85-123

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-85-123

В.К.Игнатович

РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ И ОДНОМЕРНЫЙ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Направлено в "American Journal of Physics"

1985

Для решения одномерного уравнения Шредингера очень эффективен метод рекуррентных соотношений. Он часто используется как при численных, так и при аналитических решениях различных квантовых или волновых задач и время от времени переоткрывается вновь и вновь /см., например, [1] /. Тем не менее не все применения этого метода известны широкой научной общественности. Об этом свидетельствует примитивный подход к решению задач дифракции в слоистых системах, которые последнее время все больше используются и в науке, и в технике. Периодический потенциал является исключительно эффективным для демонстрации удивительных возможностей рекуррентного метода. Цель настоящей заметки - показать, как много известных и малоизвестных, но исключительно простых и красивых формул может быть получено этим методом для совершенно произвольного периодического потенциала. Далее мы будем предполагать, что периоды шириной ℓ разделены бесконечно узкими щелями, наличие которых не сказывается ни на каких процессах, что очевидно из элементарных физических соображений. Кроме того, будем полагать, что амплитуды отражения и преломления r и t для одного периода известны; для простоты их зависимость от энергии падающей частицы указываться не будет. Будем также предполагать, что потенциал, относящийся к одному периоду, симметричен относительно его центра. В противном случае следовало бы различать амплитуды $\vec{r}, \vec{t}$ и $\overleftarrow{r}, \overleftarrow{t}$ для волн, падающих на потенциал слева и справа соответственно. Однако нетрудно показать, что амплитуды t, t одинаковы, $\vec{t} = \overleftarrow{t}$, а амплитуды $\vec{r}, \overleftarrow{r}$ различаются только некоторой фазой: $\vec{r} = \overleftarrow{r}\exp(i\phi)$, причем эти соотношения наследуются при рассеянии на потенциале с любым числом периодов, поэтому задачу всегда можно свести к симметричному виду.

Приведем сначала те формулы, которые будут выведены ниже. Все они были получены в [2-4].

1/ Амплитуда отражения от полубесконечного периодического потенциала

$$R_\infty = (\sqrt{a_+} - \sqrt{a_-})/(\sqrt{a_+} + \sqrt{a_-}); \quad a_\pm = (r \pm 1)^2 - t^2 . \qquad /1/$$

Для сравнения полезно указать формулу для отражения от потенциальной ступеньки высоты u:

$$\tilde{R}_\infty = (\sqrt{E} - \sqrt{E'})/(\sqrt{E} + \sqrt{E'}); \quad E' = E - u , \qquad /1'/$$

где E - энергия падающей частицы.

2/ Амплитуды отражения и прохождения потенциала с N периодами

$$R_N = R_\infty (1 - e^{2iqL})/(1 - R_\infty^2 e^{2iqL}); \quad L = N\ell , \qquad /2/$$

$$T_N = e^{iqL}(1 - R_\infty^2)/(1 - R_\infty^2 e^{2iqL}). \qquad /3/.$$

Аналогичные формулы для прямоугольного потенциала ширины L имеют вид

$$\tilde{R}_N = \tilde{R}_\infty (1 - e^{2ik'L})/(1 - \tilde{R}_\infty^2 e^{2ik'L}), \qquad /2'/$$

$$\tilde{T}_N = e^{ik'L}(1 - \tilde{R}_\infty^2)/(1 - \tilde{R}_\infty^2 e^{2ik'L}), \qquad /3'/$$

где $k' = \sqrt{2mE}/h$, m- масса частицы /мы будем считать частицу массивной, хотя все формулы можно обобщить и на случай безмассовой частицы/.

3/ Волновое число q в /2/ и /3/ известно как "блоховское волновое число". Для произвольного периодического потенциала его можно найти с помощью следующего выражения :

$$e^{iq\ell} = (\sqrt{b_+} - \sqrt{b_-})/(\sqrt{b_+} + \sqrt{b_-}); \quad b_\pm = (t \pm 1)^2 - r^2 . \qquad /4/$$

Легко проверить, что для волнового числа внутри прямоугольного потенциала k' можно получить аналогичное же выражение, если представить себе, что широкий прямоугольник разбит на N одинаковых малых прямоугольников, амплитуды r и t для которых имеют вид /2'/, /3'/, где в качестве L следует подставить $\ell = L/N$.

РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Представим себе, что слева на полубесконечный периодический потенциал падает волна единичной амплитуды /см. рисунок/. Эта волна пройдет через первый период и, попав в первую бесконечно узкую щель, будет многократно отражаться от левого и правого краев этой щели. В результате образуется суммарная волна, которая состоит из двух волн $\vec{\psi}_1$ и $\overleftarrow{\psi}_1$, падающих соответственно на правый и на левый край щели. Поскольку полубесконечный периодический потенциал без одного периода все равно является полубесконечным, то $\overleftarrow{\psi}_1 = R_\infty \vec{\psi}_1$, и для $\vec{\psi}_1$ можно составить следующее уравнение:

$$\vec{\psi}_1 = rR_\infty \vec{\psi}_1 + t\vec{\psi}_0 = r\overleftarrow{\psi}_1 + t\vec{\psi}_0 , \qquad /5/$$

где $\vec{\psi}_0$ - амплитуда волны, падающей слева на весь потенциал. Поскольку $\vec{\psi}_0$ по предложению равна единице, то из /5/ следует

$$\vec{\psi}_1 = (1 - rR_\infty)^{-1}\, t\,. \qquad /6/$$

Волна, отраженная от полного потенциала, складывается из волны $r\psi_0$, отраженной от первого периода, и волны $t\overleftarrow{\psi}_1$, прошедшей обратно из первой щели, т.е. для полной амплитуды отражения R_∞ получается уравнение

$$R_\infty = r + t\overleftarrow{\psi}_1 = r + tR_\infty(1 - rR_\infty)^{-1}\, t\,, \qquad /7/$$

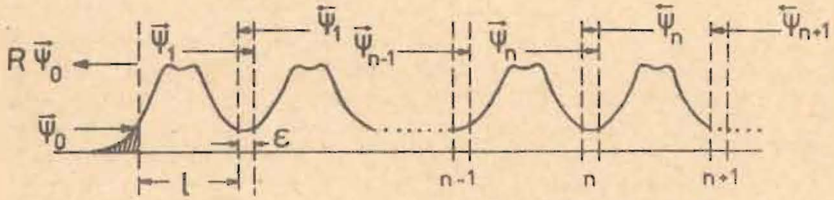
или, в случае скалярных волн, когда r и t – комплексные числа, имеем

$$R_\infty^2 + R_\infty(t^2 - r^2 - 1)/r + 1 = 0\,. \qquad /8/$$

Интересно отметить, что решение квадратного уравнения вида $a^2x^2 - 2bx + c^2 = 0$ можно представить следующим образом:

$$x_{1,2} = ac\,(\sqrt{b+ac} \pm \sqrt{b-ac}\,)/(\sqrt{b+ac} \pm \sqrt{b-ac}\,)\,. \qquad /9/$$

Отсюда сразу же следует выражение /1/, если учесть, что при $r \to 0$, $t \to 1$ амплитуда R_∞ должна стремиться к нулю. Отметим, что формула /1/ очень напоминает выражение для коэффициентов Френеля.



Потенциал реальной слоистой среды конечных размеров является не совсем периодичным, поскольку вблизи поверхности имеется дополнительная часть, указанная здесь штриховкой, однако, пользуясь тем же рекуррентным методом, ее нетрудно принять во внимание в окончательных формулах. Здесь ℓ – размер одного периода, а ϵ – бесконечно узкие щели между периодами, где потенциал равен нулю; $\vec{\psi}_n$ и $\overleftarrow{\psi}_n$ обозначают волны, падающие на правую и левую стенку стенку n-й щели соответственно.

БЛОХОВСКОЕ ВОЛНОВОЕ ЧИСЛО

Выведем теперь /4/. Блоховская волна, возбужденная падающей слева волной $\vec{\psi}_0 = 1$, в n-й бесконечно узкой щели представляется суммой $\vec{\psi}_n + \overleftarrow{\psi}_n$, причем, поскольку волна внутри потенциала в данном

случае распространяется только направо, то $\overleftarrow{\psi}_n = \exp(ig\ell n)\overleftarrow{\psi}_0$, таким образом, $\vec{\psi}_n + \overleftarrow{\psi}_n = (1+R_\infty)\vec{\psi} = (1+R_\infty)\exp(ig\ell n)$. Составим, однако, для $\vec{\psi}_n$ и $\overleftarrow{\psi}_n$ следующую очевидную систему уравнений:

$$\vec{\psi}_n = t\vec{\psi}_{n-1} + r\overleftarrow{\psi}_n\,, \qquad /10/$$

$$\overleftarrow{\psi}_n = t\overleftarrow{\psi}_{n+1} + r\vec{\psi}_n\,. \qquad /11/$$

Заменив $\psi_{n\pm 1}$ на $\exp(\pm iq\ell)\psi_n$, получим систему

$$\vec{\psi}_n = t\exp(-iq\ell)\,\vec{\psi}_n + r\overleftarrow{\psi}_n\,, \qquad /12/$$

$$\overleftarrow{\psi}_n = t\exp(iq\ell)\,\overleftarrow{\psi}_n + r\vec{\psi}_n\,, \qquad /13/$$

условие разрешимости которой

$$1 - t\exp(-iq\ell) = r(1 - t\exp(iq\ell))^{-1}\, r\,, \qquad /14/$$

или, в скалярном случае,

$$\exp(2iq\ell) + \exp(iq\ell)(r^2 - t^2 - 1)/t + 1 = 0\,. \qquad /15/$$

Это уравнение имеет такой же вид, что и /8/, только r и t следует поменять местами, поэтому его решение может быть представлено в виде /4/, где знаки перед корнями выбираются таким образом, чтобы при $r \to 0$ и $t \to e^{ik\ell}$ автоматически следовало бы $q \to k$.

АМПЛИТУДА ОТРАЖЕННОЙ И ПРОШЕДШЕЙ ВОЛН В СЛУЧАЕ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА С КОНЕЧНЫМ ЧИСЛОМ ПЕРИОДОВ N

Заметим, что N периодов в полубесконечном периодическом потенциале можно рассматривать как один большой период, поэтому уравнения /8/ и /15/ можно записать в следующем виде:

$$R_\infty^2 + R_\infty(T_N^2 - R_N^2 - 1)/R_N + 1 = 0\,, \qquad /16/$$

$$[\exp(ig\ell N)]^2 + \exp(ig\ell N)(R_N^2 - T_N^2 - 1)/T_N + 1 = 0\,. \qquad /17/$$

Если разрешить эти уравнения относительно R_N и T_N, то придем к формулам /2/ и /3/.

Следующий шаг состоит в том, чтобы обобщить полученные уравнения на нескалярный случай, когда амплитуды r и t являются матрицами. Возможен и другой вариант, а именно: волна описывает скалярную частицу, но потенциал представляет собой набор плоскостей, в каждой из которых возможна дифракция. В этом случае r и t опять представляются не числами, а матрицами. Уравнения

/7/ и /14/ записаны в таком виде, который справедлив и для матриц. Однако решение их предоставляется читателю, поскольку автору найти красивое, т.е. простое решение пока не удалось.

ПРИМЕР

Поскольку, по-видимому, не имеет смысла выписывать хорошо известные формулы, то мы только укажем на пример потенциала Кроннига-Пенни, один период которого может быть представлен в следующем виде

$$v = \theta(0 < x < \ell)\Lambda\delta(x - \ell/2), \qquad /18/$$

где $\delta(x) - \delta$ - функция Дирака, а θ - функция равна единице для тех x, которые удовлетворяют указанному в ее аргументе условию и нулю - в противном случае. Амплитуды отражения r и прохождения t одного периода равны

$$r = -e^{ik\ell}\,\Lambda/(\Lambda - 2ik); \quad t = -e^{ik\ell}\,2ik/(\Lambda - 2ik). \qquad /19/$$

Подставив /19/ в /1/-/4/, получим все результаты, встречающиеся в динамической теории брэгговской дифракции.

ЛИТЕРАТУРА

1. Shakir S.A. Amer. J.Phys., 1984, vol.52, p. 845.
2. Игнатович В.К. ОИЯИ, Р4-10778, Дубна, 1977.
3. Игнатович В.К. ОИЯИ, Р4-11135, Дубна, 1978.
4. Игнатович В.К. ОИЯИ, Р4-11937, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 февраля 1985 года.

Игнатович В.К. Р4-85-123

Рекуррентные соотношения
и одномерный периодический потенциал

Показано, как с помощью рекуррентных соотношений найти амплитуду отражения и прохождения для одномерного периодического потенциала с произвольным числом периодов, если известны амплитуды отражения и прохождения одного отдельно взятого периода.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод Т.Ф.

Ignatovich V -85-123
Recursive Me ials

In the pa ecursive
method the r a wave
incident on arbitrary
number of pe nsmission
amplitude of

The inves atory
of Theoretic

Preprint o bna 1985