численно и графически).

ПОСЛЕСЛОВИЕ

*И граф уехал... Тем и сказка
Могла бы кончиться, друзья;
Но слова два прибавлю я.
А.С.Пушкин*

Вторая часть нашей монографии посвящена исследованиям квантовых явлений в системах, имеющих стационарные состояния с непрерывным энергетическим спектром, включая зонный спектр, а третью часть планируется посвятить нестационарным состояниям.

Важно снова повторить то, что уже было сказано в послесловии к первой части.

Еще и еще раз нужно отметить, что многие результаты представлены таким образом, чтобы можно было с ними работать *интерактивно* с помощью авторских компьютерных разработок на прилагаемом к монографии компакт-диске, который является *неотъемлемой частью книги*.

Следует вновь подчеркнуть один важный принципиальный момент. Читатель уже, вероятно, заметил, что некоторые вопросы в книге оставлены без ответа, что кое-что упомянуто, но не доведено до конца. Чаще всего это сделано умышленно. Авторская позиция такова: решение не должно быть исчерпывающим, темы не должны закрываться. Всегда должна оставаться перспектива продолжения. Решение одной проблемы должно *порождать новые направления* исследований. Читателю нужно оставить поле для самостоятельной деятельности.

Особый вопрос заключается в применении получаемых теоретических результатов к реальным физическим объектам. Заметим, что современные нанотехнологии позволяют создавать условия, при которых системы с рассматриваемыми потенциальными моделями и чисто квантовыми явлениями могут в полной мере реализоваться на практике. Конкретные приложения, однако, выходят за рамки наших исследований.

Январь 2013 года

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). - М.: Наука, 1989. - 768 с.
2. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. Ч.2. - М.: Наука, 1978. - 448 с.
3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т.1. - М.: Мир, 1974. - 344 с.
4. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Высш. шк., 1980. - 216 с.
5. Ульянов В.В. О структуре энергетических зон в одномерном случае.// УФЖ. - 1974. - Т. 19, № 5. - С. 867-868.
6. Ульянов В.В., Косевич Ю.А. О структуре энергетических зон в одномерном случае. II// УФЖ. - 1980. - Т. 25, № 3. - С. 468-475.
7. Ульянов В.В. О квазиклассическом движении частиц в полях с особенностями. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 24 с.
8. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. - М.: Мир, 1968. - 264 с.
9. Справочник по специальным функциям. - М.: Наука, 1979. - 832 с.
10. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - М.: Физматгиз, 1962. - 1100 с.
11. Дьяконов В.П. Mathematica 5/6/7. Полное руководство.- М.: ДМК Пресс, 2009. - 624 с.
12. Ульянов В.В., Ульянов Н.В. Компьютерные исследования квантовых явлений. Часть 1-я. - Х.: ХНУ им. В.Н.Каразина, 2012. - 208 с.

13. Ulyanov V.V, Zaslavskii O.B. New methods in the theory of quantum spin systems // Phys. Rep. - 1992. - V.216, N 4. - P. 179-251.
14. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.
15. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Высш. шк., 1982. - 160 с.
16. Теория солитонов/Захаров В.Е., Манаков С.В., Новиков С.П., Питаевский Л.П. - М.: Наука, 1980. - 320 с.
17. Бриллюэн Л., Пароди М. Распространение волн в периодических структурах. - М.: Изд-во ИЛ, 1959. - 458 с.
18. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. - М.: Наука, 1976. - 576 с.
19. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье. - М.: Наука, 1967. - 300 с.
20. Стретт М.Д.О. Функции Ламе, Матье и родственные им в физике и технике. - Х.-К.: Гостехиздат Украины, 1935. - 238 с.
21. Сикорский Ю.С. Элементы теории эллиптических функций с приложениями к механике. - М.-Л.: Гостехиздат, 1940. - 155 с.
22. Мак-Лахлан Н. Теория и приложения функций Матье и родственные им в физике и технике. - М.: ИЛ, 1953. - 477 с.
23. Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. - М.: Наука, 1972. - 718 с.

ДОПОЛНЕНИЕ

К монографии прилагается компакт-диск, на котором содержатся: анимационные демонстрации, компьютерные стенды для наблюдения исследуемых квантовых систем в зависимости от изменяемых параметров, интерактивные разработки в системе Mathematica с динамической визуализацией, презентации с различными рисунками и графиками, а также электронные версии некоторых авторских книг по квантовой теории (файлы формата pdf):

- A. Ульянов В.В. Задачи по квантовой механике и квантовой статистике. - Х.: Высш. шк., 1980. - 216 с.
- B. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. - Х.: Высш. шк., 1982. - 160 с.
- C. Ульянов В.В. Методы квантовой кинетики. - Х.: Высш.шк., 1987. - 144 с.
- D. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 1-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 40 с.
- E. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике. Часть 2-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 28 с.
- F. Ульянов В.В. Вступ до квантової кінетики. - Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2004. - 164 с.
- G. Василевская Ю.В., Ульянов В.В. Новые квазиточнорешаемые модели в квантовой теории спиновых систем. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2005. - 124 с.
- H. Ульянов В.В. О квазиклассическом движении частиц в полях с особенностями. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2002. - 24 с.
- I. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 3-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.
- J. Ульянов В.В. Конспект вводных лекций по квантовой механике. Часть 4-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 52 с.

- К. Ульянов В.В. Конспект лекций по квантовой статистике.
Часть 1-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 40 с.
- Л. Ульянов В.В. Конспект лекций по квантовой статистике.
Часть 2-я. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 40 с.
- М. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике.
Часть 1-я. 2-е изд., доп. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011.
- 48 с.
- Н. Ульянов В.В. Вводные лекции по квантовой механике.
Часть 2-я. 2-е изд., доп. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011.
- 48 с.
- О. Ульянов В.В. Лекции по квантовой механике. Часть 5-я. - Х.:
ХНУ имени В.Н.Каразина, 2011. - 44 с.
- Р. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 1. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2011. - 84 с.
- Q. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 2. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2011. - 106 с.
- Р. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 3. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 102 с.
- S. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 4. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 66 с.
- Т. Ульянов В.В. Сборник обзоров и статей по квантовой теории.
Ч. 5. Электронное издание. - Х.: ХНУ имени В.Н.Каразина,
2012. - 68 с.
- U. Ульянов В.В., Ульянов Н.В. Компьютерные исследования
квантовых явлений. Часть 1-я. - Х.: ХНУ им. В.Н.Каразина,
2012. - 208 с.
- V. Ульянов В.В., Ульянов Н.В. Компьютерные исследования
квантовых явлений. Часть 2-я. - Х.: ХНУ им. В.Н.Каразина,
2013. - 272 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

ТАБЛИЦЫ КРАЙНИХ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В
ЗОНАХ СИНУСОИДАЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

$$a = 0.1$$

n

e_n

0 0.09875034160034820309149921304

1 1.04968944896403484147359052611

2 1.14968554290054025536718181399

3 4.09979166892717130081819444936

4 4.10104132190156417904886589896

5 9.10015430093635849635325070601

6 9.10015820699561456140030886561

7 16.1000833310402775979769969106

8 16.1000833364655343973870299517

9 25.1000520834200224884717692808

n	$a=0.5$ e_n
0	0.46896060452438267556149027182
1	1.24242882598662974339949054767
2	1.74194112824291514482231057478
3	4.49479307863211894594328093444
4	4.52582908464560324171350493521
5	9.50366486704623913463365662695
6	9.50415255154693478030510107620
7	16.5020819010381729872707381299
8	16.5020852904671956299828797077
9	25.5013021322268408136620910895

n	$a=1$ e_n
0	0.87823445505891730405576889596
1	1.47065435493383911157049233010
2	2.46676684251605577430823849010
3	4.97918921575135718458629726631
4	5.10090059556048062644048982433
5	10.0137198389203933290606058113
6	10.0176069277975086666646723539
7	17.0083104597094781893751216200
8	17.0083646227230073882481135913
9	26.0052090102938259621141711261

n	$a=4$ e_n
0	2.48604311494347974581835604774
1	2.60932349877467710501408243676
2	6.37919988048868602980380975245
3	7.67223270649719089686734803370
4	9.17266513335829419320385485920
5	13.1406277377664408276229705183
6	13.3703224836211040129447116015
7	20.1276879525226278261670837087
8	20.1412037855849365418286139436
9	29.0833490304442276567332254409

n	$a=10$ e_n
0	4.19995397914849158089652748569
1	4.20991940136222895618050097867
2	11.8581875415477508851543731273
3	12.0994604454866653639556545688
4	17.4491097395291778124810162660
5	19.2363277136937014114039549058
6	21.5488320363434007962310581151
7	26.6482199371697769057764318939
8	27.0965816843660479772647336069
9	35.5108160463032213763043985293

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ПЕРЕЧЕНЬ ПРЕЗЕНТАЦИЙ, АНИМАЦИЙ И СТЕНДОВ

Вначале дадим краткое описание соответствующих файлов, содержащихся на прилагаемом компакт-диске.

Презентации содержат рисунки, иллюстрирующие основной материал книги, картинки с экрана монитора во время показа анимаций, общий вид исследовательских стендов для интерактивного общения и другие материалы. Презентации к первому и третьему разделам содержат по 300 слайдов, тогда как для второго и четвертого разделов они оказались скромнее (порядка 50 слайдов). Все презентации преобразованы в файлы с расширением pdf.

Анимационные демонстрации ведутся с помощью специально созданных авторских стендов, на которых имеются краткое содержание объекта изучения и элементы *управления* показом: регуляторы скорости (дискретные и непрерывные) и направления воспроизведения, а также окошки с отсчетом номеров кадров.

Стенды мы разработали для более детального *интерактивного* исследовательского общения пользователя с системами, обсуждаемыми в соответствующих разделах монографии. К ним относятся и специальные интерактивные программы в системе Mathematica с *динамической визуализацией*.

1. К первому разделу

Презентация «Зоны.pdf».

Анимации

ANIM-BANDS-COS-a0-4.exe. Изменение синусоидального потенциала с амплитудой от $a = 1/2$ до 10 и трех зон.

ANIM-BANDS-COS-disp-law-a0-4-3.exe. То же и закона дисперсии в трех нижних зонах (схема приведенных зон).

ANIM-BANDS-COS-disp-law-2-a0-4-3.exe. То же и закона дисперсии в трех нижних зонах (схема расширенных зон).

ANIM-BANDS-COS-PERIOD-a1.exe. Изменение периода синус-потенциала с амплитудой $a=4$ и трех нижних зон.

ANIM-BANDS-COS-PERIOD-a4.exe. То же с амплитудой $a=10$.

ANIM-BANDS-v1-dpi-a-06-b0.exe. Три зоны линейного симметричного периодического потенциала «пила с изломами» при изменении амплитудного параметра a от 0 до 6.

ANIM-BANDS-v1-2-a0-10.exe. Три зоны линейного потенциала «пила с разрывами» при изменении параметра a от 0 до 10.

ANIM-BANDS-v2-dpi-a-05-b0.exe. Три зоны симметричного периодического потенциала с параболическими ямами-ячейками при изменении амплитудного параметра a от 0 до 5.

ANIM-BANDS-v2-2-a0-20.exe. Синусоидальная аппроксимация периодического потенциала с дважды параболическими ячейками при изменении параметра a от 0 до 20.

ANIM-BANDS-DIRAC-dpi-a010-b0.exe. Деформации потенциала «гребёнка Дирака» с периодом π и трех низших зон при изменении амплитудного параметра a от 0 до 10.

ANIM-BANDS-DIRAC-DISP-LAW.exe. Закон дисперсии (схема расширенных зон) в трех нижних зонах потенциала «гребёнка Дирака» при изменении амплитудного параметра a от 0.1 до 2.

ANIM-BANDS-DIRAC-DISP-LAW-2.exe. То же для схемы приведенных зон.

ANIM-WAVE-FUNC-v1-2-0-a1.exe. Блоховские функции нулевой зоны потенциала «пила с разрывами» для амплитудного параметра $a=1$.

ANIM-BANDS-CN-CN-n1.exe. Преобразования однозонного кноидального потенциала и его зоны при изменении параметра эллиптических функций Якоби m от 0 до 1.

ANIM-BANDS-CN-CN-n2.exe. То же для двухзонного кноидального потенциала и его зон.

ANIM-POT-SN-CN-B1-S0-2.exe. Формы спинового потенциала с эллиптическими функциями Якоби в случае магнитного поля $B=1$ при изменении спинового параметра S от 0 до 2.

ANIM-POT-SN-CN-S1-B0-2.exe. Формы спинового потенциала с эллиптическими функциями Якоби в случае спина $S=1$ при изменении параметра магнитного поля B от 0 до 2.

ANIM-BANDS-S12.exe. Спиновый потенциал в случае $S=1/2$ и две спиновые зоны при изменении магнитного поля B от 0 до 1.

ANIM-BANDS-B1-S0-12.exe. Спиновый потенциал в случае $B=1$ и две зоны при изменении спинового параметра S от 0 до $1/2$.

2. Ко второму разделу

Презентация «Вытеснение связанных состояний.pdf».

Анимации

ANIM-RECT-d.exe. Наблюдается непрерывная деформация прямоугольной ямы при изменении ее ширины d . Демонстрируется существование основного связанного состояния в как угодно узкой яме. Показаны положение основного уровня энергии и вид $\rho_0(z)$.

ANIM-RECT-u0.exe. То же при изменении глубины ямы.

ANIM-CRITICAL-STATES-1.exe. Наблюдается вытеснение основного связанного состояния в прямоугольной яме у непроницаемой границы при изменении ширины ямы за счет передвижения этой границы.

ANIM-CRITICAL-STATES-2.exe. То же при изменении глубины ямы.

ANIM-CRITICAL-STATES-3.exe. Ситуация с вытеснением связанного состояния в дельта-яме за счет перемещения непроницаемой границы.

ANIM-CRITICAL-STATES-4.exe. Наблюдается вытеснение основного связанного состояния в прямоугольной яме у ступенчатого граничного барьера при увеличении высоты этого барьера.

ANIM-CRITICAL-STATES-5.exe. Ситуация с вытеснением связанного состояния в дельта-яме за счет перемещения дельта-барьера.

ANIM-CRITICAL-STATES-6-1.exe. Наблюдается вытеснение CCC двух дельта-ям с одним уровнем энергии дельта-барьером при увеличении интенсивности этого барьера.

ANIM-CRITICAL-STATES-6-2.exe. Наблюдается попытка вытеснения CCC двух дельта-ям с двумя уровнями энергии дельта-барьером при увеличении интенсивности этого барьера.

3. К третьему разделу

Презентация «Рассеяние.pdf».

Анимации

ANIM-SCATTERING-DELTA.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на дельта-барьере с интенсивностью $a=2$ для энергий от 1 до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATTERING-z2-power.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на чисто степенном квадратичном барьере для энергий от -2 до 2. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATTERING-z1-power.exe. То же на чисто степенном линейном барьере.

ANIM-SCATTERING-z4-power.exe. То же на чисто степенном четверном барьере для энергий от -2 до 5.

ANIM-SCATT-z2.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на параболическом барьере высотой 5 на конечном интервале для

энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-z4-u0.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на четверном барьере высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-z1-u0.exe. То же на линейном барьере.

ANIM-SCATT-RECT-u0-1.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на прямоугольном барьере высотой 1 на конечном интервале для энергий от $1/2$ до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-GAUSS-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Гаусса высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-GAUSS-u05.exe. Аналогичная демонстрация для барьера Гаусса при высоте 5 для энергий от $1/4$ до 10.

ANIM-SCATT-4GAUSS-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере типа Гаусса с четверной вершиной высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-4GAUSS-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере типа Гаусса с четверной вершиной высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-LORENZ-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Коши-Лоренца высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-LORENZ-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Коши-Лоренца высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-4LORENZ-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере типа Коши-Лоренца с четверной вершиной высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-4LORENZ-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере типа Коши-Лоренца с четверной вершиной высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-LAPLACE-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Лапласа высотой 2 на конечном интервале для

энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-LAPLACE-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Лапласа высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-MORSE-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Морса высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 4. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-MORSE-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Морса высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-ECKART-u02.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Экарта высотой 2 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-ECKART-u05.exe. Демонстрация детального хода рассеяния на барьере Экарта высотой 5 на конечном интервале для энергий от $1/4$ до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATTERING-z2-power-nonsymm.exe. Показан детальный ход рассеяния на несимметричном квадратичном барьере для энергий от -2 до 2. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u02-e14-5.exe. Безотражательное рассеяние на потенциальной яме Экарта глубиной 2 (односолитонный потенциал) для энергий от 0.25 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u06-e14-5.exe. Безотражательное рассеяние на потенциальной яме Экарта глубиной 6 (двухсолитонный потенциал) для энергий от 0.25 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-WELL-ECKART-u012-e14-5.exe. Безотражательное рассеяние на потенциальной яме Экарта глубиной 12 (трехсолитонный потенциал) для энергий от 0.25 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-2SOLIT-4-1-15.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме с энергетическими уровнями -1 и -4 и квазивременем $1/5$ для энергий от 0.1 до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-2SOLIT-3-1-0.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме с энергетическими уровнями -1 и -3 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-2SOLIT-4-441-0.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме с энергетическими уровнями -4 и -4.41 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-4-3-1-0.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме с энергетическими уровнями -1, -3 и -4 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-9-4-1-0.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -4 и -9 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-9-4-1-15.exe. Демонстрация безотражательного рассеяния на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -4 и -9 и квазивременем 1/5 для энергий от 0.1 до 10. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-9-441-1-0.exe. Безотражательное рассеяние на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -4.41 и -9 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-144-121-1-0.exe. Безотражательное рассеяние на солитонной потенциальной яме с уровнями -1, -1.21 и -1.44 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-576-121-1-0.exe. Безотражательное рассеяние на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -1.21 и -5.76 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-583-341-1-0.exe. Безотражательное рассеяние на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -3.41 и -5.83 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат.

ANIM-SCATT-3SOLIT-625-484-1-0.exe. Безотражательное рассеяние на солитонной потенциальной яме уровнями -1, -4.83 и -6.25 и квазивременем 0 для энергий от 0.1 до 5. Показана относительная плотность вероятности координат

ANIM-FORMS-RECT-FERMI.exe. Формы двустороннего сглаживания прямоугольного барьера барьерами Ферми высотой 10 за счет параметра размытия от 0.01 до 0.3.

ANIM-FORMS-RECT-LAPLACE.exe. Формы внешнего сглаживания прямоугольного барьера полубарьерами Лапласа высотой 10 за счет параметра размытия от 2 до 40.

ANIM-FORMS-RECT-v.exe. Формы внутреннего сглаживания прямоугольного барьера степенными барьерами высотой 10 за счет показателей степени от 2 до 100.

ANIM-FORMS-RECT-vGAUSS.exe. Двустороннее сглаживание прямоугольного барьера барьерами типа Гаусса высотой 10 за счет параметра размытия от 2 до 50.

ANIM-SCATT-RECT-DELTA-1.exe. Рассеяние на прямоугольных барьерах при их симметричном преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-RECT-DELTA-2.exe. Рассеяние на прямоугольных барьерах при их несимметричном преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-ECKART-DELTA.exe. Рассеяние на барьерах Экарта при их преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-GAUSS-DELTA.exe. То же на барьерах Гаусса.

ANIM-SCATT-4GAUSS-DELTA.exe. То же на барьерах 4Гаусса.

ANIM-SCATT-LAPLACE-DELTA.exe. То же на барьерах Лапласа.

ANIM-SCATT-LORENZ-DELTA.exe. Рассеяние на барьерах Коши-Лоренца при их преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-4LORENZ-DELTA.exe. Рассеяние на барьерах 4Коши-Лоренца при их преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-MORSE-DELTA.exe. Рассеяние на барьерах Морса при их преобразовании в дельта-барьер.

ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e8.exe. Рассеяние на барьерах Ферми высотой 10 при изменении параметра размытия от 0.01 до 0.5 для энергии 8 в сравнении с рассеянием на прямоугольном барьере.

ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e10.exe. То же для энергии 10.

ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e11.exe. То же для энергии 11.

ANIM-SCATT-RECT-FERMI-e14.exe. То же для энергии 14.

ANIM-TRANS-ECKART-DELTA.exe. Сравнение прозрачностей барьеров Экарта с высотами от 1 до 8 и дельта-барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-ECKART-z2-u032-3.exe. Сравнение прозрачностей барьеров Экарта с высотами от $3/2$ до 3 и параболического барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-RECT-DELTA.exe. Сравнение прозрачностей барьеров прямоугольных с высотами от $3/2$ до 10 и дельта-барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-LAPLACE-z1.exe. Сравнение прозрачностей барьеров Лапласа с высотами от $3/2$ до 15 и линейного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-RECT-FERMI.exe. Сравнение прозрачностей барьеров Ферми с высотой 1 и параметром размытия от 2 до 0.05 для энергий от 0 до 7 и прямоугольного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-RECT-FERMI-2.exe. Сравнение прозрачностей барьеров Ферми с высотой 1 и параметром размытия от 2 до 0.05 для энергий от 1 до 5 и прямоугольного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-z2-u0.exe. Сравнение прозрачностей квадратичных барьеров на интервале с высотой от 1.5 до 30 для энергий от -1.5 до 1.5 и чисто квадратичного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-z1-power-nonsymm.exe. Сравнение прозрачностей несимметричных линейных барьеров и чисто линейного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-z4-GAUSS.exe. Сравнение прозрачностей барьеров типа Гаусса с четверной вершиной и чисто четверного барьера, в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-RECT-u01-dPi-zv-2-32-e1-5.exe. Анимация сравнения прозрачностей чисто степенных барьеров с показателями от 2 до 32 для энергий от 1 до 5 и прямоугольного барьера высотой 1 и шириной π , в который они трансформируются.

ANIM-TRANS-RECT-u01-dPi-zv-2-32-e0-7.exe. Такое же сравнение для энергетического интервала от 0 до 7.

ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-e.exe. Прозрачность ямы Экарта при рассеянии на реальном и виртуальном уровне 1-го CCC в зависимости от энергии.

ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-k1.exe. То же в зависимости от волнового числа.

ANIM-TRANS-ECKART-REAL-VIRT-k2.exe. То же для 2-го CCC.

ANIM-SCATT-WELL-RECT-u01-e0-8.exe. Демонстрация рассеяния на прямоугольной яме глубиной 1 и шириной π для энергий от 0 до 8. Показана относительная плотность вероятности координат. Интересны резонансные состояния с полной прозрачностью.

Стенды

SCATTERING-DELTA-BARRIER.exe. Наблюдение за рассеянием на дельта-яме с изменением ее интенсивности и энергии частиц.

SCATTERING-DELTA-BARRIER-2.exe. Аналогичный стенд.

Стенды Math-6
(рассеяние на барьерах и ямах)

Math-6-SCATTERING-1DELTA.nb
Math-6-SCATTERING-ECKART.nb
Math-6-SCATTERING-FERMI.nb
Math-6-SCATTERING-GAUSS.nb
Math-6-SCATTERING-GAUSS4.nb
Math-6-SCATTERING-LAPLACE.nb
Math-6-SCATTERING-LORENZ.nb
Math-6-SCATTERING-RECT.nb
Math-6-SCATTERING-RECT-u01.nb
Math-6-SCATTERING-RECT-u04.nb
Math-6-SCATTERING-z1.nb
Math-6-SCATTERING-z2.nb
Math-6-SCATTERING-z4.nb
Math-6-SCATTERING-zv.nb
Math-6-SCATTERING-WELL-RECT.nb
Math-6-SCATTERING-WELL-GAUSS.nb
Math-6-SCATTERING-WELL-LAPLACE.nb
Math-6-SCATTERING-WELL-LORENZ.nb
Math-6-SCATTERING-WELL-GAUSS.nb
Math-6-SCATTERING-z1-WELL.nb
Math-6-SCATTERING-z2-WELL.nb
Math-6-SCATTERING-z4-WELL.nb

4. К четвертому разделу

Презентация «Квазиуровни.pdf».

Анимации

ANIM-TRAP-DELTA-a10-e1-4.exe. Односторонняя ловушка с дельта-барьером интенсивностью 10. Показаны стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни.

ANIM-TRAP-z20-u0-100-e26-75.exe. Односторонняя ловушка с полупараболическим барьером высотой 100. Показаны стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни 30 и 70.

ANIM-TRAP-RECT.exe. Односторонняя ловушка с прямоугольным барьером высотой 30 и шириной 1. Показаны стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни 6.97 и 26.1.

ANIM-TRAP-z2.exe. Односторонняя ловушка с параболическим барьером высотой 30 и шириной 1. Показаны стационарные состояния с характерными энергиями, включая квазиуровни.

ANIM-TRAP-z1.exe. То же с линейным барьером.

Стенды

Односторонние ловушки с дельта- и прямоугольными потенциалами.
Изменяются амплитудные параметры и энергия частиц.

TRAP-DELTA-BARRIER.exe
TRAP-DELTA-WELL.exe
TRAP-RECT-BARRIER.exe
TRAP-RECT-WELL.exe

Стенды Math-6 (двусторонние ловушки)

MATH-6-TRAPPING-z1.nb
MATH-6-TRAPPING-z2.nb
MATH-6-TRAPPING-z4.nb
MATH-6-TRAPPING-TWO-DELTA.nb
MATH-6-TRAPPING-TWO-DELTA-WELLS.nb
MATH-6-TRAPPING-TWO-DELTA-WELL-BARRIER.nb
MATH-6-TRAPPING-2-GAUSS.nb
MATH-6-TRAPPING-2-LAPLACE.nb
MATH-6-TRAPPING-2-RECT.nb
MATH-6-TRAPPING-COSINUS.nb
MATH-6-TRAPPING-COSINUS-2.nb
MATH-6-SCATTERING-2-GAUSS-2.nb
MATH-6-SCATTERING-2-LAPLACE-2.nb

(односторонние ловушки)

Math-6-TRAPPING-DELTA.nb
Math-6-TRAPPING-RECT.nb
Math-6-TRAPPING-SIN2.nb
Math-6-TRAPPING-z1.nb
Math-6-TRAPPING-z2.nb
Math-6-TRAPPING-z10.nb
Math-6-TRAPPING-z20.nb

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

СПИСОК ТЕМ, ПРОБЛЕМ, ВОПРОСОВ, ЗАДАЧ, ЯВЛЕНИЙ, ОСТАВШИХСЯ ДЛЯ ДАЛЬНЕЙШЕГО ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Структурные преобразования в зонном спектре спиновых периодических потенциалов описаны без детального исследования.
2. Многие анимации и рисунки созданы, чтобы привлечь внимание пользователя к интересным явлениям с целью их *дальнейшего исследования*.
3. Некоторые иллюстрации, помещенные в книгу и представленные в презентациях, не сопровождаются подробным обсуждением, иначе объем монографии существенно увеличился бы. Однако это пища для размышлений и выводов любознательному читателю.
4. В некоторых местах книги явно указано, *что именно* читатель может получить или исследовать *сам* (см. на страницах 38, 72, 85, 142, 146, 150, 168, 180, 182, 189, 210, 227).
5. Дополнительные вопросы к рассеянию: несимметричные потенциальные поля (барьеры, ямы, комбинированные рассеиватели) – кусочно-степенные, кусочно-постоянные, с дельта-потенциалами и. т. п.; много барьеров: в пределе – переход к зонному спектру энергии; влияние изломов, скачков, несимметрии и заострений в вершинах барьеров на их прозрачность; рассеяние на границе двух сред (ступенчатый потенциал); применение теории возмущений в критическом диапазоне энергий, при больших энергиях и при малых потенциалах рассеивателей; квазиклассическое приближение для задач рассеяния используется без детальных разъяснений, как и сочетание квазиклассики с точными решениями в критическом диапазоне энергий; не затронуты такие вопросы, как комплексные потенциалы в роли рассеивателей, рассеяние в случае встречных потоков частиц; интегральные уравнения в вопросах рассеяния; применение второго квазиклассического приближения в задачах рассеяния, уточняющего результаты первого приближения.
6. Программы динамической визуализации, созданные нами в компьютерной системе Mathematica-6, перечислены без деталей (общий смысл вытекает из их названий). Они легко видоизменяются, хотя и не содержат комментариев.

О терминологии. В связи с темой рассеяния мы употребляли такие выражения: «коэффициент прозрачности (прохождения)»; «коэффициент отражения (надбарьерного или надямного)»; «рассеяние на таком-то потенциальном барьере (или яме)»; «рассеяние таким-то потенциальным барьером (или такой-то ямой)»; «прохождение частиц через (сквозь) область рассеивателя (или надямой)».

О С Н О В Н Ы Е

A – амплитуда падающей волны;
коэффициент
 a – амплитудный параметр
потенциала
 B – амплитуда отраженной волны;
магнитное поле; коэффициент
 b – коэффициент
 C – амплитуда прошедшей
волны; коэффициент
 c – коэффициент
 $D_a(x)$ – функция параб. цилиндра
 d – период потенциала
 E, e – полная энергия системы
 f – частные решения
 G – матрица связи локальных
решений
 H – гамильтониан системы
 $h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка
 i – мнимая единица
 j – вспомогательный номер
 K – полный эллиптический
интеграл 1-го рода
 k – волновое число; параметр
 l – индекс суммирования
 m – параметр эллипт. функций
 N – число ячеек и т. п.
 n – номер уровня энергии
 p – квазимпульс
 q – волновое число
 R – коэффициент отражения
 S – спин (квазиспин, псевдоспин)
 s – номер щели (лакуны)
 T – коэффициент прозрачности
 t – квазивремя

О Б О З Н А Ч Е Н И Я

u – потенциальная энергия
 V – вспомогательная величина
 v – показатель степенных
потенциалов
 W – Вронскиан
 $w(k)$ – Фурье-образ периодическо-
го потенциала
 x – координата
 y – волновая функция; координата
 Z, z – безразмерная координата
 α, β – константа анизотропии;
коэффициент
 γ – фазовая величина
 Δe – ширина зоны
 δ – относительная ошибка
 δe – ширина щели (лакуны)
 $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака
 ε – уровни энергии
 $\theta(x)$ – функция Хэвисайда
 k – волновое число
 λ – вспомогательный параметр
 ρ – плотность вероятности
координат
 σ – квантовое число
 τ – период колебаний
 φ – фазовая добавка
 Ψ, ψ – волновая функция
 ω – циклическая частота
 $ВФ$ – волновая функция
 $ССС$ – связанное стационарное
состояние
 $УШ$ – уравнение Шредингера

П Р Е Д М Е Т Н Ы Й

Аппроксимации зонные 9,11,15,
23,31,35,60,70

Барьеры

- Гаусса 159,160,165,172,204

- Коши-Лоренца 159,160,165

- Лапласа 159,160,165,172,173

- Морса 159,160,165,172,173,205

- прямоугольные 138,144,156,
158,165,198-203

- степенные 156-158,175-197

- Ферми 159,160,165,173,202

- Экарта 159,160,165,172,173

Безотражательность 3,4,6,96,
122,215-217,223

Блоха теорема 12,15

Блоховские функции 14,18,19,
84,91,92

Бриллюэна зоны 10,11,39,46

Виртуальные уровни 164,211-
213,216,220,221

Внеспиновые зоны 110,113

Вытеснение связанных
состояний 3-5,130-155

Гребенка Дирака 25,26,127,165

Дельта-барьер 138,146,148,156,
158,166-170,186,204-206,208

Дельта-яма 122,124,126,127,131,
132,135,143-146,148,159,161

Динамическая интерактивность
211,228,234,235,239,240

У К А З А Т Е Л Ь

Закон дисперсии 10,11,13,14,18,
23,30,39-46,51-53,66,84,89,90

Зоны энергетические 5,8,14,24

Итерации оператора перехода
через особенность 124,125,127

Квазиуровни 3,4,7,164,224,226-
228,231,235-238,240

Квазиклассическое
приближение 3,5,15,36,38

Кноидальный потенциал 95,98-
106,118

Конечнозонные потенциалы 96,
97,110,118

Квантовые явления 3,13,129,
153,216,224

Коэффициент прозрачности 21,
22,37,38,61,72,167,168,171,174,
176,178-182,184,186,187,189

Критическая ситуация 3,4,22,
138,153

Критический диапазон 22,129,
164,179,187

Кронига-Пенни модель 24-26,
47-53,55

Линейный потенциал 26,78,156,
159,165,178,181-184,189,193

Ловушки

- двусторонние 224-226,240

- односторонние 224,231,232,
235,237,238

Магнитное поле 107,108
 Матрица связи локальных решений 124,125,128,166,172
 Методы построения зон 120-123
 Модели потенциалов
 – кусочно-степенные 156,159
 – несимметричные 27,28,83,156,180-182,184,189,191,223
 – симметричные 26,56,180,181,186,189,222,223
 – солитонные 6,96,97,120,121,123,159,163,164,206,216,217
 – спиновые 107-109,113-115,118,119,128
 – степенные 156,159,165,175,178-197,203,206-208,214,235
 Модуль эллиптических функций Якоби 93
 Надбарьерное отражение 3,4,6,164
 Надспиновые зоны 110,115-118
 Надъямное отражение 6,164,216
 Оператор перехода через особенность потенциала 124-126,146,147,149,166,167
 Парамагнетик 107
 Параметр эллиптических функций Якоби 93-95,98-107
 Периодический потенциал
 - кноидальный 5,95,99-106
 - линейный 25,26,78,80-83,86-92
 - параболический 25,26,56,63
 - синусоидальный 24,25,29-34
 - эллиптический 93
 Плотность вероятности координат 168,210,213,214
 Прозрачность 7,21,117,164,172,180,184,187,199,202,205,211
 Рассеяние 3,4,6,97,153,156,165,166,168-170,173,175-177,181
 Резонансные явления 3,4,7,153,164,199,203,211,215,224,228
 Сверхпрозрачность 3,215-217
 Спин 107-111,114,115
 Структурные преобразования в спиновых зонах 116,118,119
 Теория возмущений 3,5,11,15,20,31,35,51,54,55,58-61,68-71
 Туннелирование 3,4,6,164
 Уравнение Шрёдингера 5,6,11,14-16,20,84,95,98,99,108,111
 Функции Эйри 11,14,78,83,133
 Ширина зоны 21,36-38,72,73
 Щели (лакуны) зонные 8,12,13,21,22,35,36,39,55,60-62,70,85,97
 Энергетические зоны 5,8,9,14,24,39,57,68,78,95
 Энергетические уровни спиновых точных решений 108-113,117,118,129
 Якоби эллиптические функции 93,94,97,98,129

СО Д Е Р Ж А Н И Е

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ВВЕДЕНИЕ. СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ С НЕПРЕРЫВНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ.	4
1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЗОНЫ	8
1.1. Общие соотношения и аппроксимации для зон.	11
1.2. Потенциалы с точными зонными решениями.	24
1.3. Эллиптические потенциалы. Конечнозонность	93
1.4. Методы построения зонных потенциалов. Итоги	120
2. ВЫТЕСНЕНИЕ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ	130
2.1. Проблема существования связанных состояний	130
2.2. Критические условия вытеснения связанных стационарных состояний	135
2.3. Общие итоговые замечания	153
3. РАССЕЯНИЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ.	156
3.1. Рассеяние на потенциальных барьерах	166
3.2. Рассеяние на потенциальных ямах	209
3.3. Безотражательность (сверхпрозрачность) потенциалов солитонной природы	219

4. КВАЗИУРОВНИ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛОВУШКАХ.	226
4.1. Квазиуровни в двусторонних ловушках.	228
4.2. Квазиуровни в односторонних ловушках	233
4.3. Общие замечания о ловушках	238
Заключительные замечания	240
Замечания о компьютерной системе Mathematica	241
ПОСЛЕСЛОВИЕ	242
ЛИТЕРАТУРА.	243
ДОПОЛНЕНИЕ	245

Приложение 1. Таблицы крайних уровней энергии в зонах синусоидального потенциала	247
---	-----

Приложение 2. Перечень презентаций, анимаций и стендов .	252
--	-----

Приложение 3. Список тем, проблем, вопросов, задач, явлений, оставшихся для дальнейшего исследования	262
---	-----

ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	263
--------------------------------	-----

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ	264
--------------------------------	-----

Иллюстрации на последней странице обложки отражают этапы развития вычислительной техники последних поколений – так называемых персональных компьютеров.

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов

Микола Володимирович Ульянов

КОМП'ЮТЕРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ

КВАНТОВИХ ЯВИЩ

Частина друга

Монографія

Російською мовою

Відповідальний за випуск Г.І.Рашба

Издания кафедры теоретической физики имени академика И.М.Лифшица (вклад Ульяновых) К 200-летию Харьковского университета

Серия монографий и учебных пособий

1. В.В.Ульянов. ВСТУП ДО КВАНТОВОЇ КІНЕТИКИ. – 2004.
2. Ю.В.Василевская, В.В.Ульянов
НОВЫЕ КВАЗИТОЧНОРЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ В
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ СИСТЕМ. – 2005.
3. Е.Н.Синельник, В.В.Ульянов
ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К ФИЗИКЕ(+CD). – 2005.
4. А.В.Лымарь, В.В.Ульянов. ФРАКТАЛЫ: ОТ МАТЕМАТИКИ К
ФИЗИКЕ. Ч. 2 (+CD). – 2010.
5. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА НА ФИЗИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
ХАРЬКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. Сост. В.В.Ульянов. – 2009.
6. В.В.Ульянов. О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ. – 2002.
- 7,8,9. В.В.Ульянов, Н.В.Ульянов. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВА-
НИЯ КВАНТОВЫХ ЯВЛЕНИЙ. Ч.1,2,3 (+CD). – 2012, 2013, 214.
- 10,11,12,13. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2, 3, 4. – 2002, 2011.
- 14,15. В.В.Ульянов. КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ
СТАТИСТИКЕ. Ч. 1, 2. – 2011.
- 16,17. В.В.Ульянов. ВВОДНЫЕ ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ. Ч. 1, 2. Изд. 2-е, доп. – 2011.
18. В.В.Ульянов. ЛЕКЦИИ ПО КВАНТ. МЕХАНИКЕ. Ч. 5. – 2011.
- 19,20,21,22,23. В.В.Ульянов. СБОРНИК ОБЗОРОВ И СТАТЕЙ ПО
КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ. Ч. 1, 2. – 2011; Ч. 3-5. – 2012.
24. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 1. – 2003.
25. В.В.Ульянов. К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 2. – 2003.
26. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
К ИСТОРИИ ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА
И КАФЕДРЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ. Ч. 3. – 2004.
27. А.М.Ермолаев, Н.В.Ульянов. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ
В НЕФЕРРОМАГНИТНЫХ ПРОВОДНИКАХ
С ПРИМЕСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОНОВ. – 2006.
28. A.M.Ermolaev, N.V.Ulyanov. ELECTRON SPIN WAVES IN
NONMAGNETIC CONDUCTORS WITH RESONANCE STATES
OF ELECTRONS. – 2008.
29. О.М.Єрмолаєв, В.В.Ульянов. СТИСЛИЙ НАРИС ІСТОРІЇ
КАФЕДРИ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМЕНІ АКАДЕМІКА
І.М.ЛІФШИЦЯ. – 2008.
30. A.M.Ermolaev, N.V.Ulyanov.LANDAU-SILIN SPIN WAVES IN
CONDUCTORS WITH IMPURITY STATES. – 2012.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний об ученых-физиках

1. В.В.Ульянов
ИЛЬЯ МИХАЙЛОВИЧ ЛИФШИЦ. – 2001,2007(+DVD).
2. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
МОИСЕЙ ИСААКОВИЧ КАГАНОВ. – 2001.
3. В.В.Ульянов. ЛЕВ ЭЛЕАЗАРОВИЧ ПАРГАМАНИК. – 2002.
4. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ЛЕОНИД СТЕПАНОВИЧ ГУЛИДА. – 2002.
5. В.В.Ульянов
БОРИС ИЕРЕМИЕВИЧ ВЕРКИН. – 2002.
6. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
АРНОЛЬД МАРКОВИЧ КОСЕВИЧ. – 2002.
7. В.В.Ульянов
ВИКТОР МОИСЕЕВИЧ ЦУКЕРНИК. – 2002.
8. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ВАЛЕНТИН ГРИГОРЬЕВИЧ ПЕСЧАНСКИЙ. 2002.
9. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ЭМАНУИЛ АЙЗИКОВИЧ КАНЕР. – 2002.
10. А.М.Ермолаев, Ю.П.Степановский, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР ИЛЬИЧ АХИЕЗЕР. – 2002.
11. В.В.Ульянов
АНДРЕЙ ВЛАДИМИРОВИЧ ЖЕЛЕХОВСКИЙ. – 2003.
12. В.Г.Песчанский, В.В.Ульянов
ВЛАДИМИР ПЕТРОВИЧ ГАЛАЙКО. – 2003.
13. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ИГОРЬ ИВАНОВИЧ ФАЛЬКО. – 2003.
14. Г.И.Рашба, В.В.Ульянов
АЛЕКСАНДР МИХАЙЛОВИЧ ЕРМОЛАЕВ. –2003.
- 15.
16. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов
ОЛЕГ ИВАНОВИЧ ЛЮБИМОВ. – 2005.
17. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ. – 2008.
18. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.1. – 2008.
19. В.В.Ульянов. К 95-ЛЕТИЮ Л.Э.ПАРГАМАНИКА. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ЛАНДАУ В ХАРЬКОВЕ (2-е изд., доп.). – 2010.
21. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. М.И.КАГАНОВ В ХГУ. – 2011.
22. В.В.Ульянов. К 90-ЛЕТИЮ М.И.Каганова. – 2011 (CD).
23. А.М.Ермолаев, В.В.Ульянов. В.Г.ПЕСЧАНСКИЙ НА ТЕОРКАФЕДРЕ. – 2011.
24. В.В.Ульянов. К 80-ЛЕТИЮ В.Г.ПЕСЧАНСКОГО. – 2011 (CD).
25. В.В.Ульянов. ЮРИЙ ПЕТРОВИЧ СТЕПАНОВСКИЙ.– 2013.
26. В.В.Ульянов. К 75-ЛЕТИЮ А.М.ЕРМОЛАЕВА.– 2013 (CD).

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о Детях физмата

1. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ИВАНОВИЧ ШАРАПОВ. – 2002, 2007.
2. В.В.Ульянов. НА УНИВЕРСИТЕТСКОЙ. – 2002, 2007.
3. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ГАВРИЛОВИЧ
КЛАДКОВОЙ (Мой друг Толька). – 2002, 2007(CD).
4. ЛЕГЕНДЫ И БЫЛИ СТАРОГО ФИЗМАТА
 - Ч.I. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Дзюба А.С.,
Перваков В.А., Сизова З.И., Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. II. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С.,
Гапон Э.В, Иванов И.Г., Кондратьев Б.В., Мерисов Б.А.,
Ульянов В.В., Хижковский В.П., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. III. Сборник рассказов. Агафонова Н.Ф., Бляшенко Г.С.,
Козинец В.В., Кондратьев Б.В., Николаев Г.Т.,
Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2002.
 - Ч. IV. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П.,
Мерисов Б.А., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2002.
 - Ч. V. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Валиев Б.М.,
Гребенник И.П., Мерисов Б.А., Сизова З.И., Ульянов В.В. - 2002.
 - Ч. VI. Сборник рассказов. Барьяхтар В.Г., Гребенник И.П.,
Креснин А.А., Манжелей В.Г., Пустовалов В.В.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч. VII. Сборник стихов. Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И., Степановский Ю.П.,
Ульянов В.В., Шарапов А.И. - 2003.
 - Ч. VIII. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Тартаковский В.К.,
Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч. IX. Сборник рассказов. Бляшенко Г.С., Гребенник И.П.,
Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Яцук К.П. - 2003..
 - Ч. X. Сборник рассказов. Гребенник И.П., Ульянов В.В.,
Хижковский В.П., Яцук К.П. - 2003.
 - Ч. XI. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Кан Я.С., Николаев Г.Т.,
Рофе-Бекетов Ф.С., Ульянов В.В., Шарапов А.И., Яцук К.П.,
Яцук Л.П. - 2003.
 - Ч. XII. Сборник рассказов. Боярский Л.А., Гребенник И.П.,
Малеев В.Я., Пустовалов В.В., Ульянов В.В., Чебанова Т.С. - 2004.
 - Ч. XIII. Сборник рассказов. Ковинько Н.М., Мазель Е.З.,
Ривкина Э.М., Розенберг В.Я., Тартаковский В.К., Ульянов В.В.,
Шарапов А.И. - 2008.
 - Ч. XIV. Сборник стихов. Бирюков В.Я., Евланов М.В., Кан Я.С.,
Николаев Г.Т., Рогинкина Н.А., Рофе-Бекетов Ф.С., Сизова З.И.,
Степановский Ю.П., Таранова Г.М., Ульянов В.В., Шарапов А.И.,
Яцук К.П., Яцук Л.П. - 2009.
 - Ч. XV. Сборник рассказов. Креснин А.А., Ульянов В.В.,
Федченко Л.Ю., Хайтман Е.Н., Яровая Р.Г. - 2009.
 - Ч. XVI. Сборник рассказов. Рофе-Бекетов Ф.С., Татарченко Л.П.,
Ульянов В.В. – 2009.
5. В.В.Ульянов. КАК МЫ ПРАЗДНОВАЛИ 50-ЛЕТИЕ
ОКОНЧАНИЯ УНИВЕРСИТЕТА (+CD). – 2007.

К 200-летию Харьковского университета

Серия воспоминаний о жизни в XX веке

1. В.В.Ульянов. Д О В О Й Н Ы (1934-1941). – 2002.
2. В.В.Ульянов. В О Е Н Н Ы Е Г О Д Ы (1941-1945). – 2002.
3. В.В.Ульянов. В Ш К О Л Е (1945-1952). – 2002.
4. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1934-1950). – 2003.
5. В.В.Ульянов
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1951-1954). – 2003.
6. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1955-1957). – 2003.
7. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1958-1961). – 2003.
8. В.В.Ульянов. Д В А Д Н Я В А Л У Ш Т Е. – 2003.
(Волейбольные грёзы)
9. В.В.Ульянов. Д В А Д Ц А Т Ы Й Д О М. – 2003.
10. В.В.Ульянов. 5 0 Л Е Т С П У С Т Я. – 2003.
11. В.А.Ульянов
ВОСПОМИНАНИЯ ДЕТСТВА И ЮНОСТИ. – 2003.
12. В.А.Ульянов. МОЯ ПОЕЗДКА В США И ОБРАТНО. – 2003.
13. В.А.Ульянов. С Т Р А Н И Ч К И Ж И З Н И. – 2003.
14. В.В.Ульянов
РОДОСЛОВНАЯ НАШЕЙ СЕМЬИ. – 2004.
15. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ. – 2004.
16. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова
РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ ОТДЫХЕ (1962-1967)+CD. – 2006.
17. В.В.Ульянов. ПОЛВЕКА В УНИВЕРСИТЕТЕ(2-е изд., доп.). – 2007.
18. В.В.Ульянов. ВИКТОР ЕВГЕНЬЕВИЧ РУБАНОВИЧ(+CD). – 2008.
19. В.В.Ульянов. НОВОЕ О ПУШКИНЕ И ГОГОЛЕ. – 2009 (CD).
20. В.В.Ульянов. ИЗДАНИЯ. ВЫСТАВКА КНИГ. – 2009 (CD).
21. Н.В. и И.П.Ульяновы. ЧЕРНОГОРИЯ. ИЮЛЬ 2009. – 2009 (CD).
22. Н.В.Ульянов, И.П.Ульянова. ПО ЮГУ ЕВРОПЫ. – 2009 (CD).
23. В.В.Ульянов. К 150-ЛЕТИЮ А.П.ЧЕХОВА. – 2010 (CD).
24. В.В.Ульянов. К 170-ЛЕТИЮ П.И.ЧАЙКОВСКОГО. – 2010 (CD).
25. Н.В. и И.П.Ульяновы. БОЛГАРИЯ И РУМЫНИЯ. – 2010 (CD).
26. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – АВГУСТ 2010. – 2010 (CD).
27. В.В.Ульянов. К 110-летию В.А.Ульянова. Рисунок отца. – 2011(CD).
28. В.В.Ульянов. АНАТОЛИЙ ПАВЛОВИЧ ЗАВАЛИШИН. – 2011(CD).
29. В.В. и Н.В.Ульяновы. МИСХОР – ИЮЛЬ 2011. – 2011(CD).
30. В.В.Ульянов. МОЯ МУЗЫКАЛЬНАЯ ИСТОРИЯ (+DVD). – 2013.
31. В.В.Ульянов. ФИЛЬМЫ МОЛОДОСТИ НАШЕЙ (+DVD). – 2013.
32. В.В.Ульянов, И.П.Ульянова. РАССКАЗЫ О ЛЕТНЕМ
ОТДЫХЕ (1968-1973)+DVD. – 2014.
33. В.В.Ульянов. ВОСПОМИНАНИЯ ФИЗИКА-ТЕОРЕТИКА. Ч.2. –
2014.

