

В. К. Игнатович

Объединенный институт ядерных исследований
г. Дубна Московской обл., 141980, Россия

ОДНОМЕРНЫЙ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ *

На примере простейших задач квантовой механики одномерных систем демонстрируется изящный математический метод, который применяется для расчета рассеяния на одномерном периодическом потенциале. Указываются обобщения метода для исследования рассеяния спиновых частиц в трехмерных средах.

Ключевые слова: квантовая механика, нейтронная оптика, слоистые среды, суперзеркала, периодические системы.

Введение

Основой квантовой механики является уравнение Шредингера, и мы рассмотрим три простейшие задачи, решаемые с помощью одномерного стационарного уравнения Шредингера. Это задача об отражении от потенциальной ступеньки, рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере и рассеяние на произвольном периодическом потенциале. Первые две задачи приводятся во всех курсах квантовой механики, и наша цель здесь только напомнить о них и продемонстрировать метод, который позволяет решить задачу о рассеянии на прямоугольном барьере значительно проще, чем обычно. Метод оказался исключительно плодотворным и позволил совершить поистине революционный прорыв в исследовании именно третьей задачи, которая тоже излагается повсеместно, но с помощью метода Фурье-анализа, который имеет уже вековую историю, и за это время почти не менялся. Думается, что изложенный здесь метод будет оценен по достоинству и взят на вооружение всеми, кто преподает квантовую механику.

Сначала, однако, уточним, с каким уравнением мы будем иметь дело. Самое общее уравнение Шредингера для волновой функции нейтрона $\Psi(\mathbf{r}, t)$, зависящей и от координат \mathbf{r} и от времени t , имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где m – масса нейтрона, а $U(\mathbf{r}, t)$ – потенциальная энергия взаимодействия нейтрона с окружающими объектами.

Если потенциал $U(\mathbf{r}, t)$ не зависит от времени t (а мы большей частью будем рассматривать именно такие задачи), то решение уравнения можно искать в стационарном виде $\Psi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$. Подстановка такой волновой функции в уравнение Шредингера приводит его к стационарному уравнению для $\Phi(\mathbf{r})$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) - E \right] \Phi(\mathbf{r}) = 0.$$

Разделим уравнение на множитель $\hbar^2/2m$ и введем обозначения: $2mE/\hbar^2 = k^2$, $2mU(\mathbf{r})/\hbar^2 = u(\mathbf{r})$. В результате уравнение приведет к более простому виду

$$\left[\Delta - u(\mathbf{r}) + k^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = 0, \quad (2)$$

из которого удалены все несущественные множители. Заметим, что потенциальная энергия $u(r)$ теперь имеет размерность см^{-2} , а энергия E представлена квадратом волнового вектора $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

* Автор благодарен Б. А. Князеву за предложение направить статью в «Вестник НГУ».

Если потенциальная энергия зависит только от одной координаты: $u(\mathbf{r}) = u(x)$, то решение стационарного уравнения можно искать в виде $\Phi(\mathbf{r}) = \exp(ik_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})\psi(x)$, где вектор \mathbf{r}_{\parallel} описывает координаты в плоскости (y, z) , а волновой вектор \mathbf{k}_{\parallel} параллелен этой плоскости. Подстановка такой функции $\Phi(\mathbf{r})$ в стационарное трехмерное уравнение Шредингера приводит его к одномерному виду

$$\left[d^2/dx^2 - u(x) + k_{\perp}^2 \right] \psi(x) = 0,$$

где $k_{\perp}^2 = k^2 - k_{\parallel}^2$ характеризует энергию движения нейтрона перпендикулярно плоскости (y, z) , т. е. параллельно оси x .

Именно таким уравнением мы и будем пользоваться, а значок \perp у k_{\perp} будем опускать. Таким образом, окончательно, нашим основным будет уравнение Шредингера в виде

$$\left[d^2/dx^2 - u(x) + k^2 \right] \psi(x) = 0, \quad (3)$$

и рассматриваемые задачи будут различаться только видом потенциала $u(x)$.

Отражение и преломление на потенциальной ступеньке

Рассмотрим отражение от бесконечно толстой плоской стенки, внутренняя нормаль к которой направлена по оси x , и взаимодействие с нейтроном описывается потенциалом u_0 , не зависящим от x . Такая стенка представляется потенциальной ступенькой, показанной на рис. 1. Чтобы найти отражение от нее для падающей слева плоской волны $\exp(ikx)$, нужно решить уравнение Шредингера

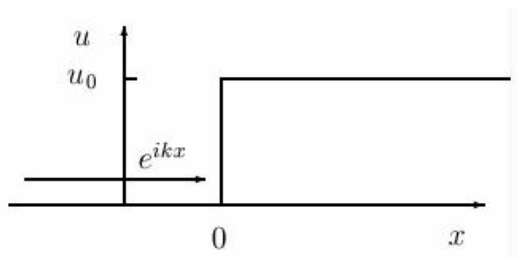


Рис. 1. Потенциальная ступенька высоты u_0 в точке $x = 0$

$$\left[d^2/dx^2 - u_0 \Theta(x \geq 0) + k^2 \right] \psi(x) = 0. \quad (4)$$

Здесь введена ступенчатая Θ -функция, которая равна единице, когда неравенство в ее аргументе выполнено, и нулю – в противном случае.

Слева от барьера ($x \leq 0$) решение будем искать в виде $e^{ikx} + \bar{r}_0 e^{-ikx}$, содержащем свободные падающую и отраженную плоские волны с неизвестной пока амплитудой отражения \bar{r}_0 . Справа от ступеньки ($x \geq 0$) решение будем искать тоже в виде плоской волны $\bar{t}_0 e^{ik'x}$, где \bar{t}_0 – амплитуда пропускания (преломления) ступеньки, а k' – волновое число внутри потенциала. Подстановка преломленной волны в (4) приводит к уравнению

$$-k'^2 - u_0 + k^2 = 0,$$

которое определяет волновое число k' внутри среды: $k' = \sqrt{k^2 - u_0}$. Полное решение уравнения (4) можно представить в виде

$$\bar{\psi}(x) = \Theta(x \leq 0) \left[e^{ikx} + \bar{r}_0 e^{-ikx} \right] + \Theta(x \geq 0) \bar{t}_0 e^{ik'x}, \quad (5)$$

где Θ -функция была введена ранее в уравнении (4), и стрелка \rightarrow над r и t показывает, что первичная волна падает на ступеньку слева. Если бы волна падала справа, изнутри вещества, то решение следовало бы искать в виде

$$\bar{\psi}(x) = \Theta(x \leq 0) \bar{t}_0 e^{-ikx} + \Theta(x \geq 0) \left[e^{-ik'x} + \bar{r}_0 e^{ik'x} \right]. \quad (6)$$

Чтобы найти неизвестные коэффициенты в решении (5) необходимо сшить волновую функцию в точке $x = 0$, т. е. добиться непрерывности и функции и ее первой производной. Эти требования приводят к уравнениям

$$\begin{aligned} 1 + \bar{r}_0 &= \bar{t}_0, \\ k[1 - \bar{r}_0] &= k' \bar{t}_0. \end{aligned} \quad (7)$$

Решение этих уравнений:

$$\begin{aligned} \bar{r}_0 &= \frac{k - k'}{k + k'}, \\ \bar{t}_0 &= \frac{2k}{k + k'}. \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогичную процедуру сшивания можно проделать с решением (6), однако если воспользоваться соображениями симметрии, то можно сразу же написать результат:

$$\begin{aligned} \bar{r}_0 &= \frac{k' - k}{k' + k} = -r_0, \\ \bar{t}_0 &= \frac{2k'}{k' + k}. \end{aligned} \quad (9)$$

Любопытно, что формулы (8), (9) очень похожи на те, что встречаются в механике столкновения двух частиц. Если частица массы m налетает со скоростью v на покоящуюся частицу с массой m' , то скорости v_1 и v_2 первой и второй частиц после упругого соударения равны

$$\begin{aligned} \frac{v_1}{v} &= \frac{m - m'}{m + m'}, \\ \frac{v_2}{v} &= \frac{2m}{m + m'}. \end{aligned} \quad (10)$$

Отметим, что задача об отражении от одномерной потенциальной ступеньки имеет прикладное значение. Она используется при описании отражения нейтрона от вещества, поскольку взаимодействие нейтрона с веществом как раз и характеризуется оптическим потенциалом высотой $U \approx 10^{-7}$ эВ. Вспомним, что k во всех наших выражениях на самом деле обозначает нормальную компоненту k_{\perp} полного волнового вектора \mathbf{k} падающего нейтрона. Условие $k_{\perp}^2 < u_0$ означает полное зеркальное отражение нейтрона от стенки. Если же удовлетворяется условие $|\mathbf{k}|^2 < u_0$, то нейтрон полностью отражается от стенки при любых углах падения. Нейтроны с энергией $k^2 < u_0$ можно хранить в замкнутых сосудах, и их называют ультрахолодными (УХН) [1].

При полном отражении ($k^2 < u_0$) волновой вектор k' внутри среды оказывается мнимым: $k' = ik''$, где $k'' = \sqrt{u_0 - k^2}$, а амплитуда отражения – единичным комплексным числом

$$\begin{aligned} \bar{r}_0 &= \frac{k - ik''}{k + ik''} = \exp(-2i\gamma_0), \\ \gamma_0 &= \operatorname{arctg}\left(\frac{k''}{k}\right) = \operatorname{arccos}\left(\frac{k}{\sqrt{u_0}}\right). \end{aligned} \quad (11)$$

Это и означает, что при $k^2 < u_0$ коэффициент отражения $|\bar{r}_0|^2$ равен единице, т. е. имеет место полное отражение.

Рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере

Рассмотрим теперь отражение и пропускание потенциального барьера, показанного на рис. 2. Обычно для вычисления амплитуд отражения r и пропускания t решается уравнение Шредингера с потенциалом $u_0\Theta(0 \leq x \leq d)$, и решение ищется в виде

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \Theta(x \leq 0) \left[e^{ikx} + r e^{-ikx} \right] + \\ &+ \Theta(0 \leq x \leq d) \left[A e^{ik'x} + B e^{-ik'x} \right] + \\ &+ \Theta(x \geq d) t e^{ik(x-d)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Заметим, что волновую функцию справа от барьера мы представили в виде $t \exp(ik(x-d))$, а не как обычно $t_{\text{usual}} \exp(ikx)$. Это, однако, не принципиально. Фактически мы переопределили амплитуду пропускания, выделив из нее фазовый множитель: $t \exp(-ikd) = t_{\text{usual}}$.

Сшивание функции (12) в точках $x = 0$ и $x = d$ дает систему четырех уравнений с четырьмя неизвестными r , A , B и t :

$$\begin{aligned} 1 + r &= A + B, \\ k(1 - r) &= k'(A - B), \\ A e^{ik'd} + B e^{-ik'd} &= t, \\ k' (A e^{ik'd} - B e^{-ik'd}) &= kt, \end{aligned} \quad (13)$$

решение которой (довольно скучная процедура) и дает искомые амплитуды. Однако найти все неизвестные можно и несколько иначе.

Обозначим через X волну, падающую на правый скачок. Если бы мы знали X , то можно было бы сразу вычислить амплитуды t и r :

$$\begin{aligned} t &= \bar{t}_d X, \\ r &= r_0 + \bar{t}_0 \exp(ik'd) \bar{r}_d X, \end{aligned} \quad (14)$$

где $\bar{t}_d = \bar{t}_0$. Первое выражение вполне очевидно, а второе представляет собой сумму двух волн: одна, r_0 , представляет отражение от потенциального скачка в точке $x = 0$, а вторая – порождена волной X , которая, отразившись от края потенциала $x = d$, воз-

вращается к левому краю $x = 0$ и через него выходит наружу.

Все что нам нужно, это найти X , но для него можно сразу записать самосогласованное уравнение

$$X = \exp(ik'd)\vec{t}_0 + \exp(ik'd)\vec{r}_0 \exp(ik'd)\vec{r}_d X. \quad (15)$$

Здесь первое слагаемое справа соответствует первичной падающей волне, которая вошла внутрь барьера и добежала до правого его края. Второе слагаемое соответствует волне X , которая, отразившись от правого края, добежала до левого, отразилась здесь и вернулась к правому краю. Две волны, представленные в правой части (15), складываются у правого края в некую результирующую волну. Но мы обозначили волну, падающую на правый край, через X , поэтому сумму в правой части (15) мы должны приравнять к X . В результате получилось уравнение (15), решение которого находится моментально:

$$X = \frac{\vec{t}_0 \exp(ik'd)}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}. \quad (16)$$

Подстановка (16) в (14) дает

$$r = r_0 \frac{1 - \exp(2ik'd)}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}, \quad (17)$$

$$t = e^{ik'd} \frac{1 - r_0^2}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}.$$

Выражения (17) обнаруживают интересную симметрию: амплитуда r переходит в t при перестановке r_0 и $\exp(ik'd)$.

Отметим, что когда $u_0 = 0$, т. е. барьер фактически отсутствует, амплитуда пропускания оказывается равной $\exp(ikd)$, что и естественно, поскольку пропускание пустого промежутка приводит лишь к изменению фазы волны.

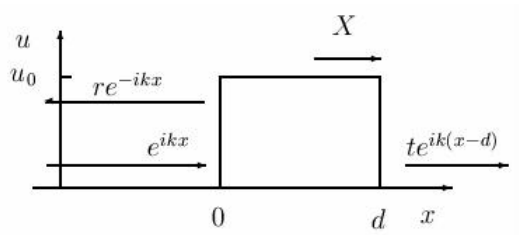


Рис. 2. Прямоугольный потенциальный барьер высоты u_0 и ширины d

Зная X , можно сразу записать волновую функцию внутри барьера:

$$\psi(0 < x < d) = [\exp(ik'(x-d)) + \exp(-ik'(x-d))\vec{r}_d]X. \quad (18)$$

Действительно, волна, бегущая направо, $X \exp(ik'(x-d))$, должна у края барьера быть равной X . Волна же, бегущая налево, $\vec{r}_d X \exp(-ik'(x-d))$, получается в результате отражения волны X от края барьера изнутри. Подстановка (16) дает

$$\psi(0 < x < d) = \frac{\vec{t}_0}{1 - r_0^2 \exp(2ikd)} \times [\exp(ik'x) - r_0 e^{2ikd} \exp(-ik'x)]. \quad (19)$$

Обратим внимание на знаменатель в первом множителе. Если $|r_0| - 1 \ll 1$, то знаменатель при некоторых значениях kd может оказаться малым, и тогда амплитуда волновой функции внутри потенциала сильно возрастает. Это называется резонансом.

Мы продемонстрировали метод X -волны, который и будет применяться к периодическому потенциалу, но предварительно рассмотрим систему из двух произвольных полупрозрачных зеркал.

Алгебра рассеяния на полупрозрачных зеркалах

Рассмотрим два произвольных полупрозрачных зеркала (1 и 2), разнесенных на расстояние l . Каждое из зеркал описывается некоторым потенциалом u_i ($i = 1, 2$), как показано на рис. 3. Рассеяние на каждом потенциале по отдельности характеризуется амплитудой отражения r_i и пропускания t_i ($i = 1, 2$). Требуется найти амплитуды совместного отражения R_{12} и пропускания T_{12} обоих зеркал.

Будем решать эту задачу так же, как в случае прямоугольного барьера. Слева на первое зеркало падает плоская волна $\exp(ikx)$. На поверхности первого зеркала она равна единице. Обозначим через X волну, падающую на второе зеркало. Для X можно составить уравнение, аналогичное (15):

$$X = \exp(ikl)t_1 + \exp(ikl)r_1 \exp(ikl)r_2 X, \quad (20)$$

из которого следует

$$X = \frac{t_1 \exp(ikl)}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \quad (21)$$

Амплитуды отражения и пропускания всей системы теперь легко выражаются через X :

$$\begin{aligned} R_{12} &= r_1 + t_1 \exp(ikl) r_2 X, \\ T_{12} &= t_2 X. \end{aligned} \quad (22)$$

Подстановка вместо X его выражения (21) приводит к формулам

$$\begin{aligned} R_{12} &= r_1 + t_1^2 \frac{\exp(2ikl) r_2}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}, \\ T_{12} &= \frac{t_2 \exp(ikl) t_1}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \end{aligned} \quad (23)$$

Очевидно, что расстояние l между зеркалами может быть произвольным. В частности, оно может быть равным нулю. Тогда уравнения (20), (22) приводятся к виду

$$\begin{aligned} X &= t_1 + r_1 r_2 X, \\ R_{12} &= r_1 + t_1 r_2 X, \\ T_{12} &= t_2 X, \end{aligned} \quad (24)$$

и амплитуды отражения и пропускания суммарного потенциала выражаются через амплитуды отражения и пропускания отдельных частей простыми формулами

$$\begin{aligned} R_{12} &= r_1 + t_1^2 \frac{r_2}{1 - r_1 r_2}, \\ T_{12} &= \frac{t_2 t_1}{1 - r_1 r_2}, \end{aligned} \quad (25)$$

которые получаются из (23) подстановкой $l = 0$.

Мы сделали простейший шаг, но он привел нас к открытию. Нами обнаружено, что любой потенциал можно мысленно разделить в любом месте на две части и выразить амплитуды отражения и пропускания всего потенциала через амплитуды его частей. Правда, выше мы молчаливо предполагали зеркала (и соответственно их потенциалы) симметричными. В общем же случае и сам потенциал, и его части, как показано на рис. 4, могут быть несимметричны. Для несимметричных потенциалов амплитуды отражения r_i и t_i слева и справа различны, и формулы (25) должны быть переписаны следующим образом:

$$\begin{aligned} \bar{R}_{12} &= \bar{r}_1 + \bar{t}_1 \frac{\bar{r}_2}{1 - \bar{r}_1 \bar{r}_2} \bar{t}_1, \\ \bar{R}_{21} &= \bar{r}_2 + \bar{t}_2 \frac{\bar{r}_1}{1 - \bar{r}_1 \bar{r}_2} \bar{t}_2, \end{aligned} \quad (26)$$

и

$$\begin{aligned} \bar{T}_{12} &= \frac{\bar{t}_2 \bar{t}_1}{1 - \bar{r}_1 \bar{r}_2}, \\ \bar{T}_{21} &= \frac{\bar{t}_1 \bar{t}_2}{1 - \bar{r}_1 \bar{r}_2}, \end{aligned} \quad (27)$$

где стрелка указывает направление волны, падающей на соответствующий потенциал.

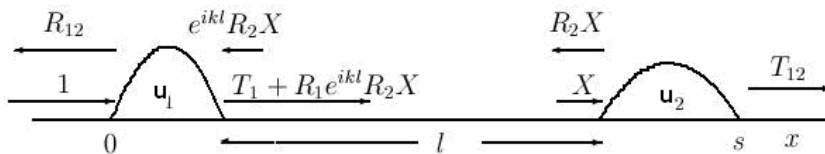


Рис. 3. Два полупрозрачных зеркала представлены двумя одномерными потенциалами, разделенными расстоянием l

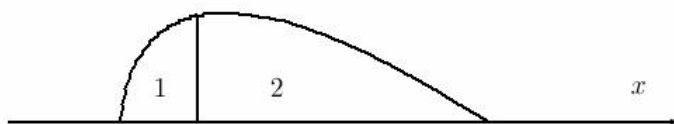


Рис. 4. Любой потенциал в произвольном месте может быть разделен на две части. Амплитуды отражения и пропускания всего потенциала выражаются через соответствующие амплитуды его частей формулами (26), (27)

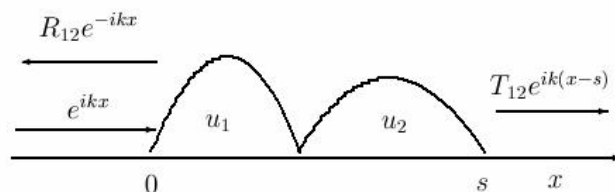


Рис. 5. Несимметричный потенциал, образованный двумя симметричными

Свойства амплитуд отражения и пропускания одномерных потенциалов

Несимметричные потенциалы. Посмотрим, чем отличаются амплитуды справа и слева для произвольного несимметричного потенциала. Для этого достаточно рассмотреть один какой-нибудь несимметричный потенциал. Самым простым является потенциал, состоящий из двух симметричных, как показано на рис. 5.

Пропускание и отражение совместного потенциала даются формулами (25). Из них сразу видно, что $T_{12} = T_{21}$, а значит, и вообще

$$\bar{t} = \bar{t} \quad (28)$$

для любого потенциала. Что же касается отражения, то $R_{12} \neq R_{21}$, а значит, и вообще, $\bar{r} \neq \bar{r}$. Таким образом, формулы (26), (27) представляются в виде

$$\begin{aligned} \bar{R}_{12} &= \bar{r}_1 + \frac{t_1^2 \bar{r}_2}{1 - r_1 r_2}, \\ \bar{R}_{21} &= \bar{r}_2 + \frac{t_2^2 \bar{r}_1}{1 - r_1 r_2}, \\ T_{12} &= \frac{t_2 t_1}{1 - r_1 r_2} = T_{21}. \end{aligned} \quad (29)$$

Совершенно ясно, что амплитуды \bar{r} и \bar{r} могут различаться только фазовым множителем, т. е.

$$\bar{r} = \exp(i\chi) \bar{r}, \quad (30)$$

где χ – вещественное число.

Действительно, исходя из соображений унитарности (т. е. число отраженных и прошедших частиц должно равняться числу падающих), мы имеем

$$|\bar{r}|^2 + |\bar{t}|^2 = |\bar{r}|^2 + |\bar{t}|^2 = 1. \quad (31)$$

Но отсюда, в силу (28), немедленно следует $|\bar{r}| = |\bar{r}|$, а значит, различаться эти амплитуды могут только фазовым множителем, как указано в (30). Естественно, что симметричный потенциал есть частный случай несимметричного, для которого $\chi = 0$.

Требуется, однако, отметить, что (31) справедливо только при отсутствии потерь в потенциалах, т. е. когда потенциалы u вещественны. Если мнимая часть потенциала отлична от нуля, то отлична от нуля и мнимая часть фазы. При этом становятся отличными друг от друга абсолютные значения амплитуд отражения слева и справа, а значит, и коэффициенты отражения слева и справа. Коэффициенты же пропускания остаются одинаковыми и при наличии потерь.

Соотношение между фазами r и t . Сейчас мы покажем, что в случае действительных симметричных потенциалов фазы амплитуд отражения и пропускания различаются на $\pi/2$. Чтобы доказать это, рассмотрим мысленный эксперимент, схема которого показана на рис. 6.

Используем произвольный симметричный потенциал в качестве полупрозрачного зеркала M1. Падающий пучок расщепляется на нем, и обе компоненты расщепленного пучка после полного отражения от двух

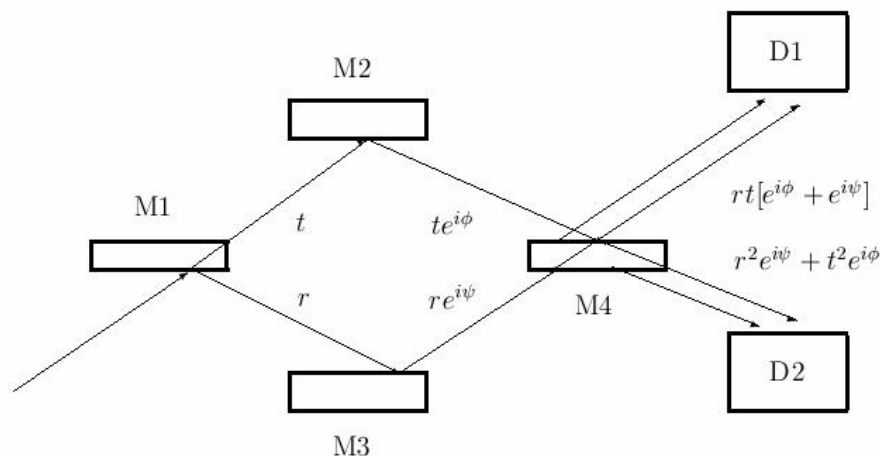


Рис. 6. Схема мысленного эксперимента для определения соотношения между фазами r и t . Полупрозрачные зеркала M1 и M4 – тождественны. Зеркала M2 и M3 отражают полностью, но, вообще говоря, с различными фазами. Фазы, набегающие при распространении по двум различным путям от зеркала M1 к зеркалу M4, обозначены ϕ и ψ . Суммарный счет двух детекторов D1 и D2 на выходе должен быть равен количеству падающих нейтронов

других, вообще говоря, не обязательно тождественных, зеркал М2 и М3 сводятся вместе на полупрозрачном зеркале М4, тождественном М1. Сохранение числа частиц требует, чтобы суммарный счет двух детекторов после зеркала М4 равнялся количеству падающих. Это значит, что

$$|rt|^2 |e^{i\phi} + e^{i\psi}|^2 + |r^2 e^{i\phi} + t^2 e^{i\psi}|^2 = 1. \quad (32)$$

Если представить $r = |r| \exp(i\chi_r)$ и $t = |t| \exp(i\chi_t)$, и для простоты принять, что $\phi = \psi = 0$, то это соотношение преобразуется к виду

$$(|r|^2 + |t|^2)^2 + 2|rt|^2 [1 + \cos(2\chi_r - 2\chi_t)] = 1. \quad (33)$$

Поскольку при отсутствии потерь первое слагаемое равно единице, то второе должно равняться нулю. Отсюда следует, что

$$2\chi_r - 2\chi_t = \pm\pi, \quad (34)$$

и $\chi_r = \chi_t \pm \pi/2$, что и требовалось доказать. Желаящие могут легко проверить, что результат будет тот же и при произвольных фазах ϕ и ψ .

Теперь ясно, что если представить $t = |t| e^{i\phi}$, то автоматически будет $r = \pm i |r| e^{i\phi}$, и потому комбинации $t \pm r$ представляют собой единичные комплексные числа $\exp(i\xi_{\pm})$, где $\xi_{\pm} = \phi \pm \arcsin(|r|)$, а $t^2 - r^2 = \exp(2i\phi)$. Соответственно выражение (25) для амплитуды отражения от двух симметричных потенциалов может быть представлено в виде

$$\begin{aligned} R_{12} &= \frac{r_1 + (t_1^2 - r_1^2)r_2}{1 - r_1 r_2} = \\ &= \frac{r_1 + \exp(2i\phi_{r1})r_2}{1 - r_1 r_2} = \\ &= \frac{r_1 - \exp(2i\phi_{r1})r_2}{1 - r_1 r_2}, \end{aligned} \quad (35)$$

где $\phi_{r1, t1}$ – фазы амплитуд отражения r_1 и пропускания t_1 соответственно.

Отсюда сразу же видно, что если один из потенциалов отражает полностью, т. е. $r_j = \exp(i\chi_j)$, где $j = 1$ или 2 , то и составной потенциал будет отражать полностью.

Вышеприведенное соотношение (34) для фаз легко обобщается на случай несимметричного потенциала. Если представить $\bar{r} = |\bar{r}| \exp(i\bar{\chi}_r)$ и $\bar{t} = |\bar{t}| \exp(i\bar{\chi}_t)$, то вместо (34) получим

$$\frac{1}{2}(\bar{\chi}_r + \bar{\chi}_t) = \chi_t \pm \frac{\pi}{2}. \quad (36)$$

Два знака – это некоторая неопределенность. К сожалению, разрешить эту неопределенность и найти критерии для выбора знака мы пока не можем.

Периодические системы

Теперь можно приступить к периодическому потенциалу с N периодами произвольного вида. Наша задача найти амплитуды отражения R_N и пропускания T_N этой системы. Оказывается, что такую задачу наиболее просто решить, если сначала рассмотреть полубесконечный потенциал, $N \rightarrow \infty$, показанный на рис. 7, и найти для него амплитуду отражения R_{∞} . Для простоты рассмотрим только потенциал с симметричным периодом. Обобщение на несимметричный – просто, и каждый желающий сможет это сделать самостоятельно.

Обратим внимание, что внутри периодического потенциала, как показано на рис. 7, существует волна, аналогичная плоской волне внутри потенциальной ступеньки. Волновой вектор q , называемый блоховским, аналогичен волновому вектору k' внутри ступеньки, но в отличие от постоянной ступеньки волна содержит множитель $\phi(x)$, который периодичен с тем же периодом, что и сам потенциал.

На рис. 7 изображены волна, падающая на первый период, волна отраженная от всего потенциала (ее амплитуда равна R), и

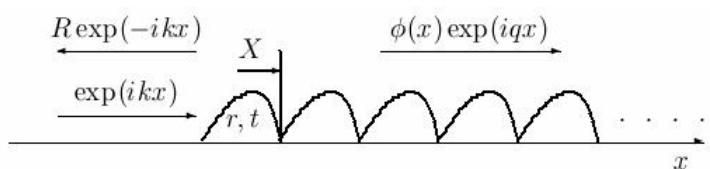


Рис. 7. Полубесконечная периодическая система

внутренняя волна. Чтобы найти R , мысленно отделяем один период от всего остального потенциала и обозначаем волну, падающую на второй период, через X . При этом полагаем, что амплитуды отражения (r) и пропускания (t) одного, отдельно взятого (симметричного), периода нам известны. По аналогии с (24) мы можем сразу написать систему уравнений для X и R :

$$\begin{aligned} X &= t + rRX, \\ R &= r + tRX, \end{aligned} \quad (37)$$

где учтено, что полубесконечный потенциал не меняется при удалении у него одного периода. Получилась простая и симметричная система уравнений. Второе уравнение переходит в первое при перестановке r и t .

Решим эту систему. Для этого выразим X из первого уравнения и подставим во второе. В результате получим уравнение

$$R = r + \frac{t^2 R}{1 - rR}, \quad (38)$$

которое приводится к квадратному уравнению вида $y^2 - 2py + 1 = 0$, где $y = R$ и $p = (r^2 + 1 - t^2)/2r$. Решение уравнения тривиально: $y = p - \sqrt{p^2 - 1}$, но его можно также представить в виде

$$y = \frac{\sqrt{p+1} - \sqrt{p-1}}{\sqrt{p+1} + \sqrt{p-1}}, \quad (39)$$

из которого тотчас же следует

$$R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}. \quad (40)$$

Легко запомнить эту формулу и проверить ее. Вот две проверки.

1. Мы можем представить себе, что никакого потенциала нет, но пустое пространство всегда можно мыслить себе периодическим. В этом случае $r = 0$, период ничего не отражает, но, значит, и вся полубесконечная система не должна ничего отражать, т. е. мы должны получить $R = 0$. Легко проверить, что так оно и есть.

2. С другой стороны, можно себе представить, что потенциал одного периода очень велик, и пропускание t равно нулю, тогда отражение R от всего потенциала должно быть равно r , поскольку остальные периоды фактически в отражении не участвуют. Легко проверить, что это выполняется тоже.

Вспомним вид волновой функция внутри периодического потенциала. Из него следует, что при смещении на один период a волновая функция умножается на фазовый множитель $\exp(iqa)$. Поэтому если волна, падающая на первый период, равна 1, то волна, падающая на второй период, равна $\exp(iqa)$. Мы обозначили ее X . Следовательно, $X = \exp(iqa)$.

Легко найти X из системы уравнений (37). Для этого нужно выразить R из второго уравнения и подставить в первое. В результате опять получим квадратное уравнение, но теперь для X . Однако можно сразу написать решение, если учесть симметрию уравнений. Уравнения переходят друг в друга при перестановке $r \leftrightarrow t$. Соответствующим образом должны переходить друг в друга и их решения. Поэтому

$$\begin{aligned} X &\equiv e^{iqa} = \\ &= \frac{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} - \sqrt{(1-t)^2 - r^2}}{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} + \sqrt{(1-t)^2 - r^2}}. \end{aligned} \quad (41)$$

Эту формулу, так же как и (40), легко проверить.

1. Можно представить себе, что никакого потенциала нет, но пустое пространство всегда можно мыслить себе периодическим. В этом случае $r = 0$, а $t = \exp(ika)$. Подставим эти значения в (41). В результате получим $\exp(iqa) = \exp(ika)$, т. е. $q = k$, как и следовало ожидать.

2. С другой стороны, можно себе представить, что потенциал одного периода очень велик, и пропускание t равно нулю. Подстановка $t = 0$ в (41) дает $\exp(iqa) = 0$, т. е. $\text{Im}(q) = i\infty$, и действительно, ко второму периоду ничего не проходит.

Полученные формулы можно преобразовать различным образом. Например, если записать $r = |r| \exp(i\phi_r)$, и учесть, что $t = \pm i |t| \exp(i\phi_t)$, то $t^2 - r^2 = -\exp(2i\phi_r)$. Поэтому $(1 \pm r)^2 - t^2 = 1 \pm 2r + \exp(2i\phi_r)$, а $(1 \pm t)^2 - r^2 = 1 \pm 2t - \exp(2i\phi_r)$. Подстановка в (40), (41) приводит их к виду

$$\begin{aligned} R &= \frac{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} - \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} + \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}, \\ e^{iqa} &= \mp \frac{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} - \sqrt{\sin \phi_r - |t|}}{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} + \sqrt{\sin \phi_r - |t|}}. \end{aligned} \quad (42)$$

Это выражение очень удобно в том случае, если известна только амплитуда r . Тогда $|t| = \sqrt{1 - |r|^2}$, а фазу t нам находить не нужно.

Амплитуды r и t зависят от энергии, и, согласно (42), при тех значениях энергии, при которых $\cos^2 \phi_r - |r|^2 < 0$, амплитуда R представляет собой единичное комплексное число, т. е. $|R| = 1$. При этих значениях энергии происходит полное отражение от полубесконечного потенциала. Такое полное отражение называется дифракцией Брэгга.

Конечное число периодов N

Чтобы найти R_N и T_N , достаточно учесть, что полубесконечный периодический потенциал с периодом a периодичен также и с периодом Na . При этом волновой вектор Блоха остается тем же, но фазовый множитель равен $X^N = \exp(iqNa)$. Перепишем соотношения (37) в виде

$$\begin{aligned} X^N &= T_N + R_N R X^N, \\ R &= R_N + T_N R X^N, \end{aligned} \quad (43)$$

где мы заменили амплитуды одного периода на амплитуды N периодов. Систему (43) можно разрешить относительно R_N и T_N . В результате получим

$$\begin{aligned} R_N &= R \frac{1 - \exp(2iqNa)}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}, \\ T_N &= \exp(iqNa) \frac{1 - R^2}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}. \end{aligned} \quad (44)$$

Легко видеть, что полученные формулы имеют такую же структуру, как амплитуды

отражения и пропускания прямоугольного потенциала (17).

Заключение

Мы продемонстрировали очень удобный метод для решения одномерных задач рассеяния на периодическом потенциале. При этом фактически мы не использовали уравнение Шредингера. Это уравнение нам понадобится, когда придется находить значения r и t . Но для одного периода, даже если точное решение найти не удастся, всегда можно воспользоваться приближенными методами. При этом знание свойств амплитуд позволяет всегда улучшить решение так, чтобы не нарушалась унитарность.

Мы рассмотрели здесь одномерный потенциал для скалярной частицы, но изложенный метод применим (см.: [2]) и к спинорным частицам, и к трехмерным периодическим средам, и к случайным трехмерным средам; и не только к волновым процессам, но и к чисто классическим, таким как диффузия частиц. При этом удастся получить и новые результаты и по-новому взглянуть на уже известные явления.

Список литературы

1. Игнатович В. К. Физика ультрахолодных нейтронов. М.: Наука, Гл. ред. Физматлит, 1976. 271 с.
2. Игнатович В. К. Нейтронная оптика. М.: Физматлит, 2006. 335 с.

Материал поступил в редколлегию 12.10.2007

V. K. Ignatovich One-Dimensional Periodic Potential in Quantum Mechanics

An elegant mathematical method is demonstrated with the help of simplest one-dimensional problems of quantum mechanics. This method is then applied to calculation of scattering on one-dimensional periodic systems. Generalization of the method for calculation of scattering in three dimensional periodic media and for spinor particles is pointed out.

Keywords: quantum mechanics, neutron optics, layered media, supermirrors, periodical systems.