10778

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

17/x-77

Р4 - 10778

В.К.Игнатович

РАССЕЯНИЕ ВОЛН И ЧАСТИЦ НА ОДНОМЕРНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

1977

P4 - 10778

В.К.Игнатович

РАССЕЯНИЕ ВОЛН И ЧАСТИЦ НА ОДНОМЕРНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ

Направлено в Journal of Physics A : Mathematical and General .

Игнатович В.К. Р4 - 10778

Рассеяние волн и частиц на одномерных периодических потенциалах

Получено замкнутое аналитическое выражение для амплитуд отраженной и прошедшей волн в случае рассеяния на одномерной периодической цепочке потенциалов, когда амплитуды рассеяния на одном потенциале известны.
Построены блоховские функции в одномерном случае.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Ignatovich V.K. P4 - 10778

Scattering of Waves and Particles on One-Dimensional Periodic Potentials

An analytical solution for reflected and transmitted waves in the case of one-dimensional periodic chain of potentials is presented, single potential scattering amplitudes are being known. One-dimensional Bloch functions are constructed.

The investigation has been performed at the Neutron Physics Laboratory, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. ВВЕДЕНИЕ

Во многих областях физики часто приходится иметь дело с распространением волн в периодических потенциалах. В качестве примера можно назвать оптику, акустику, физику твердого тела, нейтронную физику и другие. Обычно все задачи, относящиеся к этой проблеме, решаются приближенно. Единственным исключением является случай рассеяния на потенциале Кронига-Пенни [1], представляющем собой одномерную периодическую бесконечную решетку δ-образных потенциалов. В настоящей работе дается точное решение задачи о распространении волн и частиц, описываемых волновой функцией, в поле одномерного потенциала, если рассеяние на единичном потенциале считается известным. Это оказалось возможным благодаря тому, что удалось выразить амплитуду отражения от n периодически расположенных потенциалов через амплитуду рассеяния на одном потенциале. Подход к решению этой задачи формулируется во второй части настоящей работы на примере рассеяния скалярной нерелятивистской частицы на ступенчатом потенциале. Этот подход, вообще говоря, известен, но здесь он применяется значительно шире, чем обычно. В частности, он был использован в работе [2] при исследовании взаимодействия ультрахолодных нейтронов с поверхностью твердых тел.

В третьей части настоящей работы рассматривается рассеяние на периодической цепочке потенциалов, выводится рекуррентное соотношение, связывающее рассеяние на n потенциалах с рассеянием на $n-1$ потенциале, и находится точное аналитическое выражение для отражения от полубесконечной цепочки. В четвертой части дается решение рекуррентного соотношения для конечного n и тем самым для всей задачи и в пятой - указывается способ построения одномерной блоховской функции.

2. *РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦЫ НА СТУПЕНЧАТОМ ПОТЕНЦИАЛЕ*

Для большей конкретности здесь будет рассматриваться рассеяние нейтрона, хотя все изложенное применимо к любым волнам. Нейтрон описывается волновой функцией, определяемой уравнением Шредингера, которое можно записать следующим образом:

$$[\Delta - u(r) + k^2]\Psi(r) = 0,$$

где k - волновой вектор, а $u(r)$ - потенциал, поделенный на $\hbar^2/2m$, m - масса нейтрона. Пусть потенциал зависит только от одной координаты и представляет собой функцию, изображенную на *рис. 1.* Это ступенчатая функция, имеющая n скачков на n границах, перенумерованных справа налево, и разделяющая все пространство на $n+1$ частей, перенумерованных так, что i-я часть находится левее i-й границы. Пусть слева на n-ю границу падает волна с амплитудой Ψ_n^+, тогда амплитуда отраженной волны будет $R_n\psi_n^+$, где R_n - амплитуда отражения от n границ. Найдем рекуррентное соотношение между R_n и R_{n-1}, для этого найдем ψ_{n-1}^+, когда $\psi_n^+ = 1$. Запишем уравнение для ψ_{n-1}^+:

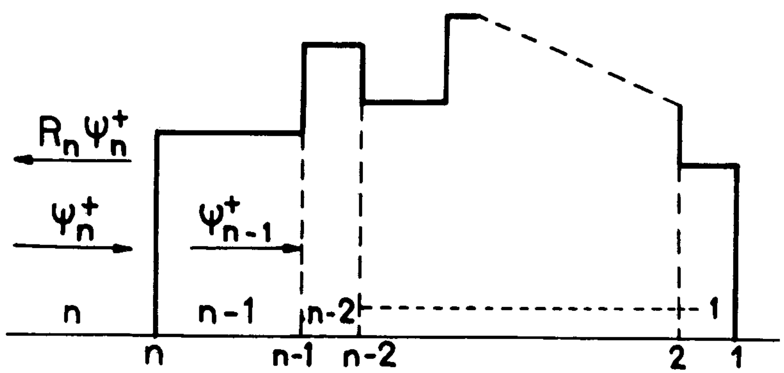

Рис. 1. Отражение от одномерного ступенчатого потенциала. Потенциал имеет n границ и делит пространство на $n+1$ частей. Волна, падающая на n-ю границу, обозначается ψ_n^+. Отраженная волна равна $R_n\psi_n^+$. R_i обозначает амплитуду отражения от части потенциала, расположенной правее i-й границы.

$$\psi_{n-1}^+ = \psi_{n-1}^+ R_{n-1} e^{i\phi_{n-1}} \cdot r_n^- e^{i\phi_{n-1}} + t_n^+ e^{i\phi_{n-1}} . \qquad /2/$$

Каждое слагаемое и каждый сомножитель в правой части имеет физический смысл. Действительно, в первом слагаемом имеем: первый множитель - амплитуда падающей волны, второй - амплитуда отражения от части потенциала, расположенной правее $(n-1)$-й границы, третий множитель - фазовый - показывает, какая фаза набегает у отраженной волны к тому времени, когда она от $(n-1)$-й границы дойдет к n-й, четвертый множитель - амплитуда отражения от n-й границы, пятый - указывает на увеличение фазы по мере распространения волны направо от границы n до границы $n-1$. Второе слагаемое равно волне с амплитудой $\psi_n^+ = 1$, прошедшей с амплитудой прохождения t_n^+ через n-ю границу и достигшей границы $n-1$ с дополнительной фазой ϕ_{n-1}. Обсудим встретившиеся здесь обозначения. Предполагается, что потенциал в области $n-1$ имеет величину u_{n-1}, тогда $\phi_{n-1} = k_{n-1}\ell_{n-1}$, где ℓ_{n-1} - размер $(n-1)$-й области, а $k_{n-1} = \sqrt{k^2 - u_{n-1}}$. Кроме величин r_n^- и t_n^+, входящих в выражение /2/, нам в дальнейшем понадобятся величины r_n^+ и t_n^-. Величины $r_n^\pm$ представляют собой амплитуды отраженных от n-й границы волн, когда первичная волна имеет единичную амплитуду и падает на эту границу слева или справа соответственно. Амплитуды волн, прошедших n-ю границу, в этом случае обозначаются $t_n^\pm$. Требование непрерывности волновой функции и ее производной на границе приводит к следующим выражениям для $r_n^{\pm}$ и $t_n^{\pm}$:

$$r_n^+ = -r_n^- = \frac{k_n - k_{n-1}}{k_n + k_{n-1}}, \qquad t_n^+ = \frac{2k_n}{k_n + k_{n-1}}, \qquad t_n^- = \frac{2k_{n-1}}{k_n + k_{n-1}},$$

$$k_i = \sqrt{k^2 - u_i}\,. \qquad /3/$$

Из /2/ следует, что

$$\psi_{n-1}^+ = \frac{t_n^+ e^{i\phi_{n-1}}}{1 - r_n R_{n-1}^- e^{2i\phi_{n-1}}}\,. \qquad /4/$$

Пользуясь теми же приемами, что и при написании уравнения /2/, найдем выражение для амплитуды отражения R_n :

$$R_n = r_n^+ + \Psi_{n-1}^+ R_{n-1} e^{i\phi_{n-1}} \cdot t_n^- =$$

$$= \frac{r_n^+ + (t_n^+ t_n^- - r_n^+ r_n^-) e^{2i\phi_{n-1}} R_{n-1}}{1 - r_n^- R_{n-1} e^{2i\phi_{n-1}}}, \qquad /5/$$

и аналогично для амплитуды прохождения T_n :

$$T_n = \psi_{n-1}^+ T_{n-1} = \frac{t_n^+ e^{i\phi_{n-1}} T_{n-1}}{1 - r_n^- R_{n-1} e^{2i\phi_{n-1}}}\,. \qquad /6/$$

Полученные рекуррентные соотношения позволяют найти R_n и T_n, исходя из $R_1 = r_1^+$ и $T_1 = t_1^+$ или проведя воображаемую 0-ю границу с $T_0 = 1$ и $R_0 = 0$. В качестве примера применения всех этих построений рассмотрим рассеяние на прямоугольном барьере: $n = 2$, когда $u = u_1$, $R_1 = r_1^+ = r_2^-$, $T_1 = t_1^+ = t_2^-$. Обозначим $r_2^+ = -r_2^- = r_0$ и учтем, что согласно /3/ $t_2^+ t_2^- - r_2^+ r_2^- = 1$. Из выражения /5/ следует, что

$$R_2 = \frac{r_0 (1 - e^{2i\phi_1})}{1 - r_0^2 e^{2i\phi_1}}, \qquad /7/$$

а из выражения /6/, что

$$T_2 = e^{i\phi_1} \frac{(1 - r_0^2)}{1 - r_0^2 e^{2i\phi_1}}\,. \qquad /8/$$

Введем обозначения: $k/\sqrt{u_1} = \mathrm{ch}\,\chi$, тогда $r_0 = e^{-2\chi}$ и

$$R_2 = \frac{\sin\phi_1}{\sin(\phi_1 + 2i\chi)} = \frac{\sin\phi_1}{\sqrt{\sin^2\phi_1 + \mathrm{sh}^2 2\chi}}\, e^{-i\eta},$$

$$T_2 = \frac{i\,\mathrm{sh}2\chi}{\sin(\phi_1 + 2i\chi)} = \frac{i\,\mathrm{sh}2\chi}{\sqrt{\sin^2\phi_1 + \mathrm{sh}^2 2\chi}}\, e^{-i\eta}, \qquad /9/$$

$$= \mathrm{arctg}\,(\mathrm{th}2\chi \cdot \mathrm{ctg}\phi_1)\,.$$

Когда энергия нейтрона k^2 меньше барьера u_1, тогда $\chi = i\chi''$, $\phi_1 = i\phi''$, где χ'' и ϕ_1'' - действительные величины, и /9/ преобразуется очевидным образом. Если $k^2 < 0$ и $u_1 < 0$, то $r_0 = \exp(2i\chi)$, где $\chi = \arccos\sqrt{k^2/u_1}$,

$$R_2 = \frac{\sin\phi_1}{\sin(\phi_1 + 2\chi)}, \qquad T_2 = \frac{\sin 2\chi}{\sin(\phi_1 + 2\chi)}. \qquad /10/$$

Рассмотрим теперь предельный случай $u_1 \to \infty$, $\ell_1 \to 0$, но $u_1 \ell = 2p = \mathrm{const}$. Тогда для $u_1 > 0$ имеем $\phi_1 = i\phi_1'' \approx i\sqrt{2p\,\ell_1}$ и $\chi = i\chi'' \approx i\left(\frac{\pi}{2} - \frac{k\sqrt{\ell}}{\sqrt{2p}}\right)$, а выражения /9/ принимают следующий вид:

$$R_2 = \frac{\mathrm{sh}\phi_1''}{\mathrm{sh}(\phi_1'' + 2i\chi'')} \to \frac{p}{ik - p} = \frac{p}{\sqrt{p^2 + k^2}}\, e^{-i\eta},$$

$$T_2 = \frac{i \sin 2\chi''}{\mathrm{sh}(\phi_1'' + 2i\chi'')} \to \frac{ik}{ik-p} = \frac{ik}{\sqrt{p^2+k^2}} e^{-i\eta} , \qquad /11/$$

$$\eta = \pi - \mathrm{arctg}\,\frac{k}{p},$$

что совпадает с амплитудами отражения и прохождения при рассеянии на δ-потенциале: $u(x) = 2p\delta(x)$.

3. *РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ВОЛН, ОТРАЖЕННЫХ ОТ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА. ОТРАЖЕНИЕ ОТ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКИ*

Рассмотрим теперь отражение от периодического потенциала, представленного на *рис. 2*, предполагая, что амплитуды отражения $r^{\pm}$ и прохождения $t^{\pm}$ на одном потенциальном барьере известны. Примем для простоты, что потенциальный барьер /барьер может быть также и ямой и вообще любой функцией/ симметричен, т.е. $r^{+} = r^{-} = r$ и $t^{\pm} = t$. Фаза ϕ_i, набегающая между потенциалами, равна $\phi_i = \phi = k\ell$. Воспользовавшись выражением /5/, запишем рекуррентное соотношение между

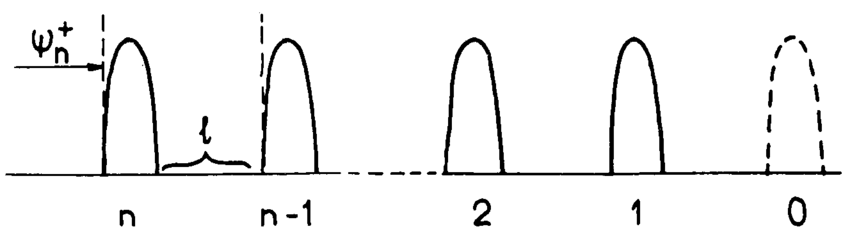

Рис. 2. Периодическая цепочка произвольных одномерных потенциалов. Пунктиром справа обозначен воображаемый потенциал, амплитуда отражения от которого R_0 равна нулю.

амплитудой R_n отражения от n периодов и амплитудой R_{n-1} отражения от $n-1$ периода:

$$R_n = \frac{r + (t^2 - r^2)e^{2i\phi} R_{n-1}}{1 - r e^{2i\phi} R_{n-1}} . \qquad /12/$$

Это соотношение можно привести к более простому виду, если сделать преобразование $R_n = rS_n$, в результате получим:

$$S_n = \frac{1 + aS_{n-1}}{1 - b^2 S_{n-1}} , \qquad /13/$$

где $b = r\exp(i\phi)$, а $a = (t^2 - r^2)\exp(2i\phi)$. Для симметричных потенциалов нетрудно доказать, и это сделано в приложении, что если обозначить

$$r = |\bar{r}|\, e^{-i\eta}, \qquad /14/$$

то при

$$k^2 > 0$$

$$t^2 - r^2 = -e^{-2i\eta} . \qquad /15/$$

В выражении /14/ модуль r обозначен $|\bar{r}|$. Это имеет следующий смысл: если потенциал действительный, то $|\bar{r}| = |r|$ - действительная величина, если же потенциал содержит мнимую добавку, то при вычислении $|\bar{r}|$ знак этой добавки менять не следует. Таким образом, в случае комплексных потенциалов величина $|\bar{r}|$ тоже комплексна, как, впрочем, и η.

Рассмотрим сначала случай $n \to \infty$, при этом S_n и $S_{n-1} \to S_\infty = S$ и для S получается следующее квадратное уравнение:

$$S^2 b^2 - (1-a)S + 1 = 0, \qquad /16/$$

решение которого равно:

$$S = \frac{1 - a \pm \sqrt{(1-a)^2 - 4b^2}}{2b^2} . \qquad /17/$$

Из /17/ следует, что имеется два возможных решения для $R_\infty = R$:

$$R = \frac{r}{2b^2}(1-a-\sqrt{(1-a)^2-4b^2}),$$
$$R' = \frac{r}{2b^2}(1-a+\sqrt{(1-a)^2-4b^2}). \qquad /18/$$

Отметим мимоходом, что решение квадратного уравнения $x^2-2px+q^2=0$ может быть записано в виде

$$x_{1,2} = q\frac{\sqrt{p+q} \pm \sqrt{p-q}}{\sqrt{p+q} \mp \sqrt{p-q}}. \qquad /19/$$

Соответственно выражение для R может быть представлено в виде, аналогичном формулам Френеля:

$$R, R' = e^{-i\phi}\frac{\sqrt{1-a+2b} \pm \sqrt{1-a-2b}}{\sqrt{1-a+2b} \mp \sqrt{1-a-2b}}. \qquad /20/$$

Из двух выражений /20/ в качестве амплитуды отражения следует выбрать выражение

$$R = e^{-i\phi}\frac{\sqrt{1-a+2b} - \sqrt{1-a-2b}}{\sqrt{1-a+2b} + \sqrt{1-a-2b}}, \qquad /21/$$

поскольку при $b \to 0$ оно приводит к разумному результату $R=0$. Воспользовавшись выражениями /14/ и /15/, приведем /21/ к виду

$$R = e^{-i\phi}\frac{\sqrt{\cos(\eta-\phi)+|\bar{r}|} - \sqrt{\cos(\eta-\phi)-|\bar{r}|}}{\sqrt{\cos(\eta-\phi)+|\bar{r}|} + \sqrt{\cos(\eta-\phi)-|\bar{r}|}}. \qquad /22/$$

Отметим, что R связано с R' соотношением

$$R \cdot R' = e^{-2i\phi}. \qquad /23/$$

В случае потенциала Кронига-Пенни, когда единичный потенциал равен $2p\delta(x)$, имеем:

$$R = e^{-ik\ell}\frac{\sqrt{k+p\,\mathrm{tg}\frac{k\ell}{2}} - \sqrt{k-p\,\mathrm{ctg}\frac{k\ell}{2}}}{\sqrt{k+p\cdot\mathrm{tg}\frac{k\ell}{2}} + \sqrt{k-p\,\mathrm{ctg}\frac{k\ell}{2}}}. \qquad /24/$$

Здесь содержится вся информация, имеющая отношение к дифракции.

4. РЕШЕНИЕ РЕКУРРЕНТНОГО СООТНОШЕНИЯ

Для решения рекуррентного соотношения /13/ сделаем подстановку

$$S_n = \frac{p_n}{q_n}. \qquad /25/$$

Тогда для p_n и q_n получим следующую систему уравнений:

$$p_n = (q_{n-1} + a\cdot p_{n-1})c,$$
$$q_n = (q_{n-1} - b^2 p_{n-1})c, \qquad /26/$$

где c - произвольная постоянная. Для простоты мы ее можем положить равной 1. Уравнения /26/ можно переписать в матричном виде:

$$\xi_n = M\xi_{n-1}, \qquad /27/$$

где

$$\xi_n = \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} a & 1 \\ -b^2 & 1 \end{pmatrix}. \qquad /28/$$

Матрицу M можно разложить по четырем базисным:

$$M = \alpha I + \vec{\beta}\vec{\sigma}, \qquad /29/$$

где I - единичная, а $\vec{\sigma}$ - матрицы Паули σ_x, σ_y и σ_z. Коэффициенты разложения равны:

$$\alpha = \frac{a+1}{2},\ \beta_x = \frac{1-b^2}{2},\ \beta_y = i\frac{1+b^2}{2},\ \beta_z = \frac{a-1}{2}. \qquad /30/$$

Из рекуррентного соотношения /27/ следует:

$$\xi_n = M^n \cdot \xi_0 . \qquad /31/$$

Чтобы задать ξ_0, вообразим себе мысленно, что правее самого последнего потенциала находится еще один потенциал, отражение от которого равно нулю: $R_0 = 0$, тогда можно положить $p_0 = 0$, $q_0 = 1$:

$$\xi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \qquad /32/$$

Разложим спинор /или двухкомпонентный вектор/ ξ_0 на два собственных спинора матрицы $\vec{\beta}\vec{\sigma}$

$$\xi_0 = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{\vec{\beta}\vec{\sigma}}{\beta}\right)\xi_0 + \left(1 - \frac{\vec{\beta}\vec{\sigma}}{\beta}\right)\xi_0 \right] = u_+ + u_- . \qquad /33/$$

Нетрудно видеть, что для $u_\pm$ выполняются следующие соотношения:

$$\vec{\beta}\vec{\sigma}\cdot u_\pm = \pm\beta u_\pm ;\quad f(\vec{\beta}\vec{\sigma})u_\pm = f(\pm\beta)u_\pm . \qquad /34/$$

С учетом этого выражение /31/ записывается следующим образом:

$$\xi_n = \frac{1}{2}\left[(\alpha+\beta)^n \left(1 + \frac{\vec{\beta}\vec{\sigma}}{\beta}\right) + (\alpha-\beta)^n \left(1 - \frac{\vec{\beta}\vec{\sigma}}{\beta}\right) \right]\xi_0 , \qquad /35/$$

отсюда нетрудно найти значение p_n и q_n, а значит, и R_n:

$$R_n = r\,\frac{p_n}{q_n} = r\,\frac{[(\alpha+\beta)^n - (\alpha-\beta)^n](\beta_x - i\beta_y)}{(\alpha+\beta)^n(\beta-\beta_z) + (\alpha-\beta)^n(\beta+\beta_z)} . \qquad /36/$$

Согласно /30/ $\beta_x - i\beta_y = 1$, $\beta = \sqrt{\beta_x^2+\beta_y^2+\beta_z^2} = \sqrt{(1-a)^2-4b^2}/2$. Учитывая также /18/, имеем: $\beta+\beta_z = -b^2R/r$ и $\beta-\beta_z = b^2R'/r$, поэтому для R_n можно записать следующие выражения:

$$R_n = e^{-2i\phi}\,\frac{1-\lambda^n}{R'-\lambda^n R} = R'\,\frac{1-\lambda^n}{R'/R-\lambda^n} = R\,\frac{1-\lambda^n}{1-\lambda^n R/R'} =$$

$$= R\,\frac{1-\lambda^n}{1-R^2\lambda^n e^{2i\phi}} , \qquad /37/$$

где было использовано соотношение /23/ и введено обозначение

$$\lambda = \frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta} . \qquad /38/$$

Интересно отметить, что если в соответствии с /21/ положить $R = R_0 e^{-i\phi}$ и $R_n = R_{n0}\exp(-i\phi)$, то результирующее выражение для R_{n0}

$$R_{n0} = R_0\,\frac{1-\lambda^n}{1-R_0^2\lambda^n} \qquad /39/$$

будет иметь большое сходство с амплитудой отражения от прямоугольного барьера /7/, поскольку λ^n играет роль $\exp(2i\phi_1)$ в выражении /7/. Действительно, рассмотрим более подробно выражение для λ. Принимая во внимание выражение для коэффициентов α и β в /38/, получаем:

$$\lambda = \frac{\sin(\eta-\phi) - i\sqrt{\cos^2(\eta-\phi) - |\bar{r}|^2}}{\sin(\eta-\phi) + i\sqrt{\cos^2(\eta-\phi) - |\bar{r}|^2}} . \qquad /40/$$

Сравнение с /22/ показывает, что λ может быть представлена как $e^{2i\gamma}$, когда $|R_0|<1$, и $|\lambda|<1$, когда R_0 может быть представлено как $\exp(-2i\chi)$ аналогично выражению /7/ для $k^2>0$, $u_1>0$. Аналогия может быть распространена и на другие области k^2 и u_1.

Найдем теперь амплитуду прохождения T. Ее необходимо находить независимо от $|R|$ в случаях, когда потенциал содержит мнимые добавки. Рассмотрим рекуррентное соотношение /12/ и запишем его еще одним способом:

$$R_n = \frac{r + (t^2 - r^2)e^{2i\phi} R_{n-1}}{1 - re^{2i\phi} R_{n-1}} = \frac{R_{n-1} + (T_{n-1}^2 - R_{n-1}^2)e^{2i\phi} r}{1 - R_{n-1}e^{2i\phi} r} . \qquad /41/$$

При получении второго варианта рекуррентного соотношения $(n-1)$ потенциалов от 2 до n-го включительно принимались как единый потенциал. Выражение /41/ позволяет выразить T_{n-1} через R_{n-1} или аналогично T_n через R_n:

$$T_n^2 = R_n^2 - (1-a)\frac{r}{b^2}R_n + \frac{r^2}{b^2}. \qquad /42/$$

Квадратный трехчлен в правой части имеет согласно уравнению /16/ корни R и R', поэтому T_n^2 можно представить как

$$T_n^2 = (R_n - R)(R_n - R'). \qquad /43/$$

Подставив в каждую скобку /43/ подходящее выражение из /37/ для R_n, получим:

$$T_n^2 = e^{-2i\phi}\lambda^n \frac{(R'-R)^2}{(R'-\lambda^n R)^2}, \qquad /44/$$

или

$$T_n = e^{-i\phi}\lambda^{n/2}\frac{1-R^2e^{-2i\phi}}{1-\lambda^n R^2 e^{2i\phi}}. \qquad /45/$$

В этом выражении также обнаруживается сходство со случаем рассеяния на прямоугольном барьере /8/, как и в выражении для амплитуды отражения /39/.

При найденных значениях R_n и T_n не составляет труда найти всю волновую функцию в любом месте внутри периодического потенциала. Действительно, волна, падающая слева на k-й потенциал, равна:

$$\psi_k^+ = \frac{T_{n-k}e^{i\phi}}{1-R_{n-k}e^{2i\phi}R_k}, \qquad /46/$$

а волна, уходящая налево, равна $R_k\psi_k^+$. Аналогичные выражения можно найти и для волн справа от k-го потенциала. Внутри потенциала решение содержит входящие и выходящие волны, вид которых не зависит от наличия других потенциалов, и только коэффициенты при этих функциях целиком и полностью определяются амплитудами волн, падающих слева и справа.

5. БЛОХОВСКИЕ ВОЛНЫ

Метод, использованный здесь, позволяет несколько иначе взглянуть на проблему блоховских волн в одномерном случае. Он дает возможность рассчитать блоховскую функцию при произвольном взаимодействии электрона с "атомом". Рассмотрим сначала бесконечную периодическую цепочку потенциалов. Пусть волна, падающая на i-й атома слева, равна ψ_i^+, а волна, уходящая налево, - ψ_i^-. Поскольку полная волновая функция должна быть блоховской, то волны, относящиеся к $(i-1)$-му атому, равны соответствующим волнам i-го атома с дополнительным фактором вида e^{-ipd}, где p-произвольное число, а d - период решетки. Запишем теперь систему уравнений для $\psi_i^\pm$:

$$\begin{aligned}\psi_i^+ &= \psi_i^- e^{2i\phi} r + \psi_{i-1}^+ t e^{i\phi}, \\ \psi_i^- &= r\psi_i^+ + \psi_{i+1}^- e^{i\phi} t.\end{aligned} \qquad /47/$$

Смысл этих уравнений вполне прозрачен и не нуждается в комментариях. Приняв во внимание соотношение

$$\psi_{i+1}^- = e^{ipd}\psi_i^-, \quad \psi_{i-1}^+ = e^{-ipd}\psi_i^+, \qquad /48/$$

получим однородную систему уравнений, которая может иметь нетривиальное решение только при равном нулю детерминанте:

$$\begin{aligned}&(te^{i\phi-ipd}-1)(t\,e^{i\phi+ipd}-1)-r^2e^{2i\phi} = \\ &= (t^2-r^2)e^{2i\phi} + 1 - 2te^{i\phi}\cos pd = 0.\end{aligned} \qquad /49/$$

Учитывая соотношение /15/ и записывая

$$t = i\,|t|\,e^{-i\eta} \qquad /50/$$

/это соотношение для $k^2>0$ также доказано в *Приложении*/, приведем уравнение /49/ к виду

$$\sin(\eta-\phi) = |t| \cos pd \; . \qquad /51/$$

При любом значении p, которое в случае симметричных потенциалов имеет смысл выбирать только на интервале $p \in (0, \pi/d)$, имеем целое множество корней k уравнения /51/, каждый из которых принадлежит одной энергетической зоне, причем разные корни относятся к разным зонам. Очевидно, что иа оси k возможно существование бесконечного множества таких интервалов, что k, принадлежащие этим интервалам, не удовлетворяют уравнению /51/ ни при каких действительных p. Эти интервалы составляют запретные зоны.

Один из способов обобщения одномерного случая на трехмерный состоит в преобразовании одномерного решения с помощью групповых операций. Полученное решение будет приближенным, и для оценки качества этого приближения требуются дополнительные исследования.

Интересно отметить, что с помощью изложенного метода можно исследовать любые, не обязательно периодические, граничные условия. Пусть, например, потенциал состоит из n периодических звеньев, после чего в игру вступают границы. Пусть отражение от правой границы равно ρ_0, а от левой - ρ_{n+1}. Запишем систему уравнений для $\psi_n^{\pm}$:

$$\psi_n^+ = \psi_n^- e^{i\phi_n} \rho_{n+1} e^{i\phi_n}, \qquad /52/$$

$$\psi_n^- = \psi_n^+ \frac{R_n + (T_n^2 - R_n^2) e^{2i\phi_0} \rho_0}{1 - R_n e^{2i\phi_0} \rho_0} \qquad /53/$$

Условие разрешимости этой системы приводит к уравнению:

$$1 - R_n e^{2i\phi_0} \rho_0 = [R_n + (T_n^2 - R_n^2) e^{2i\phi_0} \rho_0] e^{2i\phi_n} \rho_{n+1} \, . \qquad /54/$$

Отметим, что уравнение /54/ не зависит от p. Чтобы волновая функция была стационарна, отражение на границах решетки должно быть полным, т.е. $|\rho_0| = |\rho_{n+1}| = 1$. При этих условиях уравнение /54/ имеет дискретное множество действительных корней k. Дискретный спектр k может приводить к различным дискретным спектрам p в разных зонах, что, в свою очередь, может влиять на заселенность зон.

В заключение можно сказать, что метод, примененный здесь, представляется весьма эффективным и может оказаться полезным в различных областях физики, например, в оптике, кристаллографии и даже в ядерной физике и биофизике длинных мономолекулярных нитей. При этом совершенно необязательно предполагать, что отдельные потенциалы симметричны и что они разделены некоторым расстоянием ℓ. Вполне можно предполагать, что $\ell = 0$, тогда и $\phi = k\ell = 0$. Более того, совсем необязательно считать, что k, определяющее ϕ, равно волновому вектору в вакууме. Метод хорошо работает и тогда, когда k в промежуточных точках чисто мнимое.

Автор выражает свою признательность В.И.Лущикову за доброжелательное отношение к работе и Ю.Н.Покотиловскому за полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Докажем, что для симметричного потенциала при $k^2>0$ амплитуды r и t связаны соотношением

$$r^2 - t^2 = e^{-2i\eta}. \qquad /1А/$$

Пусть потенциал ограничен двумя границами при x_1 и x_2. Внутри потенциала можно всегда выбрать такие действительные линейно независимые решения уравнения Шредингера, что одно /скажем, $y_s(s)$ / симметрично, а другое /$y_a(x)$/ - антисимметрично, причем $y_s(x_1) = y_s(x_2) = 1$, а $y_a(x_2) = -y_a(x_2) = 1$. Представим волновую функцию слева (ψ_ℓ), справа (ψ_r) и внутри (ψ_{in}) потенциала следующим образом:

$$\psi_\ell(x) = e^{ik(x-x_1)} + r e^{-ik(x-x_1)}, \quad \psi_2 = t e^{ik(x-x_2)},$$

$$\psi_{in}(x) = a y_s(x) + b y_a(x). \qquad /2A/$$

Требуя непрерывности функции и ее производной на границах, приходим к следующей системе уравнений:

$$1 + r = a + b, \quad t = a - b,$$

$$ik(1-r) = a\ell + bD, \quad ik\,t = -a\ell + bD, \qquad /3A/$$

где $C = y_s'(x_1) = -y_s'(x_2)$, $D = y_a'(x_1) = y_a'(x_2)$. Решение этой системы равно:

$$r = \frac{k^2 + DC}{-DC + k^2 - ik(D+C)} = \frac{k^2 + DC}{\sqrt{(k^2-DC)^2 + k^2(D+C)^2}}\, e^{-i\eta},$$

$$/4A/$$

$$t = \frac{ik(C-D)}{k^2 - DC - ik(D+C)} = \frac{ik(C-D)}{\sqrt{(k^2-DC)^2 + k^2(D+C)^2}}\, e^{-i\eta}.$$

Отсюда и следует справедливость соотношения /1A/ и возможность представить t в виде

$$t = i|t|e^{-i\eta}. \qquad /5A/$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Kronig R. de L. Penney W. Proc.Roy.Soc., 1931, 130, 499.
2. Игнатович В.К. ОИЯИ, Р4-7831, Дубна, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел 23 июня 1977 года.