Известия НАН Армении, Физика, т.44, №2, с.133-143 (2009)

УДК 539.1

СТАЦИОНАРНОЕ ДВИЖЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРОИЗВОЛЬНОГО ВИДА

А.Ж. ХАЧАТРЯН[1], Д.М.СЕДРАКЯН[2], В.А.ХОЕЦЯН[2]

[1]Государственный инженерный университет Армении, Ереван

[2]Ереванский государственный университет, Армения

(Поступила в редакцию 1 декабря 2008 г.)

В работе развит последовательный подход для задачи описания стационарного движения квантовой частицы в поле одномерного потенциала произвольного вида. Показано, что волновая функция инфинитного движения может быть с точностью до двух произвольных постоянных выражена с помощью одного произвольного частного решения некоторой системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Показано, что в основе многих известных методов рассмотрения задачи, таких как метод интегральных уравнений, метод матрицы переноса, метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния, лежит одно общее свойство решений уравнения Шредингера. В рамках предлагаемого подхода связь между вышеупомянутыми методами становится более прозрачной.

1. Введение

Как известно, задача описания стационарного движения квантовой частицы в поле потенциала произвольного вида всегда вызывала большой теоретический и практический интерес. Несмотря на то, что данная проблема имеет давнюю историю, ее рассмотрение в двумерной и трехмерной постановках сопряжено с большими математическими трудностями. Невзирая на предпринимаемые уже много лет многочисленные усилия, можно утверждать, что до сих пор общие математические подходы для решения многомерной задачи находятся в стадии разработки. Во многих случаях даже приближенное рассмотрение задачи приходится выполнять исключительно численными методами [1]. Вместе с тем, для одномерного случая известны несколько отличных друг от друга методов, позволяющих проводить рассмотрение задачи в общем виде. Наиболее примечательными из них являются метод матрицы переноса [2,3], метод интегральных уравнений [4-6], метод погружения [6-9], а также метод комбинации параметров рассеяния [10,11]. Связь между методами матрицы переноса и комбинации параметров рассеяния обсуждается в работе [12]. В отличие от традиционного подхода, основанного на прямом решении уравнения Шредингера, первый из перечисленных методов сводит граничную задачу к задаче вычисления произведения матриц путем аппроксимации потенциала как системы из прилегающих друг к другу узких прямоугольных потенциалов.

Последние два метода позволяют свести граничную задачу к задаче эволюционного типа (задача Коши). Отметим, что в отличие от метода погружения, в методе комбинации параметров рассеяния предлагаемые для интегрирования уравнения являются линейными [10].

В настоящей работе предлагается новый общий подход для рассмотрения движения квантовой частицы в одномерном потенциальном поле. Сразу следует оговориться, что многие получаемые в рамках излагаемого подхода уравнения в том или ином виде фигурируют в упомянутых выше методах. Однако, в отличие от этих методов, базирующихся, в конечном счете, на идее слежения за изменениями волновой функции в зависимости от вариаций того или иного параметра потенциала (например, его границы), предлагаемый подход является более последовательным в том плане, что он основан непосредственно на одном совершенно общем свойстве решений одномерного уравнения Шредингера. Кроме того, в рамках развиваемого подхода, который по своему духу близок к традиционному подходу, связь между вышеизложенными методами становится более прозрачной.

Ниже мы будем рассматривать одномерное стационарное уравнение Шредингера

$$d^2\Psi(x)/dx^2 + \left(k^2 - u(x)\right)\Psi(x) = 0\,, \qquad (1)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $u(x) = 2mU(x)/\hbar^2$, а E и $U(x)$ – полная и потенциальная энергии частицы, соответственно.

Будем рассматривать решение уравнения (1), записанное в виде следующей суммы:

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

Докажем следующее утверждение: если (2) является решением уравнения (1), то производная волновой функции в любой точке пространства может быть представлена в виде:

$$d\Psi(x)/dx = ik\left[a(x)\exp\{ikx\} - b(x)\exp\{-ikx\}\right]. \qquad (3)$$

Легко видеть, что вышеприведенное утверждение равносильно выполнению равенства

$$\left(da(x)/dx\right)\exp\{ikx\} + \left(db(x)/dx\right)\exp\{-ikx\} = 0. \qquad (4)$$

Как мы покажем ниже, данное общее свойство решений уравнений Шредингера позволяет выработать целостный подход, позволяющий уместить все известные методы задачи описания одномерного стационарного движения в одну единую схему.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 доказывается одно общее свойство решений одномерного стационарного уравнения Шредингера. Раздел 3 посвящен описанию инфинитного движения, а также получению основных результатов теории матрицы переноса. В разделе 4 выводятся дифференциальные уравнения для элементов матрицы переноса как функций от границ усеченного потенциала. Обсуждается также связь предлагаемого подхода с методом погружения. В следующем разделе устанавливается связь волновой функции с элементами матрицы переноса усеченных потенциалов. Рассматриваются также соотношения, существующие между амплитудами отражения и прохождения для левой и правой задач рассеяния. В разделе 6 в рамках излагаемого подхода выводится интегральное уравнение для волновой функции. В заключении приведены основные результаты работы.

2. Общее свойство решения одномерного стационарного уравнения Шредингера

Для доказательства равенства (4) выберем следующую простую схему. Представим потенциал между точками $x-\Delta x$ и $x+2\Delta x$ (Δx – малая величина) в виде прилегающих друг к другу трех узких участков, внутри каждого из которых, вследствие малости Δx, изменением потенциала можно пренебречь. Тогда, вводя обозначение $q(x)=\sqrt{2m(E-u(x))}/\hbar$, получим, что волновая функция в рассматриваемых областях может быть представлена в виде

$$\Psi(x)=\begin{cases} a(x)\exp\{ikx\}+b(x)\exp\{-ikx\}, & [x-\Delta x, x], \\ c(x)\exp\{iq(x)x\}+d(x)\exp\{-iq(x)x\}, & [x, x+\Delta x], \\ a(x)\exp\{ikx\}+b(x)\exp\{-ikx\}, & [x+\Delta x, x+2\Delta x]. \end{cases} \qquad (5)$$

Так как изменением потенциала в промежутках $[x-\Delta x, x]$, $[x, x+\Delta x]$ и $[x+\Delta x, x+2\Delta x]$ пренебрегается, то, следовательно, амплитуды встречных волн $a(x)$, $b(x)$, $c(x)$, $d(x)$ в соответствующих областях представляют собой постоянные величины. Исходя из вышесказанного, производная волновой функции в интервале $[x-\Delta x, x+2\Delta x]$ может быть записана в следующем виде:

$$\frac{d\Psi(x)}{dx}=\begin{cases} ik\left[a(x)\exp\{ikx\}-b(x)\exp\{-ikx\}\right], & [x-\Delta x, x], \\ iq(x)\left[c(x)\exp\{iq(x)x\}-d(x)\exp\{-iq(x)x\}\right], & [x, x+\Delta x], \\ ik\left[a(x)\exp\{ikx\}-b(x)\exp\{-ikx\}\right], & [x+\Delta x, x+2\Delta x]. \end{cases} \qquad (6)$$

Требование непрерывности волновой функции и ее производной в точках x и $x+\Delta x$ с использованием (5) и (6) приводит к следующей системе из четырех линейных алгебраических уравнений для величин $a(x)$, $b(x)$, $c(x)$, $d(x)$, $a(x+\Delta x)$, $b(x+\Delta x)$:

$$a(x)\exp\{ikx\}+b(x)\exp\{-ikx\}=c(x)\exp\{iq(x)x\}+d(x)\exp\{-iq(x)x\}, \qquad (7)$$

$$\begin{aligned} &a(x+\Delta x)\exp\{ik(x+\Delta x)\}+b(x+\Delta x)\exp\{-ik(x+\Delta x)\}= \\ &=c(x)\exp\{iq(x)(x+\Delta x)\}+d(x)\exp\{-iq(x)(x+\Delta x)\}, \end{aligned} \qquad (8)$$

$$ik\left[a(x)\exp\{ikx\}-b(x)\exp\{-ikx\}\right]=iq(x)\left[c(x)\exp\{iq(x)x\}-d(x)\exp\{-iq(x)x\}\right], \qquad (9)$$

$$ik\left[a(x+\Delta x)\exp\{ik(x+\Delta x)\}-b(x+\Delta x)\exp\{-ik(x+\Delta x)\}\right]=$$
$$=iq(x)\left[c(x)\exp\{iq(x)\left(x+\Delta x\right)\}-d(x)\exp\{-iq(x)\left(x+\Delta x\right)\}\right]. \qquad (10)$$

Исключая $c(x)$, $d(x)$ из уравнений (7)–(10) и устремляя приращение Δx к нулю, для величин $a(x)$ и $b(x)$ получим следующую систему из двух линейных однородных дифференциальных уравнений первого порядка:

$$da(x)/dx=-iu(x)a(x)/2k-iu(x)b(x)\exp\{-i2kx\}/2k, \qquad (11)$$

$$db(x)/dx=iu(x)b(x)/2k+iu(x)a(x)\exp\{i2kx\}/2k. \qquad (12)$$

Так как вышеизложенная процедура представления потенциала в виде трех прилегающих друг к другу узких участков может быть выполнена вблизи произвольной точки x, то, как непосредственно следует из (11) и (12), равенство (4) действительно имеет место и, следовательно, производная волновой функции имеет вид (3).

3. Инфинитное движение и метод матриц переноса

Как известно, система двух однородных дифференциальных уравнений первого порядка обладает двумя линейно-независимыми решениями, так что ее общее решение может быть представлено в виде:

$$C_1\left(a_1(x)+b_1(x)\right)+C_2\left(a_2(x)+b_2(x)\right), \qquad (13)$$

где C_1 и C_2 – произвольные константы, а $a_1(x)$, $b_1(x)$ и $a_2(x)$, $b_2(x)$ соответствуют первому и второму решению системы. В силу (11), (12) линейно независимые решения могут быть выбраны согласно следующим равенствам:

$$a_1(x)=b_2^*(x) \text{ и } b_1(x)=a_2^*(x), \qquad (14)$$

где * обозначает комплексно сопряженное.

Используя (13), (14), (2) и вводя обозначения $a_1(x)=a(x)$ и $b_1(x)=b(x)$, наиболее общее решение уравнения Шредингера может быть записано в виде

$$\Psi(x)=\left(C_1a(x)+C_2b^*(x)\right)\exp\{ikx\}+\left(C_1b(x)+C_2a^*(x)\right)\exp\{-ikx\}. \qquad (15)$$

Как видно из (15), волновая функция в общем виде может быть выражена с помощью одного частного решения системы уравнений (11), (12) с точностью до двух произвольных постоянных.

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

$$u(x)=\begin{cases}0 & x<x_1,\\ u(x) & x_1<x<x_2,\\ 0 & x>x_2,\end{cases} \qquad (16)$$

и будем рассматривать асимптотическое поведение волновой функции в областях с нулевым значением потенциала в виде суммы встречных плоских волн:

$$\Psi(x)=\begin{cases} A_1\exp\{ikx\}+B_1\exp\{-ikx\}, & x<x_1,\\ \left(C_1a(x)+C_2b^*(x)\right)\exp\{ikx\}+\left(C_1b(x)+C_2a^*(x)\right)\exp\{-ikx\}, & x_1<x<x_2,\\ A_2\exp\{ikx\}+B_2\exp\{-ikx\}, & x>x_2, \end{cases} \tag{17}$$

где пара функций $a(x)$ и $b(x)$ является частным решением системы уравнений (11), (12), определяемым из начального условия, заданного в точке $x=x_1$ в виде пары произвольных чисел $a(x_1)$, $b(x_1)$. Из условия непрерывности волновой функции (17) и ее производной в точках x_1, x_2, а также из равенства (4) имеем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$A_1=C_1a(x_1)+C_2b^*(x_1)\,,\ B_1=C_1b(x_1)+C_2a^*(x_1)\,, \tag{18}$$

$$A_2=C_1a(x_2)+C_2b^*(x_2)\,,\ B_2=C_1b(x_2)+C_2a^*(x_2)\,, \tag{19}$$

из которых, в частности, следует, что

$$\begin{pmatrix} A_2\\ B_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha(x_1,x_2) & \beta(x_1,x_2)\\ \beta^*(x_1,x_2) & \alpha^*(x_1,x_2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_1\\ B_1\end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$\alpha(x_1,x_2)=\frac{a^*(x_1)a(x_2)-b(x_1)b^*(x_2)}{a(x_1)a^*(x_1)-b(x_1)b^*(x_1)}\,,\ \ \beta(x_1,x_2)=\frac{a(x_1)b^*(x_2)-b^*(x_1)a(x_2)}{a(x_1)a^*(x_1)-b(x_1)b^*(x_1)}\,. \tag{21}$$

Из (21) следует, что детерминант матрицы переноса тождественно равен единице: $\alpha(x_1,x_2)\alpha^*(x_1,x_2)-\beta(x_1,x_2)\beta^*(x_1,x_2)=1$.

Используя (20), легко видеть, что [2,3]

$$\alpha(x_1,x_2)=\frac{A_1^*A_2-B_1B_2^*}{A_1A_1^*-B_1B_1^*}\,,\quad \beta(x_1,x_2)=\frac{A_1B_2^*-B_1^*A_2}{A_1A_1^*-B_1B_1^*}\,. \tag{22}$$

Как следует из вышеизложенного (см. (17)–(21)), волновая функция одномерного стационарного инфинитного движения может быть выражена с помощью одного произвольного частного решения системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка (11), (12) с точностью до двух произвольных постоянных.

4. Элементы матрицы переноса как функции от границ усеченного потенциала

Представим потенциал $u(x)$ (16) в виде суммы двух потенциалов $u(x)=u_1(x)+u_2(x)$, где

$$u_1(x)=\begin{cases}0,\ x>y,\\ u(x),\ x<y,\end{cases}\quad \text{и}\quad u_2(x)=\begin{cases}u(x),\ x>y,\\ 0,\ x<y.\end{cases} \tag{23}$$

Покажем теперь, что волновая функция для потенциала $u(x)$ (16) в промежутке $x_1<x<x_2$ может быть выражена с помощью элементов матриц переноса для потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$. Будем рассматривать элементы матрицы переноса $\alpha(x_1,x_2)$, $\beta(x_1,x_2)$ (21) как функции от координат границ потенциала

$u(x)$, при этом полагая, что для усеченного справа потенциала $u_1(x)$ x_1 является фиксированным и $x_2 = y$, а для случая усеченного слева потенциала $u_2(x)$ фиксированным является x_2, а $x_1 = y$. В соответствии с вышесказанным, рассматривая значения y в промежутке $x_1 < y < x_2$, из (21) можем записать следующие выражения:

$$\alpha(x_1, y) = \frac{a^*(x_1)a(y) - b(x_1)b^*(y)}{a(x_1)a^*(x_1) - b(x_1)b^*(x_1)}, \ \beta(x_1, y) = \frac{a(x_1)b^*(y) - b^*(x_1)a(y)}{a(x_1)a^*(x_1) - b(x_1)b^*(x_1)}, \qquad (24)$$

$$\alpha(y, x_2) = \frac{a^*(y)a(x_2) - b(y)b^*(x_2)}{a(x_2)a^*(x_2) - b(x_2)b^*(x_2)}, \ \beta(y, x_2) = \frac{a(y)b^*(x_2) - b^*(y)a(x_2)}{a(x_2)a^*(x_2) - b(x_2)b^*(x_2)}, \qquad (25)$$

где $a(y)$, $b(y)$ и $a(x_2)$, $b(x_2)$ соответствуют решению системы дифференциальных уравнений (11), (12) в точках $x = y$ и $x = x_2$, соответственно, с начальным условием $a(x_1)$, $b(x_1)$, заданным в точке $x = x_1$.

Как видно из (11), (12) и (24), (25), величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ как функции от координаты y удовлетворяют разным системам дифференциальных уравнений. Так, для $\alpha(x_1, y)$ и $\beta(x_1, y)$ получим следующее выражения:

$$\frac{d\alpha(x_1, y)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\alpha(x_1, y) - \frac{iu(y)}{2k}\beta^*(x_1, y)\exp\{-2iky\}, \qquad (26)$$

$$\frac{d\beta(x_1, y)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\beta(x_1, y) - \frac{iu(y)}{2k}\alpha^*(x_1, y)\exp\{-2iky\}, \qquad (27)$$

с начальным условием в точке $\alpha(x_1, x_1) = 1$, $\beta(x_1, x_1) = 0$. Для $\alpha(y, x_2)$ и $\beta(y, x_2)$ имеем

$$\frac{d\alpha(y, x_2)}{dy} = \frac{iu(y)}{2k}\alpha(y, x_2) - \frac{iu(y)}{2k}\beta(y, x_2)\exp\{2iky\}, \qquad (28)$$

$$\frac{d\beta(y, x_2)}{dy} = -\frac{iu(y)}{2k}\beta(y, x_2) + \frac{iu(y)}{2k}\alpha(y, x_2)\exp\{-2iky\}, \qquad (29)$$

с начальным условием в точке $y = x_2$ $\alpha(x_2, x_2) = 1$, $\beta(x_2, x_2) = 0$.

Отметим, что интегрирование системы (28), (29), в отличие от (26), (27), должно быть проведено в отрицательном направлении. Как следует из полученного выше результата, величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ никоим образом не зависят от выбора начальных условий $a(x_1)$, $b(x_1)$, используемых для определения $a(y)$, $b(y)$ и $a(x_2)$, $b(x_2)$ (см. (24), (25)), а зависят только от вида потенциала. Данное обстоятельство позволяет утверждать, что величины $\alpha(x_1, y)$, $\beta(x_1, y)$ и $\alpha(y, x_2)$, $\beta(y, x_2)$ являются элементами матриц переноса потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$, соответственно.

5. Волновая функция и метод усеченного потенциала

Приступим теперь к построению волновой функции (17), выбирая в качестве произвольных постоянных константы A_1 и B_2. Используя (24), (25), а также (18), (19) и (20), можно показать, что волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = A_1\left[\exp\{ikx\} - \beta^*(x_1,x_2)\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2)\right] + \\ +B_2\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) \quad \text{при } x < x_1, \tag{30}$$

$$\psi(x) = A_1\left[\alpha^*(x,x_2)\exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) - \beta^*(x,x_2)\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2)\right] + \\ +B_2\left[\beta(x_1,x)\exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) + \alpha^*(x_1,x)\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2)\right] \text{ при } x_1 < x < x_2, \tag{31}$$

$$\psi(x) = A_1\exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) + B_2\left[\exp\{-ikx\} + \\ +\beta(x_1,x_2)\exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2)\right] \quad \text{при } x > x_2. \tag{32}$$

Как видно из полученного результата (30)–(32), с точностью до двух произвольных постоянных, задача нахождения волновой функции инфинитного движения, в наиболее общем виде, сводится к задаче определения элементов матриц переноса усеченных потенциалов как функций от координаты точки усечения: $\alpha(x_1,y)$, $\beta(x_1,y)$ и $\alpha(y,x_2)$, $\beta(y,x_2)$ с начальными условиями $\alpha(x_1,x_1)=1$, $\beta(x_1,x_1)=0$ и $\alpha(x_2,x_2)=1$, $\beta(x_2,x_2)=0$.

Связь элементов матрицы переноса $\alpha(x_1,x_2)$, $\beta(x_1,x_2)$ с амплитудами отражения и прохождения волны может быть установлена в соответствии с левой и правой задачами рассеяния, когда рассматриваются решения уравнения Шредингера со следующими асимптотическим поведениями:

$$\psi_{\text{left}}(x) = \begin{cases} \exp\{ikx\} + r\exp\{-ikx\} & x < x_1, \\ t\exp\{ikx\} & x > x_2, \end{cases} \tag{33}$$

$$\psi_{\text{right}}(x) = \begin{cases} s\exp\{-ikx\} & x < x_1, \\ \exp\{-ikx\} + p\exp\{ikx\} & x > x_2, \end{cases} \tag{34}$$

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

Подставляя в (30)–(32) $A_1 = 1$ и $B_2 = 0$, для волновой функции частицы, падающий на потенциал с левой стороны, получим

$$\psi(x) = \exp\{ikx\} - \beta^*(x_1,x_2)\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) \quad \text{при } x < x_1, \tag{35}$$

$$\psi(x) = \alpha^*(x,x_2)\exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) - \\ -\beta^*(x,x_2)\exp\{-ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) \text{ при } x_1 < x < x_2, \tag{36}$$

$$\psi(x) = \exp\{ikx\}/\alpha^*(x_1,x_2) \text{ при } x > x_2. \tag{37}$$

Сравнивая (35), (37) с (33), получим

$$r = -\beta^*(x_1,x_2)/\alpha^*(x_1,x_2),\ t = 1/\alpha^*(x_1,x_2), \tag{38}$$

откуда, в частности, следует $\alpha(x_1,x_2) = 1/t^*$, $\beta(x_1,x_2) = -r^*/t^*$.

Волновая функция частицы, падающей на барьер справа, получается из (30)–(32) подстановкой $A_1 = 0$ и $B_2 = 1$:

$$\psi(x) = \exp\{-ikx\} / \alpha^*(x_1, x_2) \text{ при } x > x_1, \tag{39}$$

$$\psi(x) = \beta(x_1, x)\exp\{ikx\} / \alpha^*(x_1, x_2) + \alpha^*(x_1, x)\exp\{-ikx\} / \alpha^*(x_1, x_2) \text{ при } x_1 < x < x_2 \tag{40}$$

$$\psi(x) = \exp\{-ikx\} + \beta(x_1, x_2)\exp\{ikx\} / \alpha^*(x_1, x_2) \text{ при } x > x_2. \tag{41}$$

Сравнивая (39), (41) с (34), получим

$$p = \beta(x_1, x_2) / \alpha^*(x_1, x_2), \; s = 1 / \alpha^*(x_1, x_2), \tag{42}$$

откуда можем записать $\alpha(x_1, x_2) = 1/s^*$, $\beta(x_1, x_2) = p/s$.

Из (38) и (42) следует связь между амплитудами отражения и прохождения левой и правой задач рассеяния [2]:

$$t = s, \; r/t = -p^*/t^*. \tag{43}$$

По аналогии с введенными для усеченных потенциалов элементами матриц переноса, рассмотрим также амплитуды отражения и прохождения волны в случае усеченных потенциалов. Если амплитуды рассеяния определяются в соответствии с левой задачей рассеяния, то, согласно (38) и (24), (25), можем записать

$$\alpha(x_1, y) = 1 / t^*(x_1, y), \quad \beta(x_1, y) = -r^*(x_1, y) / t^*(x_1, y), \tag{44}$$

$$\alpha(y, x_2) = 1 / t^*(y, x_2), \quad \beta(y, x_2) = -r^*(y, x_2) / t^*(y, x_2), \tag{45}$$

где $t(x_1, y)$, $r(x_1, y)$ и $t(y, x_2)$, $r(y, x_2)$ являются амплитудами прохождения и отражения волны для усеченных потенциалов $u_1(x)$ и $u_2(x)$ (23).

Используя (44), из (26), (27) имеем

$$\frac{d}{dx}\frac{1}{t(x_1, x)} = \frac{iV(x)}{2k}\frac{1}{t(x_1, x)} - \frac{iV(x)}{2k}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)}\exp\{2ikx\}, \tag{46}$$

$$\frac{d}{dx}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)} = -\frac{iV(x)}{2k}\frac{r^*(x_1, x)}{t^*(x_1, x)} + \frac{iV(x)}{2k}\frac{1}{t(x_1, x)}\exp\{-2ikx\}, \tag{47}$$

с граничными условиями $1/t(x_1, x_1) = 1$, $r^*(x_1, x_1)/t^*(x_1, x_1) = 0$.

Из (45) и (28), (29) можно записать

$$\frac{d}{dx}\frac{1}{t(x, x_2)} = -\frac{iV(x)}{2k}\frac{1}{t(x, x_2)} - \frac{iV(x)}{2k}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)}\exp\{-2ikx\}, \tag{48}$$

$$\frac{d}{dx}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)} = \frac{iV(x)}{2k}\frac{r(x, x_2)}{t(x, x_2)} + \frac{iV(x)}{2k}\frac{1}{t(x, x_2)}\exp\{2ikx\}, \tag{49}$$

с граничными условиями $1/t(x_2, x_2) = 1$, $r(x_2, x_2)/t^*(x_2, x_2) = 0$.

Полученные уравнения (46)–(49) являются базовыми уравнениями метода комбинации параметров рассеяния [10,11]. Ясно, что аналогичные уравнения могут быть написаны также для случая, когда амплитуды отражения и прохождения усеченных потенциалов определяются посредством правой задачи рассеяния.

Как известно, метод фазовых функций позволяет получить уравнения для амплитуд рассеяния, если только последние рассматриваются как функции от границы потенциала со стороны первичной падающей волны (см. [9]). Так, из (48), (49) можно записать

$$\frac{dt(x,x_2)}{dx}=\left(iV(x)/2k\right)t(x,x_2)\left(1+r(x,x_2)\exp\{-2ikx\}\right), \tag{50}$$

$$\frac{dr(x,x_2)}{dx}=\left(iV(x)/2k\right)\left(\exp\{ikx\}+r(x,x_2)\exp\{-ikx\}\right)^2, \tag{51}$$

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

Как видно из (48),(49) и (50), (51), уравнения, записанные для величин $1/t(x,x_2)$ и $r(x,x_2)/t(x,x_2)$, как функции от границы потенциала, в отличие от $t(x,x_2)$ и $r(x,x_2)$ являются линейными. Отметим также, что аналогичные (46)(51) уравнения могут быть получены для случая, когда элементы матрицы переноса связываются с амплитудами прохождения и отражения правой задачи рассеяния (42).

6. Метод интегральных уравнений

Для построения интегрального уравнения рассмотрим волновую функцию, соответствующую левой задаче рассеяния для потенциала $u(x)$ (16). Проинтегрируем систему уравнений (13), (14) с граничными условиями, заданными для функций $a(x)$ и $b(x)$ в двух различных точках:

$$a(x_1)=1,\ b(x_2)=0. \tag{52}$$

Рассматривая (2) и (33), легко видеть, что при данном граничном условии значение функции $a(x)$ в точке $x=x_2$ будет определять амплитуду прохождения, а значение $b(x)$ в точке $x=x_1$ – амплитуду отражения волны: $a(x_2)=t(x_1,x_2)$, $b(x_1)=r(x_1,x_2)$.

Из (13), (14) с учетом (52) для функций $a(x)$ и $b(x)$ можно записать:

$$a(x)=\begin{cases} 1, & x<x_1, \\ 1-\int\limits_{x_1}^{x}\frac{iu(x')}{2k}\psi(x')\exp\{-ikx'\}dx', & x_1<x<x_2, \\ 1-\int\limits_{x_1}^{x_2}\frac{iu(x')}{2k}\psi(x')\exp\{-ikx'\}dx', & x>x_2, \end{cases} \tag{53}$$

$$b(x) = \begin{cases} -\int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{ikx'\} dx', & x < x_1, \\ -\int\limits_{x}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{ikx'\} dx', & x_1 < x < x_2 \\ 0, & x > x_2. \end{cases} \tag{54}$$

Умножая $a(x)$ (53) на $\exp\{ikx\}$ и $b(x)$ (54) на $\exp\{-ikx\}$, с учетом (2) для волновой функции получим

$$\psi_{\text{left}}(x) = \begin{cases} \exp\{ikx\} - \exp\{-ikx\} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{ikx'\} dx', & x < x_1, \\ \exp\{ikx\} - \left[\exp\{ikx\} \int\limits_{x_1}^{x} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{-ikx'\} dx' + \right. \\ \left. + \exp\{-ikx\} \int\limits_{x}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{ikx'\} dx' \right], & x_1 < x < x_2, \\ \exp\{ikx\} - \exp\{ikx\} \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} \psi(x') \exp\{-ikx'\} dx', & x > x_2. \end{cases} \tag{55}$$

Используя обозначение $G_0(x, x') = i \exp\{ik|x - x'|\} / 2k$, легко видеть, что выражения для волновой функции, записанные для трех различных областей, могут быть представлены одним единым выражением:

$$\psi_{\text{left}}(x) = \exp\{ikx\} - \int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{iu(x')}{2k} G_0(x, x') \psi_{left}(x') \exp\{ikx'\} dx'. \tag{56}$$

Равенство (56) является интегральным уравнением для определения волновой функции левой задачи рассеяния. Отметим, что функция двух переменных $G_0(x, x')$ является запаздывающей функцией Грина уравнения Шредингера для свободного движения. Отметим также, что аналогичным образом можно вывести интегральное уравнение для волновой функции, соответствующей правой задаче рассеяния.

7. Заключение

Таким образом, мы показали, что наиболее известные методы рассмотрения задачи одномерного движения квантовой частицы в потенциальном поле, в конечном счете, приводятся к одному свойству решения уравнения Шредингера. Согласно излаженному методу, задача нахождения волновой функции в общем виде сводится к решению некоторой системы однородных линейных дифференциальных уравнений первого порядка. Кроме того, предлагаемый подход обеспечивает наглядную связь между такими, на первый взгляд, различными подходами, как метод интегральных уравнений, метод матрицы переноса, метод погружения и метод комбинации параметров рассеяния, умещая их изложение в одну единую схему.

ЛИТЕРАТУРА

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

12.**Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян, Э.М.Казарян, Л.Р.Седракян.** Изв. НАН Армении, Физика, **44**, №3 (2009).

ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՄԱՍՆԻԿԻ ՍՏԱՑԻՈՆԱՐ ՇԱՐԺՈՒՄԸ ԿԱՄԱՅԱԿԱՆ ՏԵՍՔԻ ՄԻԱՉԱՓ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ԴԱՇՏՈՒՄ

Ա.Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ, Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Վ.Ա. ԽՈՅԵՑՅԱՆ

Աշխատանքում զարգացված է հետևողական մոտեցում՝ կամայական տեսքի միաչափ պոտենցիալի դաշտում քվանտային մասնիկի ստացիոնար շարժման նկարագրման համար: Ապացուցված է, որ ինֆինիտ շարժման ալիքային ֆունկցիան, երկու կամայական հաստատունի ճշտությամբ, կարելի է ներկայացնել որոշակի գծային, առաջին կարգի դիֆֆերենցիալ հավասարումների համակարգի մեկ կամայական մասնավոր լուծման միջոցով: Ցույց է տրված, որ խնդրի դիտարկման հայտնի շատ մեթոդների հիմքում, ինչպիսիք են օրինակ՝ ինտե-գրալային հավասարումների մեթոդը, տրանսֆեր մատրիցների մեթոդը, ընկղմման մեթոդը և ցրման պարամետրերի համակցման մեթոդը, ընկած է Շրեդինգերի հավասարման լուծումների մի ընդանուր հատկություն: Այս մեթոդի շրջանակներում առավել ակնառու են դառնում վերը թվարկված մեթոդների կապը:

STATIONARY MOTION OF A QUANTUM PARTICLE IN THE FIELD OF A ONE-DIMENSIONAL ARBITRARY POTENTIAL

A.ZH. KHACHATRIAN, D.M. SEDRAKIAN, V.A. KHOETSYAN

A new approach to the problem of description of the stationary motion of a quantum particle is developed. It is shown that the wave function of infinite motion with the accuracy to arbitrary constants can be presented using an arbitrary single solution for a some set of linear differential equations of the first order. It is shown that in the base of many known methods of the problem consideration, such as the method of integral equations, the transfer-matrix method, imbedding method and the method of combination of scattering parameters, the one general property of the Schrödinger equation solution lays. In the framework of the suggested approach, the connection between the above-mentioned methods becomes more transparent.