

ФИЗИКА

УДК 539.1

Л. Р. Седракян

Метод погружения для задачи N -канального рассеяния

(Представлено академиком Д.М.Седракяном 4/V 2009)

Ключевые слова: метод погружения, многоканальное рассеяние

1. Введение. В [1, 2] сформулирована задача рассеяния квантовой частицы на двумерном потенциале $U(x, y)$. Показано, что уравнение Шредингера удобно представить в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi(x, y) + (\chi^2 - V(x, y))\Psi(x, y) = 0, \quad (1)$$

где

$$\frac{2M}{\hbar^2} E = \chi^2, \quad \frac{2M}{\hbar^2} U(x, y) = V(x, y). \quad (2)$$

Решение уравнения (1) с граничными условиями $V(x, 0) = V(x, a) = \infty$ ищется в виде

$$\Psi(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \Psi_n(x) \Phi_n(y), \quad (3)$$

где

$$\Phi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{\pi}{a} \cdot ny \right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Подставляя решение (3) в уравнение (1), получим систему уравнений для определения функций $\Psi_m(x)$

$$\frac{d^2 \Psi_m(x)}{dx^2} + \kappa_m^2 \Psi_m(x) - \sum_n V_{m,n} \Psi_n(x) = 0, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (5)$$

где

$$\kappa_m^2 = \chi^2 - \chi_m^2, \quad \chi_m = \frac{\pi}{a}m, \quad (6)$$

$$V_{m,n}(x) = \int_0^a \Phi_m^*(y)V(x,y)\Phi_n(y)dy, \quad m = 1, 2, \dots$$

Фактически частица в направлении y совершает колебательное движение с дискретной энергией $E_m = \frac{\hbar^2}{2m}\chi_m^2$, а в направлении x может рассеиваться на потенциалах $V_{mn}(x)$. Таким образом, в отличие от задач рассеяния в одномерном случае, двумерное рассеяние при такой постановке задачи сводится к одномерному-многоканальному рассеянию.

2. Уравнение Шредингера для многоканальной задачи рассеяния. В [2] рассмотрено рассеяние частицы на потенциале $V(x,y)$ при предположении, что начальная энергия продольного движения достаточна, чтобы возбудить квантовое состояние до $m = 2$. Обобщим полученные в этой работе результаты для случая, когда продольная энергия частицы достаточна для возбуждения квантовых состояний до $m = N$. В этом случае рассеяние будет N -канальным.

Будем также предполагать, что движение частицы по направлению y до встречи с потенциалом описывается волновой функцией $\Phi_1(y)$, а продольное движение — волновым вектором \vec{k}_1 . Отличными от нуля будут только функции $\Psi_1(x), \Psi_2(x) \dots \Psi_N(x)$, которые удовлетворяют уравнениям (5). Для нахождения решения системы уравнений (5) применим метод погружения [3,4]. Ищем их решения в виде

$$\Psi_m(x) = a_m(x)e^{ik_mx} - b_m(x)e^{-ik_mx}, \quad m = 1, 2, \dots N. \quad (7)$$

Выберем $a_m(x)$ и $b_m(x)$ так, чтобы

$$\frac{da_m}{dx} = \frac{db_m}{dx}e^{-2ik_mx}, \quad m = 1, 2, \dots N. \quad (8)$$

Тогда производная функции $\Psi_m(x)$ задается в виде

$$\frac{d\Psi_m}{dx} = ik_m[a_me^{ik_mx} + b_me^{-ik_mx}], \quad m = 1, 2, \dots N. \quad (9)$$

Такой выбор функции $a_m(x)$ и $b_m(x)$ означает, что независимо от вида потенциалов V_{mn} функции $\Psi_m(x)$ и $\frac{d\Psi_m}{dx}$ будут непрерывными функциями от x , если требовать, чтобы функции $\Psi_m(x)$ были непрерывны на заданных границах потенциалов V_{mn} . Таким образом, найденные из этого требования функции $a_m(x)$ и $b_m(x)$ обеспечивают непрерывность не только волновой функции, но и ее производной по направлению x на границах заданного потенциала.

Кроме уравнений (8) необходимо еще N уравнений для определения неизвестных функций $a_m(x)$ и $b_m(x)$. Эти уравнения получаются из уравнения Шредингера подстановкой в него (7) и (9)

$$\frac{da_m}{dx}e^{ik_mx} + \frac{db_m}{dx}e^{-ik_mx} = \sum_{n=1}^N \frac{V_{mn}}{ik_m}(a_n e^{ik_n x} - b_n e^{-ik_n x}), \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (10)$$

Как видно из системы уравнений (8) и (10), функции $a_m(x)$ и $b_m(x)$ становятся постоянными в областях, где потенциалы $V_{mn}(x) = 0$. Согласно решениям (3) и (9) в этих областях функции $\Psi_m(x)$ имеют вид свободных волн, распространяющихся в направлении $\pm x$. Соответствующие постоянные a_m и b_m , естественно, должны быть связаны с амплитудами прохождения и отражения по этим каналам рассеяния.

3. Задача Коши для N -канального рассеяния. Введем функции

$$\tilde{D}_m(z) = a_m(z) \text{ и } D_m(z) = b_m(z), \quad m = 1, 2, \quad (11)$$

от толщины потенциального слоя z . В уравнениях (8) и (10), заменяя x на z , а функции a_m и b_m согласно соотношениям (11) на $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$, получим уравнения, определяющие неизвестные функции $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{D}_m(z)}{dz} &= \sum_{n=1}^N \frac{iV_{mn}}{2k_m} e^{-i(k_m - k_n)z} \tilde{D}_n(z) - \sum_{n=1}^N \frac{iV_{mn}}{2k_m} e^{-i(k_m + k_n)z} D_n(z), \quad m = 1, 2, \dots, N, \\ \frac{dD_m(z)}{dz} &= \sum_{n=1}^N \frac{iV_{mn}}{2k_m} e^{i(k_m + k_n)z} \tilde{D}_n(z) - \sum_{n=1}^N \frac{iV_{mn}}{2k_m} e^{i(k_m - k_n)z} D_n(z), \quad m = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (12)$$

Искомые функции $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$ определенным образом связаны с амплитудами рассеяния T_m и R_m , где T_m — амплитуда прохождения и R_m — амплитуда отражения для m -го канала рассеяния. При такой формулировке задачи рассеяния она сводится к задаче Коши, так как нахождение неизвестных функций $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$ сводится к решению системы уравнений (12) с начальными условиями при $z = 0$. Начальные условия для $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$ при $z = 0$ можно определить из связей этих функций с амплитудами рассеяния T_m и R_m и условий:

$$T_1(0) = 1, \quad T_2(0) = T_3(0) = \dots = T_N(0) = R_1(0) = R_2(0) = \dots = R_N(0) = 0. \quad (13)$$

Таким образом, предложенная нами постановка задачи рассеяния является обобщением метода погружения [5,6] на случай N -канальной задачи рассеяния. Введем вместо $2N$ уравнений первого порядка (12) N уравнений второго порядка. Такое преобразование системы уравнений целесообразно, так как полученные уравнения внешне совпадают с уравнениями (5), которые

фактически получаются из уравнений Шредингера в случае N -канального рассеяния. Введем обозначение

$$L_m(z) = \tilde{D}_m(z)e^{ik_m z} - D_m(z)e^{-ik_m z}, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (14)$$

Используя уравнения (12), можно получить следующую систему уравнений для функций $L_m(z)$:

$$\frac{d^2 L_m(z)}{dz^2} + k_m^2 L_m(z) - \sum_{n=1}^N V_{mn} L_n = 0, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (15)$$

Учитывая уравнения (8) и (11), первые производные функций $L_m(z)$ имеют следующий вид:

$$\frac{dL_m(z)}{dz} = ik_m [\tilde{D}_m(z)e^{ik_m z} + D_m(z)e^{-ik_m z}], \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (16)$$

Если ввести обозначения

$$Q_m(z) = \tilde{D}_m(z)e^{ik_m z} + D_m(z)e^{-ik_m z}, \quad m = 1, 2, \dots, N, \quad (17)$$

то вместо уравнения (16) можно написать

$$\frac{dL_m(z)}{dz} = ik_m Q_m(z), \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (18)$$

Таким образом, сначала находим функции $L_m(z)$ и $Q_m(z)$ и далее согласно (14) и (17) восстанавливаем функции $\tilde{D}_m(z)$ и $D_m(z)$, $m = 1, 2, \dots, N$. А для нахождения $L_m(z)$ нужно решить систему уравнений (15) с заданными начальными условиями (13) и далее определить $Q_m(z)$ по формулам (18).

4. Связь между амплитудами рассеяния T_m и R_m и функциями \tilde{D}_m и D_m . Рассмотрим систему уравнений (15). Умножим первое из них на $L_1^*(z)$, второе на $L_2^*(z)$, ... N -е на $L_N^*(z)$ и сложим. Напишем также комплекс сопряженных уравнений (15), умножим их соответственно на функции $L_1(z), L_2(z), \dots, L_N(z)$ и сложим. Разность этих двух уравнений даст

$$\sum_{m=1}^N \left(L_m^* \frac{d^2 L_m}{dz^2} - L_m \frac{d^2 L_m^*}{dz^2} \right) = 0. \quad (19)$$

Интегрируя уравнение (19) и используя соотношения (18), получим

$$(L_1 Q_1^* + L_1^* Q_1) + \sum_{m=2}^N \frac{k_m}{k_1} (L_m^* Q_m + Q_m^* L_m) = \text{const}. \quad (20)$$

Используя уравнения (14) и (17), можно из уравнения (20) исключить функции L_m и Q_m и вместо них ввести функции \tilde{D}_m и D_m . Тогда получим

$$|D_1|^2 - |\tilde{D}_1|^2 + \sum_{m=2}^N \frac{k_m}{k_1} (|D_m|^2 - |\tilde{D}_m|^2) = 1. \quad (21)$$

Постоянную, входящую в уравнение (20), мы выбрали так, чтобы обеспечить удовлетворение начальных условий (13). Частица с волновым вектором \vec{k}_1 падает на потенциальный барьер и рассеивается с волновым вектором \vec{k}_m , $m = 1, 2, \dots, N$, амплитуды прохождения и отражения которых обозначим соответственно через T_m и R_m . Полную вероятность прохождения частицы $|T|^2$ запишем в следующем виде:

$$|T|^2 = \sum_{m=1}^N |T_m|^2. \quad (22)$$

Теперь перейдем к нахождению связей между амплитудами прохождения и отражения T_m и R_m и функциями $D_m(z)$ и $\tilde{D}_m(z)$. Эти связи должны быть такими, чтобы удовлетворялись следующие требования:

1. При отсутствии всех каналов рассеяния кроме первого $T_2 = T_3 = \dots = T_N = R_2 = R_3 = \dots = R_N = 0$, реализуется рассеяние, характерное для одномерной задачи рассеяния. Тогда $T_1 = T$ и отличные от нуля функции \tilde{D}_1 и D_1 связаны с T_1 и R_1 следующими формулами [6]:

$$D_1 = \frac{1}{T_1}, \quad \tilde{D}_1 = \frac{R_1^*}{T_1^*}. \quad (23)$$

2. При отсутствии рассеяния по отдельным каналам должны выполняться условия $D_m = \tilde{D}_m = 0$ при $T_m = R_m = 0$ при $m = 1, 2, \dots, N$.

3. В общем случае, когда T_1, T_2, \dots, T_N и R_1, R_2, \dots, R_N отличны от нуля, условие (21) должно переходить в условие непрерывности для задачи N -канального рассеяния

$$\sum_{m=1}^N |T_m|^2 + \sum_{m=1}^N |R_m|^2 = 1. \quad (24)$$

С учетом вышеуказанных условий связи между амплитудами рассеяния $T_1, T_2, \dots, T_N, R_1, R_2, \dots, R_N$ с величинами $D_1, D_2, \dots, D_N, \tilde{D}_1, \tilde{D}_2, \dots, \tilde{D}_N$ однозначно задаются в следующем виде:

$$D_m = \sqrt{\frac{k_1}{k_m}} \frac{1}{T_m} \left| \frac{T_m}{T} \right|^2, \quad \tilde{D}_m = \sqrt{\frac{k_1}{k_m}} \frac{R_m^*}{T_m^*} \left| \frac{T_m}{T} \right|, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (25)$$

Эти формулы определяют амплитуды рассеяния T_m и R_m через искомые функции D_m и \tilde{D}_m с точностью постоянного фазового множителя, который должен зависеть от координаты z_0 центра локального потенциала. Следовательно, амплитуды рассеяния можно искать в виде:

$$T_1 = \frac{D_1^*}{|D|^2}, \quad R_1 = \frac{(\tilde{D}_1 D_1)^*}{|D_1| |D|}, \quad (26)$$

$$T_m = \sqrt{\frac{k_m}{k_1}} \frac{D_1^*}{|D|^2} e^{i\varphi}, \quad R_m = \sqrt{\frac{k_m}{k_1}} \frac{(\tilde{D}_m D_m)^*}{|D_m| |D|} e^{i\tilde{\varphi}}, \quad m = 2, 3, \dots, N,$$

где

$$|D|^2 = |D_1|^2 + \sum_{m=2}^N \frac{k_m}{k_1} |D_m|^2. \quad (27)$$

Здесь T_1 и R_1 не имеют добавочного фазового множителя, так как при $T_m = R_m = 0$ $m = 2, 3, \dots, N$ они переходят в амплитуды одномерного рассеяния. В этом случае, как известно, T_1 не будет зависеть от z_0 , а R_1 будет пропорционально $\exp(2ik_1z_0)$: φ и $\tilde{\varphi}$ должны быть выбраны так, чтобы зависящие от z_0 фазы перед T_m и R_m , $m = 2, 3, \dots, N$, равнялись $(k_1 - k_m)z_0$ и $(k_1 + k_m)z_0$ соответственно. Интересно отметить, что добавочная фаза произведения $R_m \cdot T_m$ не зависит от канала рассеяния и равняется $2k_1z_0$.

В заключение отметим, что для нахождения амплитуд рассеяния по N каналам вначале нужно интегрировать систему уравнений (15) и найти функции $L_1(z), L_2(z), \dots, L_N(z)$. Постоянные интегрирования определяются из начальных условий (13), которые совместно с уравнениями (14), (17), (18) и (25) определяют $L_m(z)$ и $\frac{dL_m(z)}{dz}$ для $m = 1, 2, \dots, N$ в точке $z = 0$. Зная значение функции $L_m(z)$ при $z = d$, где z — координата конца потенциала, из уравнений (18) можно определить $Q_m(d)$ и далее, используя (14) и (17), определить $D_m(d)$ и $\tilde{D}_m(d)$. Наконец, формулы (26) определяют амплитуды прохождения T_m и отражения R_m через найденные значения функций $D_m(d)$ и $\tilde{D}_m(d)$.

Российско-Армянский (Славянский) государственный университет

Л. Р. Седракян

Метод погружения для задачи N -канального рассеяния

Предложен и применен метод погружения для решения задачи многоканального рассеяния. В частности, рассмотрено рассеяние частицы на заданном потенциале, когда в поперечном направлении рассеивающаяся частица совершает финитное движение. При такой постановке задачи рассеяние становится многоканальным, что связано с наличием дискретных состояний поперечного движения частицы. Для случая N -канального рассеяния постановка задачи доведена до конца. Предложен метод определения амплитуд рассеяния при заданном виде потенциала рассеяния $V = V(x, y)$.

Լ. Ռ. Սեդրակյան

Ընկղմման մեթոդը բազմուղի ցրման խնդրի համար

Առաջարկված է նոր մեթոդ բազմականալ ցրման խնդրի լուծման համար: Մասնավորապես դիտարկված է այնպիսի ցրում, որի դեպքում մասնիկը լայնական ցրման ուղղությամբ կարարում է վերջավոր շարժում: Այս դեպքում ցրումը բազմուղի է, ինչը պայմանավորված է մասնիկի լայնական շարժման դիսկրետ վիճակներով: Բազմուղի ցրման դեպքում խնդրի դրվածքը հասցված է մինչև վերջ: Առաջարկված է մեթոդ ցրման ամպլիտուդների որոշման համար:

L. R. Sedrakian

Immersing Method for Multichannel Scattering Problem

We propose a method for solution of the multichannel scattering problem. In particular, scattering problem is considered for the case when in the cross-section direction a scattering particle makes a finite motion. In this case scattering becomes multichannel, which is connected with the presence of discrete energetic levels of the cross-section movement of the particle. For the case of N -channel scattering, the problem is formulated up to the end. We propose a method for determination of scattering amplitudes for the potential $V = V(x, y)$.

Литература

1. *Boese D., Lischka M., Reichl L.E.* - Phys. Rev. B. 2000. V. 82. P. 16933.
2. *Սեդրակյան Ժ.Մ., Կազարյան Է.Մ., Սեդրակյան Լ.Ր.* - Изв. НАН Армении. Физика. 2009. Т. 44. №6. С. 395-404.
3. *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М. Наука. 1976.
4. *Սեդրակյան Ժ.Մ., Խաչատրյան Ա.Ջ.* - Изв. НАН Армении. Физика. 1999. Т. 34. №3. С. 138-144.
5. *Սեդրակյան Ժ.Մ., Խաչատրյան Ա.Ջ., Կազարյան Է.Մ., Սեդրակյան Լ.Ր.* - Изв. НАН Армении. Физика. 2009. Т. 44. №3. С. 167-175.
6. *Խաչատրյան Ա.Ջ., Սեդրակյան Ժ.Մ., Խոջյան Վ.Ա.* - Изв. НАН Армении. Физика. 2009. Т. 44. №2. С. 133-143.