

ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА
Кафедра фізики і хімії твердого тіла

Возняк О.М., Горічок І.В., Никируй Л.І.

**Моделювання станів одновимірних потенціалів довільної
форми методами трансфер-матриці.**

Навчальні матеріали з підготовки фахівців за магістерською
програмою зі спеціальностей 104 - "фізика та астрономія" та 105 -
"прикладна фізика і наноматеріали"

ІВАНО-ФРАНКІВСЬК - 2019

Зміст

1	Вступ	3
1.1	Тунелювання через прямокутний потенціальний бар'єр . . .	3
1.2	Розсіювання δ - потенціальною ямою	6
2	Метод матриці переносу	8
2.1	Формалізм матриці переносу	8
2.2	Метод матриці переносу для рівняння Шредингера	11
2.2.1	Матриця переносу для постійного потенціала	13
2.2.2	Задача на власні значення для матриці переносу . . .	14
2.2.3	Чисельна реалізація методу матриці переносу для потенціалів довільної форми	16
3	Метод аналітичної трансфер-матриці	16
3.1	Введення трансфер-матриці	16
3.2	Приклад 1. Частинка у асиметричній прямокутній потенціальній ямі	18
3.3	Частинка у потенціальній ямі довільної форми	20
4	Застосування методу аналітичної трансфер-матриці до тунельного подолання потенціальних бар'єрів	27
4.1	Тунелювання через прямокутний потенціальний бар'єр . . .	27
4.2	Тунелювання через потенціальний бар'єр довільної форми . . .	29
5	Застосування методу аналітичної трансфер-матриці до задачі розсіювання потенціальними ямами	33
5.1	Розсіювання прямокутною потенціальною ямою	33
5.2	Розсіювання ямою довільної форми	35

1 Вступ

Прогрес розвитку твердотільної електронної техніки і, зокрема, перехід від мікроелектроніки до наноелектроніки на основі нових матеріалів і технологій, вимагає якісної зміни наших уявлень про механізми явищ, що визначають роботу пристроїв і приладів. Технологічні і технічні процеси тепер відбуваються в області таких малих просторових масштабів, що визначальними стають квантово-механічні закономірності, які характеризують структуру і поведінку енергетичного спектра і хвильових функцій електронів та інших елементарних збуджень у речовині. Тому тепер яснє і глибоке розуміння квантових методів стає необхідним для інженерів, залучених у складні й тонкі високотехнологічні процеси. Проектування і розробка систем управління різними пристроями наноелектроніки вимагають глибоких навичок в області теоретичних розрахунків і заснованого на них якісного аналізу виду електронних спектрів і хвильових функцій в квантових структурах.

1.1 Тунелювання через прямокутний потенціальний бар'єр

Розглянемо рух частинки для одновимірного випадку з потенціальною енергією

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ V_0 & 0 \leq x \leq h, \\ 0 & x > h. \end{cases}$$

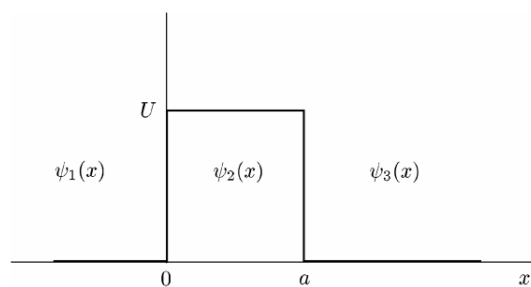


Рис. 1: Прямокутний потенціальний бар'єр.

За умови $E > 0$ і $E > V_0$, хвильова функція у виділених трьох інтервалах є такою

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & x < 0, \\ \psi_2(x) & 0 < x < h, \\ \psi_3(x) & x > h, \end{cases} = \begin{cases} a_1 \exp(ik_1x) + b_1 \exp(-ik_1x) & x < 0, \\ a_2 \exp(ik_2x) + b_2 \exp(-ik_2x) & 0 < x < h, \\ a_3 \exp(ik_1x) & x > h, \end{cases}$$

де $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ і $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$. Граничні умови у точках $x = 0$ і $x = h$ для хвильової функції та її похідної дають

$$\begin{aligned} \psi_1(x=0) &= \psi_2(x=0), \\ \psi_1'(x=0) &= \psi_2'(x=0), \\ \psi_2(x=h) &= \psi_3(x=h), \\ \psi_2'(x=h) &= \psi_3'(x=h). \end{aligned}$$

Підставивши явний вигляд хвильових функцій, одержуємо систему рівнянь

$$\begin{cases} a_1 + b_1 = a_2 + b_2, \\ k_1(a_1 - b_1) = k_2(a_2 - b_2), \\ a_2 e^{ik_2h} + b_2 e^{-ik_2h} = a_3 e^{ik_1h}, \\ k_2(a_2 e^{ik_2h} + b_2 e^{-ik_2h}) = k_1 e^{ik_1h}. \end{cases}$$

Введемо позначення $b_1/a_1 = A$, $a_2/a_1 = B$, $b_2/a_1 = B'$ і $a_3/a_1 = C$. Тоді

$$\begin{cases} 1 + A = B + B', \\ \frac{k_1}{k_2}(1 - A) = B - B', \\ B e^{ik_2h} + B' e^{-ik_2h} = C e^{ik_1h}, \\ \frac{k_2}{k_1}(B e^{ik_2h} - B' e^{-ik_2h}) = C e^{ik_1h}. \end{cases}$$

Додавши третє рівняння до четвертого та віднявши від третього рівняння четверте, знайдемо

$$\begin{aligned} B &= \frac{C}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)h}, \\ B' &= \frac{C}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)h}. \end{aligned}$$

Підставивши B і B' у перші два рівняння, знайдемо

$$C = \frac{e^{-ikh}}{\cos(k_2h) - \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin(k_2h)}. \quad (1)$$

Тепер, імовірність проходження частинки, буде визначатися виразом

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \frac{\sin^2(k_2 h)}{4}} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(k_2 h)} \quad (2)$$

Із виразу для T видно, що при $k_2 h = n\pi$, ($n = 1, 2, \dots$) $T = 1$ і стани з такою енергією, називають резонансними. З умови резонансу одержуємо

$$k_2^2 = \frac{\pi^2}{h^2} n^2,$$

Звідси

$$E = V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{h}\right)^2 n^2.$$

Отже, якщо $E = E_n$, то $T = 1$ і ці значення енергії співпадають із енергетичними рівнями частинки у безмежно глибокій прямокутній потенціальній ямі, шириною h .

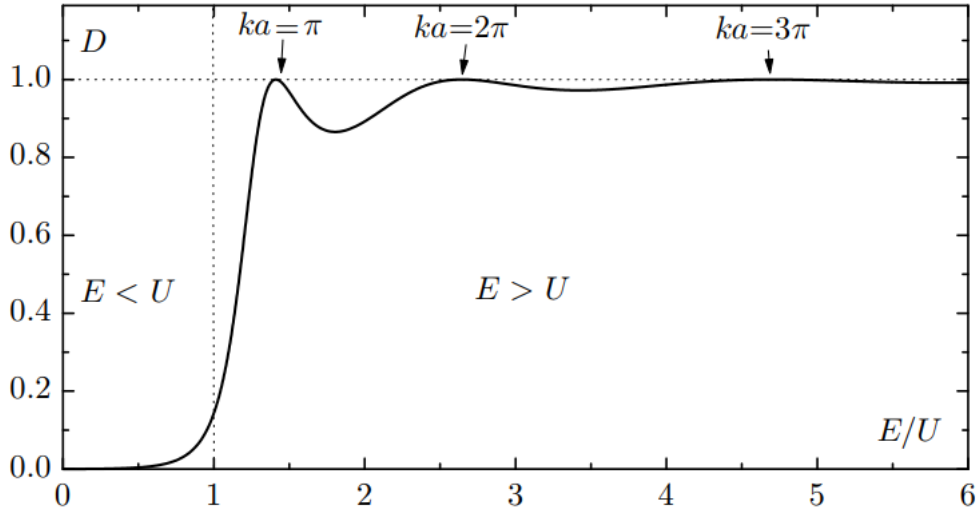


Рис. 2: Залежність імовірності проходження від енергії для прямокутного потенціального бар'єра $m\hbar^2 V/\hbar^2 = 12$.

Зазначимо, що такий самий вираз для коефіцієнта проходження одержується і у випадку прямокутної потенціальної ями з аналогічними характеристиками (ширина, глибина) та при енергіях $E > 0$.

1.2 Розсіювання δ - потенціальною ямою

Розглянемо потенціал "нульового розміру", а саме δ -потенціал

$$V(x) = -V_0\delta(x). \quad (3)$$

Рівняння Шредингера для такого потенціала набуває вигляду

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0\delta(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (4)$$

Розглянемо розв'язок цього рівняння за умови $E > 0$. При $x < 0$ рівняння Шредингера набуває вигляду

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = -k^2\psi(x), \quad (5)$$

а його розв'язком є

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

При $x > 0$, те ж саме рівняння Шредингера має розв'язок

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

Розрахунок коефіцієнтів відбивання і проходження приводить до таких результатів

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + 2\hbar^2 E/mV_0^2},$$
$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + mV_0^2/2\hbar^2 E}.$$

Недоліком δ - потенціала є те, що він не має розміру і цим суттєво відрізняється від будь-якого фізичного потенціала. Фізичні потенціали мають скінчений радіус дії і для них можливими є такі процеси розсіювання, для яких довжина хвилі падаючих частинок буде меншою від радіуса дії потенціала. Можливі також і резонанси, для яких ціле число півхвиль точно покриває лінійний розмір області дії потенціала коли, як наслідок, можуть виникати стоячі хвилі. Усі процеси такого типу, в принципі, не можуть відбуватися для δ - потенціала, радіус дії якого - нульовий.

Проте і для δ - потенціала можна штучно ввести характерний розмір, узагальнивши його. З цією метою розглядають систему, що містить два δ - потенціали, відокремлених один від одного скінченною відстанню. Тобто, $V(x)$ виберемо таким

$$V(x) = -\frac{1}{2}V_0 \left[\delta \left(x - \frac{a}{2} \right) + \delta \left(x + \frac{a}{2} \right) \right]. \quad (6)$$

Для того щоб "сила" подвійного δ - потенціала була такою ж, як і одинарного, слід вважати, що "сила" кожного δ - потенціала зокрема рівна $1/2 U_0$. Цей потенціал переходить у δ - потенціал при $a = 0$.

В околі значення енергії E_0 , вираз для амплітуди розсіювання можна записати, як

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k} \frac{\frac{1}{2}e^{i\theta}\Gamma}{(E - E_0) + \frac{1}{2}i\Gamma}, \quad (7)$$

де $f_l(\theta)$ – вклад у амплітуду розсіювання від парціальної хвилі, що призводить до резонансу. Цей вираз дає типову форму резонансної кривої, для якої Γ – півширина резонансу.

У багатьох задачах зустрічається ситуація, коли функція $V(x) - E$ змінює знак або має точки розривів (сама, або її похідні), але між особливими точками x_j і x_{j-1} є неперервною. Розв'язок задачі, у таких випадках, ускладнюється, а у випадку довільного профілю $V(x)$ і взагалі, неможливий в аналітичному вигляді.

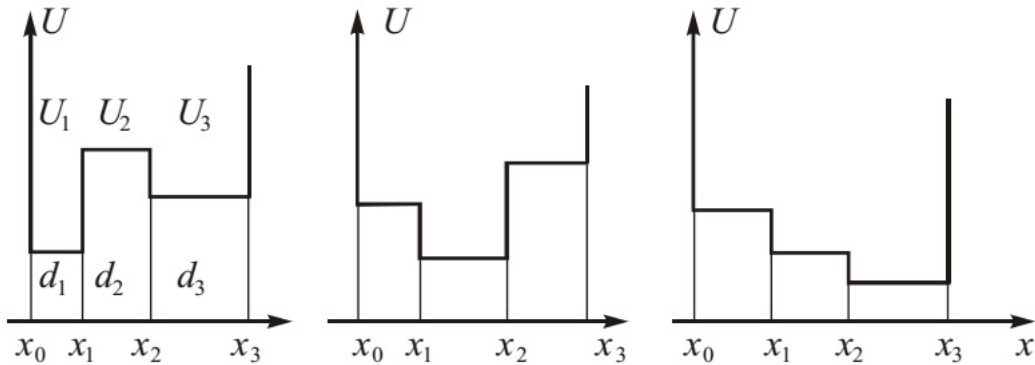


Рис. 3: Прямокутний потенціальний бар'єр складної форми.

Саме у таких випадках може допомогти спеціально розроблена методика матриць переносу, оскільки і у цьому випадку потенціал довільної

форми можна апроксимувати сукупністю прямокутних потенціальних бар'єрів.

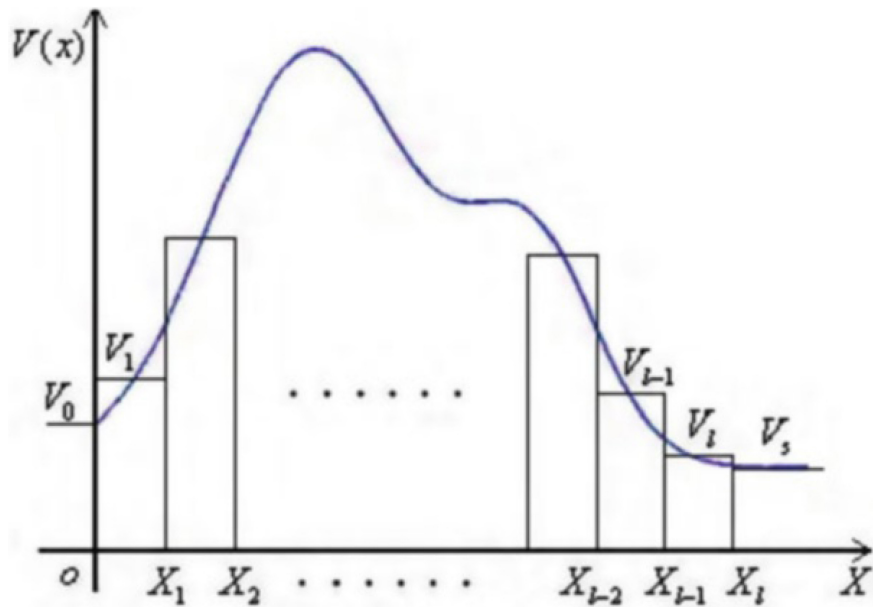


Рис. 4: Бар'єр довільної форми

2 Метод матриці переносу

2.1 Формалізм матриці переносу

Різні варіації методу матриць переносу вже давно використовуються для опису поширення електромагнітних хвиль у неоднорідних оптичних середовищах і в лініях передачі, для опису розв'язків рівняння Шредингера на межі поділу середовищ у теорії напівпровідникових надграток, для пружних і спінових хвиль та опису квазічастинок Боголюбова у надпровідниках. У відмічених задачах переважно розглядаються середовища із кусково-постійними характеристиками, а матриці переносу побудовані у базисі кусково-експоненціальних частинних розв'язків. Побудова матриць переносу із точних фундаментальних розв'язків створює додаткові можливості як для аналітичного опису систем, так і для підвищення точності розрахунків при кусково-постійних апроксимаціях.

елементи першого рядка M_{ij} , дають

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^n M_{1j}(x)\psi^{(j-1)}(0),$$

а

$$M_{1j} = \frac{W_j}{W_0},$$

де W_0 є значенням при $x = x_0$ вронскіана

$$W(x) = \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) & \dots & \psi_n(x) \\ \psi_1'(x) & \psi_2'(x) & \dots & \psi_n'(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1^{(n-1)}(x) & \psi_2^{(n-1)}(x) & \dots & \psi_n^{(n-1)}(x) \end{vmatrix},$$

а W_j знайдений із W_0 заміною рядкових елементів на $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x)$.

Застосуємо наведені міркування до одновимірного стаціонарного рівняння Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x),$$

яке можна переписати у вигляді системи двох рівнянь першого порядку

$$\begin{cases} \psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}, \\ \frac{d\psi'(x)}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0. \end{cases}$$

Або у інших позначеннях

$$\begin{cases} \psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}, \\ \frac{d\psi'(x)}{dx} + k^2(x)\psi(x) = 0. \end{cases}$$

Фундаментальна система розв'язків цієї системи містить два незалежних частинних розв'язки $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$, а її загальний розв'язок є їх лінійною комбінацією

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x),$$

де C_1 і C_2 – довільні сталі. Ці сталі і спектр власних енергії E визначаються крайовими умовами задачі. Хвильова функція $\psi(x)$ повинна бути

однозначною і неперервною, а її перша похідна неперервна на інтервалі неперервності потенціала $V(x)$ та у точках розриву першого роду функції $V(x)$. У точках розриву другого роду $V(x)$, може спостерігатися розрив похідної $d\psi/dx$ від хвильової функції. У точках розриву $V(x)$ завжди буде існувати розрив другої похідної хвильової функції $d^2\psi/dx^2$.

Для потенціала довільної форми, частинні розв'язки $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$, у загальному випадку, не виражаються через елементарні функції, що і становить найбільшу складність розв'язку стаціонарного рівняння Шредингера. Тому, для аналізу вигляду хвильової функції та енергетичного спектра, часто застосовують заміну справжньої потенціальної функції $V(x)$ якоюсь простішою модельною функцією, наприклад кусково-постійною функцією.

2.2 Метод матриці переносу для рівняння Шредингера

Продиференціювавши загальний розв'язок рівняння Шредингера, одержимо для довільної точки x два співвідношення

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x), \\ \psi'(x) &= C_1\psi'_1(x) + C_2\psi'_2(x),\end{aligned}$$

де $\psi' = d\psi/dx$. Наведені співвідношення можна записати у матричній формі

$$\begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} = \hat{W}(x) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

де

$$\hat{W}(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) & \psi_2(x) \\ \psi'_1(x) & \psi'_2(x) \end{pmatrix}.$$

Матрицю $\hat{W}(x)$ називають *матрицею Вронського*, а її визначник – *вронскіаном*. Подібні співвідношення можна записати і для іншої точки a (наприклад $a < x$)

$$\begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix} = \hat{W}(a) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}.$$

Із останнього співвідношення виразимо вектор-стовпчик сталих

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \hat{W}^{-1}(a) \begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix},$$

де $\hat{W}^{-1}(a)$ – обернена матриця Вронського у точці a

$$\hat{W}^{-1}(a) = \frac{1}{\det(W(a))} \begin{pmatrix} \psi_2'(x) & -\psi_2(x) \\ -\psi_1'(x) & \psi_2(x) \end{pmatrix}.$$

А підставивши вираз для вектор-стовпчика сталих у (8), одержимо

$$\begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix} = \hat{M}(x, a) \begin{pmatrix} \psi(a) \\ \psi'(a) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

де

$$\hat{M}(x, a) = \hat{W}(x) \hat{W}^{-1}(a). \quad (10)$$

Матрицю $\hat{M}(x, a)$ називають трансфер-матрицею або матрицею переносу із точки a у точку x . Вона пов'язує вектор-стовпчики, утворені із $\psi(x)$ і $\psi'(x)$ у двох точках a і x й виражається через значення фундаментальних розв'язків $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$ та їх похідних у точках a і x .

Очевидно, що матриця переносу у зворотному напрямку із x у a , є оберненою матрицею до $\hat{M}(x, a)$, тобто

$$\hat{M}(x, a) = \hat{M}^{-1}(a, x).$$

Зазначимо, також, що матрицю переносу можна побудувати, ґрунтуючись на будь-якій фундаментальній системі розв'язків рівняння Шредінґера, а вигляд не залежить від вибору цієї системи.

У деяких задачах виникає ситуація, коли або сама функція $V(x) - E$, або її похідна у деяких точках x_j , має розриви, причому між двома сусідніми точками, лінійно незалежні розв'язки відомі і мають аналітичну форму $\psi_{1j}(x)$ і $\psi_{2j}(x)$. Тоді, для проміжку $x_{j-1} < x < x_j$, загальний розв'язок $\psi_j(x)$ можна записати

$$\psi_j(x) = C_{1j} \psi_{1j}(x) + C_{2j} \psi_{2j}(x).$$

Граничними умовами для зшивання кускових розв'язків, є вимога неперервності самої хвильової функції, а також її похідної. Причому, використання матриць переносу при побудові повного розв'язку на всьому інтервалі зміни x дає змогу обійтися без проміжного визначення коефіцієнтів C_{1j} і C_{2j} та використати матрицю переносу $\hat{M}(x, a)$, у якій остання рівна послідовному добутку матриць $\hat{M}(x_j, x_{j-1})$ для яких індекс j зростає справа наліво

$$\hat{M}(x, a) = \prod_{j=1}^n \hat{M}(x_j, x_{j-1}), \quad x_0 = a, \quad x_n = x.$$

Формули (9) і (10) не містять наближень і принципово дають змогу одержати точний розв'язок, оскільки вони є просто переформулюванням рівняння Шредингера. Проте, у переважній більшості випадків залежностей $V(x)$, аналітичні вирази для фундаментальних розв'язків $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$ – невідомі. Тому, для знаходження розв'язку задачі можна скористатися модельним наближенням потенціала $V(x)$, наприклад, застосувати апроксимацію потенціала кусково-постійною функцією із різною висотою прямокутних сходинок, використовуючи матриці переносу для прямокутних бар'єрів та ям.

2.2.1 Матриця переносу для постійного потенціала

У найпростішому випадку, коли на проміжку $[a, x]$ потенціал постійний $V(x) = V = \text{const}$, розв'язки на цьому проміжку мають вигляд

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= e^{ikx}, \\ \psi_2(x) &= e^{-ikx},\end{aligned}$$

які описують біжучі хвилі, хвильове число яких рівне

$$k = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}}.$$

При $E > V$, похідні від хвильових функцій рівні

$$\begin{aligned}\psi_1'(x) &= ik e^{ikx}, \\ \psi_2'(x) &= -ik e^{-ikx},\end{aligned}$$

а матриці Вронського, пряма $W(x)$ і зворотна $W^{-1}(x)$, є такими

$$\begin{aligned}\hat{W}(x) &= \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{pmatrix}, \\ \hat{W}^{-1}(x) &= \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} ik e^{-ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -e^{ikx} \end{pmatrix},\end{aligned}$$

що дає таку матрицю переносу

$$\hat{M}(x, a) = \begin{pmatrix} \cos(k(x - a)) & \frac{1}{k} \sin(k(x - a)) \\ -k \sin(k(x - a)) & \cos(k(x - a)) \end{pmatrix}.$$

Якщо ширину інтервалу $x - a$ позначити через h , матриця переносу набуває простішого вигляду, який буде зручнішим при подальшому застосуванні до потенціалів складного профілю

$$\hat{M}(x, a) = \begin{pmatrix} \cos(kh) & \frac{1}{k} \sin(kh) \\ -k \sin(kh) & \cos(kh) \end{pmatrix}.$$

Матриця переносу у зворотному напрямку має вигляд

$$\hat{M}(a, x) = \begin{pmatrix} \cos(kh) & -\frac{1}{k} \sin(kh) \\ k \sin(kh) & \cos(kh) \end{pmatrix}.$$

За умови $E < V$, величина k стає чисто уявною, тобто

$$k = i\kappa.$$

У цьому випадку матриця переносу набуває вигляду

$$\hat{M}(x, a) = \begin{pmatrix} \cosh(\kappa h) & \frac{1}{\kappa} \sinh(\kappa h) \\ \kappa \sinh(\kappa h) & \cosh(\kappa h) \end{pmatrix},$$

де $\kappa = \sqrt{2m(V - E)}/\hbar^2$. У цьому випадку, матриця переносу у зворотному напрямку набуває вигляду

$$\hat{M}(a, x) = \begin{pmatrix} \cosh(\kappa h) & -\frac{1}{\kappa} \sinh(\kappa h) \\ -\kappa \sinh(\kappa h) & \cosh(\kappa h) \end{pmatrix}.$$

Для періодичних систем матриця переносу, за умови розбивання на шари однакової ширини h , має вигляд

$$\hat{M}(nh) = [\hat{M}(h)]^n = \begin{pmatrix} \cos(nk(x - a)) & \frac{1}{k} \sin(nk(x - a)) \\ -k \sin(nk(x - a)) & \cos(nk(x - a)) \end{pmatrix},$$

що суттєво спрощує розв'язок відповідної задачі.

2.2.2 Задача на власні значення для матриці переносу

Розглянемо модельний кусково-постійний потенціал, який апроксимує реальний потенціал складного профілю на проміжку $[x_0, x]$. У полі такого потенціала дискретний спектр виникає у випадку, якщо квантова система має достатньо глибокі потенціальні ями, дно яких є значно нижче від

асимптотичних значень потенціальної енергії на нескінченності $V(\pm\infty)$. Тобто при $|x| \rightarrow \pm\infty$ виконується нерівність $V(x) > E$, і, нехай x_0 – крайня ліва, а x_n – крайня права точка особливостей функції $V(x) - E$. Запишемо рівняння (9) для $i = 0$ і $j = n + 1$

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1}(x_n) \\ \psi'_{n+1}(x_n) \end{pmatrix} = \hat{M}(x_n, x_0) \begin{pmatrix} \psi_0(x_0) \\ \psi'_0(x_0) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Позначимо розв'язок, що зростає зліва від x_0 при $x \rightarrow -\infty$, як $\psi_{2,0}(x)$, а розв'язок який зростає справа від x_n при $x \rightarrow +\infty$, як $\psi_{2,n+1}(x)$. Граничні умови, які ставлять вимогу спадання $\psi_i(x)$ при $x \rightarrow \pm\infty$, задовольняються вимогою перетворення в нуль коефіцієнтів перед ними, тобто

$$\begin{aligned} C_{2,0} &= 0, \\ C_{2,n+1} &= 0. \end{aligned}$$

Враховуючи цей результат рівняння (11) набуває вигляду

$$C_{1,n+1} \begin{pmatrix} \psi_{1,n+1}(x_n) \\ \psi'_{1,n+1}(x_n) \end{pmatrix} = \hat{M}(x_n, x_0) C_{1,0} \begin{pmatrix} \psi_{1,0}(x_0) \\ \psi'_{1,0}(x_0) \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Або у розгорнутому вигляді

$$\begin{aligned} C_{1,n+1}\psi_{1,n+1}(x_n) - (M_{11}\psi_{1,0}(x_0) + M_{12}\psi'_{1,0}(x_0))C_{10} &= 0, \\ C_{1,n+1}\psi'_{1,n+1}(x_n) - (M_{21}\psi_{1,0}(x_0) + M_{22}\psi'_{1,0}(x_0))C_{10} &= 0, \end{aligned} \quad (13)$$

де $M_{ij} = M(x_0, x_n)_{ij}$, $(i, j = 1, 2)$ – елементи матриці переходу із x_0 у x_n .

Оскільки система (13) є системою однорідних рівнянь, то її нетривіальні розв'язки існують лише за умови рівності нулю її визначника, що неможливо при довільних значеннях хвильового числа, а лише при деяких вибраних його значеннях. Хвильове ж число $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$ пов'язане із енергією системи, тому прирівнюючи до нуля визначник цієї системи рівнянь, ми одержуємо рівняння для спектру власних значень енергії. Цьому рівнянню відповідає матрична форма, яку можна одержати, домноживши рівняння (12) зліва на вектор-рядок $(\psi'_{1,n+1}(x_{n+1}), -\psi_{1,n+1}(x_{n+1}))$. Тоді

$$(\psi'_{1,n+1}(x_{n+1}), -\psi_{1,n+1}(x_{n+1}))\hat{M}(x_n, x_0) \begin{pmatrix} \psi_{1,0}(x_0) \\ \psi'_{1,0}(x_0) \end{pmatrix} = 0.$$

2.2.3 Чисельна реалізація методу матриці переносу для потенціалів довільної форми

Оскільки, матриця переносу для квантово-механічної системи з потенціалом довільної форми є добутком матриць переносу усіх шарів, на які поділений проміжок $[x_0, x_n]$, то запишемо

$$\hat{M}(x_n, x_0) = \prod_{j=1}^n \hat{M}(x_j, x_{j-1}).$$

З одного боку, результат числового розрахунку буде тим точнішим, чим на більшу кількість шарів ми розіб'ємо проміжок на якому потенціал відмінний від нуля. З іншого боку, при зростанні кількості шарів зростає і кількість співмножників при перемножуванні матриць, що спричиняє наростання похибки розрахунку при роботі відповідної комп'ютерної програми. З цього огляду, завжди існує обмеження на можливість одержання необхідної точності розв'язку для цілих класів задач.

3 Метод аналітичної трансфер-матриці

3.1 Введення трансфер-матриці

Окрім розглянутої теорії матриці переносу, в задачах поширення електромагнітних хвиль у неоднорідних середовищах вже давно використовується видозмінений варіант цього підходу [5], який, до того ж, має ряд переваг. Розглянемо вказаний підхід стосовно потенціала $V(x)$ довільної форми. Для цього розділимо проміжок, у якому потенціал відмінний від нуля між $x = 0$ і $x = s$ на l інтервалів, ширина яких $h_j = x_j - x_{j-1}$ ($j = 1, 2, \dots, l$) є тим меншою чим більшим є l . При великих l , потенціал на кожному з інтервалів із достатньою точністю можна вважати постійним і рівним

$$V_j = V\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right) \quad (j = 1, 2, \dots, l).$$

Хвильова функція $\psi_j(x)$ на кожному інтервалі задовольняє рівняння Шредингера

$$\frac{d^2\psi_j(x)}{dx^2} + k_j^2\psi_j(x) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, l), \quad (14)$$

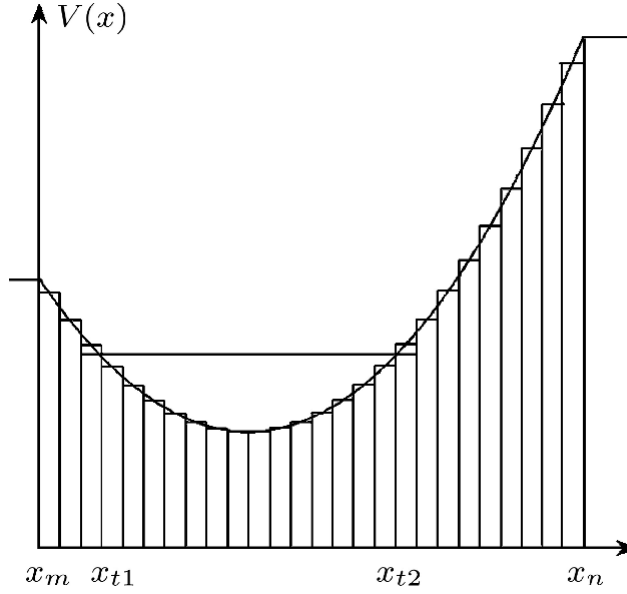


Рис. 5: Потенціальна яма довільної форми.

де $k_j^2 = 2m(E - V_j)/\hbar^2$. Граничні умови на межі $x = x_{j-1}$ між $j - 1$ та j інтервалами, що є наслідком умови неперервності хвильової функції та її першої похідної, мають вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi_j(x_{j-1}) \\ \psi'_j(x_{j-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{j-1}(x_{j-1}) \\ \psi'_{j-1}(x_{j-1}) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

На j -му інтервалі хвильова функція та її перша похідна на обох межах пов'язані між собою за допомогою трансфер-матриці. Оскільки, хвильова функція та її похідна на j -границі пов'язана із хвильовою функцією та її похідною на $(j - 1)$ - границі, то можна записати таке матричне рівняння

$$\begin{pmatrix} \psi_j(x_j) \\ \psi'_j(x_j) \end{pmatrix} = \hat{M}_j \begin{pmatrix} \psi_{j-1}(x_{j-1}) \\ \psi'_{j-1}(x_{j-1}) \end{pmatrix}. \quad (16)$$

3.2 Приклад 1. Частинка у асиметричній прямокутній потенціальній ямі

Розглянемо одновимірну потенціальну яму із таким потенціалом (рис.6)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0, \\ V_1 & 0 < x < h, \\ V_2 & x > h. \end{cases}$$

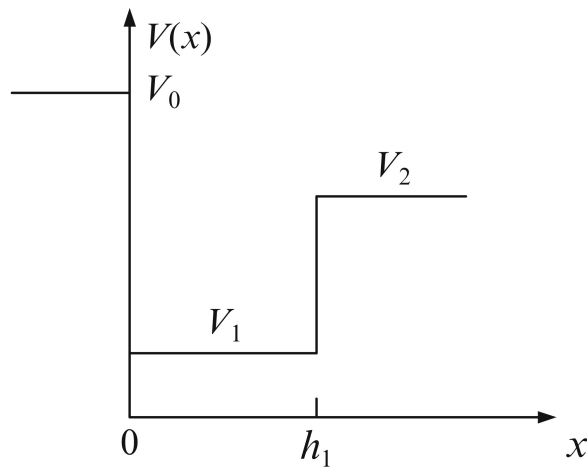


Рис. 6: Асиметрична прямокутна потенціальна яма.

При енергії $V_1 < E < V_0 < V_2$ у ямі існують зв'язані стани, які описуються такими хвильовими функціями

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0(x) & x < 0, \\ \psi_1(x) & 0 < x < h, \\ \psi_2(x) & x > h. \end{cases} = \begin{cases} A_0 \exp(\kappa_0 x) & x < 0, \\ A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x) & 0 < x < h, \\ A_2 \exp(-\kappa_2 x) & x > h. \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned} \kappa_0^2 &= 2m(V_0 - E)/\hbar^2, \\ \kappa_2^2 &= 2m(V_2 - E)/\hbar^2, \\ k_1^2 &= 2m(E - V_1)/\hbar^2. \end{aligned}$$

Матричне рівняння для асиметричної прямокутної потенціальної ями має такий вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \psi_0'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(k_j h) & -\frac{1}{k_j} \sin(k_j h) \\ k_j \sin(k_j h) & \cos(k_j h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2(h) \\ \psi_2'(h) \end{pmatrix}, \quad (17)$$

де

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= A_0 \exp(\kappa_0 x) & x < 0, \\ \psi_2(x) &= A_2 \exp(-\kappa_2 x) & x > h. \end{aligned}$$

Оскільки

$$\begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \psi_0'(0) \end{pmatrix} = \psi_0(0) \begin{pmatrix} 1 \\ P_0 \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} 1 \\ \kappa_0 \end{pmatrix} \quad (18)$$

де $P_0 = \psi_0'/\psi_0$,
враховуючи, що

$$\begin{pmatrix} -\kappa_0 \psi_0(0) & \psi_0(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \kappa_0 \psi_0(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\kappa_0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \kappa_0 \end{pmatrix} = 0 \quad (19)$$

та домноживши матричне рівняння (17) на (18), скоротивши його на A_0 та використавши умову (19), одержуємо

$$(\kappa_0 + \kappa_2) \cos(k_1 h) = \left(k_1 - \frac{\kappa_0 \kappa_2}{k_1}\right) \sin(k_1 h).$$

Або

$$\tan(k_1 h) = \frac{\frac{\kappa_0}{k_1} + \frac{\kappa_2}{k_1}}{1 - \frac{\kappa_0 \kappa_2}{k_1 k_1}}. \quad (20)$$

Використавши відому із тригонометрії формулу

$$\arctan\left(\frac{x+y}{1-xy}\right) = m\pi + \arctan(x) + \arctan(y), \quad (21)$$

одержуємо

$$k_1 h = m\pi + \arctan\left(\frac{\kappa_0}{k_1}\right) + \arctan\left(\frac{\kappa_2}{k_1}\right). \quad (22)$$

Останнє рівняння є дисперсійним рівнянням, розв'язуючи яке можна знайти енергетичний спектр частинки у потенціальній ямі, у якому m ($m=1, 2, \dots$) нумерує енергетичні рівні у ямі. Рівняння (20) не дуже зручне для чисельного розв'язку, оскільки треба шукати відразу кілька його

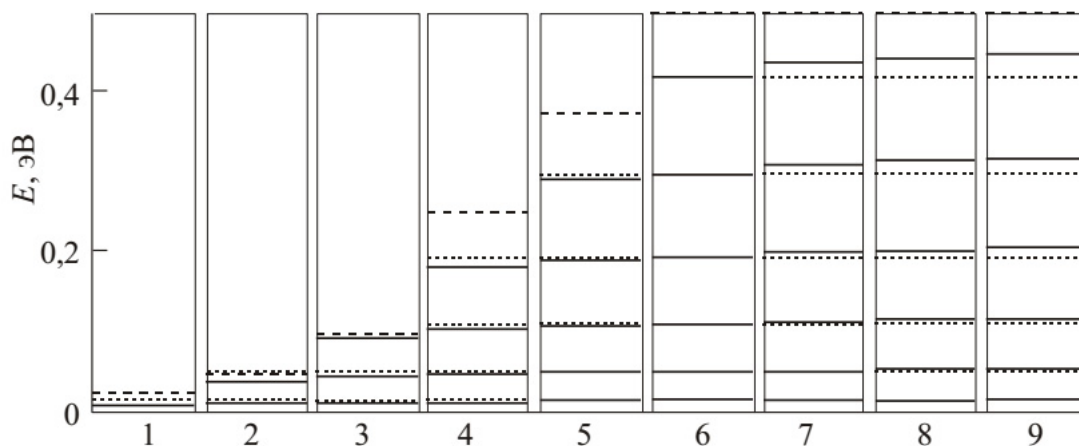


Рис. 7: Стационарні стани у асиметричній потенціальній ямі.

коренів. Рівняння ж (22) є трансцендентним рівнянням і враховує багатозначність обернених тригонометричних функцій. Тому його чисельний розв'язок, що залежить від параметра m , якщо він існує, простіше знайти із заданою точністю [6].

Для симетричної ями $V_2 = V_0$ і $\kappa_2 = \kappa_0$ рівняння (22) зводиться до

$$\arctan\left(\frac{\kappa_0}{k_1}\right) = \frac{n\pi - k_1 h}{2}. \quad (23)$$

Ввівши змінну $\xi = \frac{k_1 h}{2}$, приходимо до рівняння

$$\tan(\xi) = \gamma\xi$$

для парних m , або

$$\cot(\xi) = \gamma\xi$$

для непарних m , які зазвичай, наводять у підручниках з квантової механіки, їх розв'язки відшукують графічно.

3.3 Частинка у потенціальній ямі довільної форми

Розглянемо частинку з енергією E у одновимірній потенціальній ямі, зображеній на рисунку 1. Класичні точки повороту x_{t_1} і x_{t_2} визначають

як точки, в яких потенціальна енергія дорівнює енергії частинки $E = V(x_t)$ (рис.5).

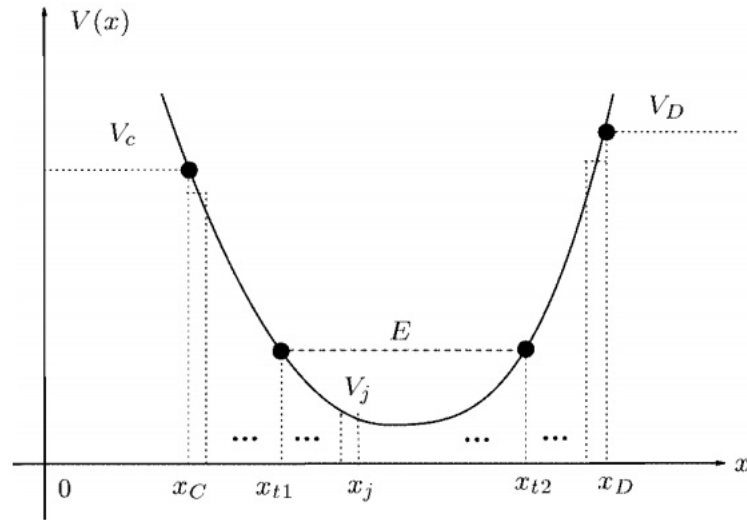


Рис. 8: Стаціонарні стани у потенціальній ямі довільної форми.

Хвильова функція є осцилюючою між двома точками повороту і експоненціально спадає за ними. Прийmemo також, що при $x < x_C$, $V(x) = V_C$, а при $x > x_D$, $V(x) = V_D$. Тому, хвильові функції у цих областях будуть такими

$$\psi_C(x) = A_C \exp[\kappa_C(x - x_C)] \quad (x < x_C), \quad (24)$$

$$\psi_D(x) = A_D \exp[\kappa_D(x - x_D)] \quad (x > x_D). \quad (25)$$

де

$$\begin{aligned} \kappa_C &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_C - E)}, \\ \kappa_D &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_D - E)}. \end{aligned} \quad (26)$$

Якщо розбити три інтервали (x_C, x_{t1}) , (x_{t1}, x_{t2}) і (x_{t2}, x_D) на l , m і n шарів однакової ширини, то при $\hbar \rightarrow 0$, це розбиття відтворить неперервний потенціал $V(x)$. Тепер можна записати для кожного із шарів

відповідну трансфер-матрицю, а з її допомогою таке матричне рівняння

$$\begin{pmatrix} \psi_C(x_C) \\ \psi'_C(x_C) \end{pmatrix} = \left[\prod_{i=1}^l \hat{M}_i \right] \left[\prod_{j=l+1}^{l+m} \hat{M}_j \right] \left[\prod_{k=l+m+1}^{l+m+n} \hat{M}_k \right] \begin{pmatrix} \psi_D(x_D) \\ \psi'_D(x_D) \end{pmatrix}, \quad (27)$$

у якому три види трансфер-матриць задаються так

$$\hat{M}_i \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_i h) & \frac{1}{\kappa_i} \sinh(\kappa_i h) \\ -\kappa_i \sinh(\kappa_i h) & \cosh(\kappa_i h) \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, \dots, l), \quad (28)$$

$$\hat{M}_j \begin{pmatrix} \cos(k_j h) & \frac{1}{k_j} \sin(k_j h) \\ -k_j \sin(k_j h) & \cos(k_j h) \end{pmatrix} \quad (j = l+1, l+2, \dots, l+m), \quad (29)$$

$$\hat{M}_k \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_k h) & \frac{1}{\kappa_k} \sinh(\kappa_k h) \\ -\kappa_k \sinh(\kappa_k h) & \cosh(\kappa_k h) \end{pmatrix} \quad (k = l+m+1, l+m+2, \dots, l+m+n). \quad (30)$$

Відповідні хвильові числа мають вигляд

$$\begin{aligned} \kappa_i &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_i - E)}, \\ k_j &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_j)}, \\ \kappa_k &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_k - E)}. \end{aligned} \quad (31)$$

Рівняння на власні значення для цього матричного рівняння матиме вигляд

$$\begin{pmatrix} -P_C & 1 \end{pmatrix} \left[\prod_{i=1}^l \hat{M}_i \right] \left[\prod_{j=l+1}^{l+m} \hat{M}_j \right] \left[\prod_{k=l+m+1}^{l+m+n} \hat{M}_k \right] \begin{pmatrix} 1 \\ -P_D \end{pmatrix} = 0. \quad (32)$$

Якщо у цьому рівнянні спочатку розрахувати внески від $\left[\prod_{i=1}^l \hat{M}_i \right]$ і $\left[\prod_{k=l+m+1}^{l+m+n} \hat{M}_k \right]$, то за умови, що ці вклади будуть відмінними від нуля, рівняння (32) спрощується і набуває вигляду

$$\begin{pmatrix} -P_{l-1} & 1 \end{pmatrix} \left[\prod_{j=l+1}^{l+m} \hat{M}_j \right] \begin{pmatrix} 1 \\ P_{l+m+1} \end{pmatrix} = 0. \quad (33)$$

Величини P_i та P_k можна визначити, записавши рівняння для власних значень для i -го з проміжку $[x_C, x_{t_1}]$ та k -го з проміжку $[x_{t_2}, x_D]$ шарів

$$\begin{pmatrix} -\kappa_i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_i h) & \frac{1}{\kappa_i} \sinh(\kappa_i h) \\ -\kappa_i \sinh(\kappa_i h) & \cosh(\kappa_i h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -\kappa_{i+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (34)$$

і

$$\begin{pmatrix} -\kappa_k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_k h) & \frac{1}{\kappa_k} \sinh(\kappa_k h) \\ -\kappa_k \sinh(\kappa_k h) & \cosh(\kappa_k h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -\kappa_{k+1} \end{pmatrix} = 0. \quad (35)$$

Тоді

$$P_i = \kappa_i \frac{\sinh(\kappa_i h) + \frac{P_{i-1}}{\kappa_i} \cosh(\kappa_i h)}{\cosh(\kappa_i h) + \frac{P_{i-1}}{\kappa_i} \sinh(\kappa_i h)} \quad (i = 1, 2, \dots, l), \quad (36)$$

$$P_0 = P_C.$$

і

$$P_k = \kappa_k \frac{\sinh(\kappa_k h) + \frac{P_{k+1}}{\kappa_k} \cosh(\kappa_k h)}{\cosh(\kappa_k h) + \frac{P_{k+1}}{\kappa_k} \sinh(\kappa_k h)} \quad (i = l + m + 1, l + m + 2, \dots, l + m + n),$$

$$P_{l+m+n+1} = P_C.$$

(37)

Рівняння (36) і (37) є двома рекурсивними співвідношеннями. Із першого з них (36) взявши за $P_C = P_0$, можна знайти P_1, P_2, \dots, P_l . З другого рівняння (37), взявши за $P_D = P_{l+m+n+1}$, можна знайти $P_{l+m}, P_{l+m+1}, \dots, P_{l+m+n-1}$.

Записавши рівняння на власні значення для j -го шару всередині ями, одержимо

$$\begin{pmatrix} -\psi'(x_j) & \psi(x_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x_j) \\ \psi'(x_j) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\psi'(x_j) & \psi(x_j) \end{pmatrix} \hat{M}_j \begin{pmatrix} \psi(x_{j-1}) \\ \psi'(x_{j-1}) \end{pmatrix} = 0$$

та ввівши позначення $P_j = \psi'(x_j)/\psi(x_j)$ одержимо

$$P_j = k_j \frac{\frac{P_{j-1}}{k_j} \cos(k_j h) - \sin(k_j h)}{\cos(k_j h) + \frac{P_{j-1}}{k_j} \sin(k_j h)} \quad (j = l + 1, l + 2, \dots, l + m). \quad (38)$$

Або

$$\tan(k_j h) = \frac{\frac{P_{j-1}}{k_j} - \frac{P_j}{k_j}}{1 + \frac{P_j}{k_j} \frac{P_{j-1}}{k_j}}, \quad (39)$$

а

$$k_j h = \arctan \left(\frac{\frac{P_{j-1}}{k_j} - \frac{P_j}{k_j}}{1 + \frac{P_j}{k_j} \frac{P_{j-1}}{k_j}} \right). \quad (40)$$

Використавши тотожність

$$\arctan \left(\frac{x - y}{1 + xy} \right) = n\pi + \arctan(x) - \arctan(y),$$

одержимо

$$k_j h = n_j \pi + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_j} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right), \quad (j = l + 1, l + 2, \dots, l + m). \quad (41)$$

Перепишемо одержаний вираз у такому вигляді

$$k_j h + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_j} \right) = n_j \pi + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) \\ (j = l + 1, l + 2, \dots, l + m). \quad (42)$$

Розгорнувши ці рівняння по j , одержимо таку систему рівнянь

$$k_{l+1} h + \arctan \left(\frac{P_l}{k_l} \right) - \arctan \left(\frac{P_l}{k_{l+1}} \right) = n_{l+1} \pi + \arctan \left(\frac{P_l}{k_l} \right) - \arctan \left(\frac{P_{l+1}}{k_l} \right), \\ \dots \dots \dots \\ k_{j-1} h + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-2}} \right) - \arctan \left(\frac{P_{j-2}}{k_{j-1}} \right) = n_{j-1} \pi + \arctan \left(\frac{P_{j-2}}{k_{j-2}} \right) - \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right), \\ k_j h + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_j} \right) = n_j \pi + \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right), \\ k_{j+1} h + \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_{j+1}} \right) = n_{j+1} \pi + \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) - \arctan \left(\frac{P_{j+1}}{k_{j+1}} \right), \\ \dots \dots \dots \\ k_{l+m} h + \arctan \left(\frac{P_{l+m-1}}{k_{l+m-2}} \right) - \arctan \left(\frac{P_{l+m-1}}{k_{l+m}} \right) = n_{l+m} \pi + \arctan \left(\frac{P_{l+m-1}}{k_{l+m-1}} \right) - \\ \arctan \left(\frac{P_{l+m}}{k_{l+m}} \right).$$

Підсумувавши ці рівняння по всіх j , одержимо

$$\sum_{j=l+1}^{l+m} k_j h + \sum_{j=l+1}^{l+m-1} \left\{ \arctan \left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) \right\} = n\pi + \arctan \left(\frac{P_l}{k_l} \right) - \arctan \left(\frac{P_{l+m}}{k_{l+m}} \right). \quad (43)$$

Використовуючи визначення похідної

$$\frac{d \left(\arctan \left(\frac{P}{k} \right) \right)}{dx} = \frac{k dP - P dk}{P^2 + k^2}$$

знайдемо, що

$$\arctan \left(\frac{P_{j+1}}{k_{j+1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) = \frac{k_j \Delta P_j - P_j \Delta k_j}{P_j^2 + k_j^2}.$$

Оскільки $\Delta P_j = P_{j+1} - P_j = 0$, то

$$\arctan \left(\frac{P_{j+1}}{k_{j+1}} \right) - \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) = - \frac{P_j \Delta k_j}{P_j^2 + k_j^2}.$$

Тоді рівняння (43) можна переписати у такому вигляді

$$\sum_{j=l+1}^{l+m} k_j h - \sum_{j=l+1}^{l+m-1} \frac{P_j \Delta k_j}{P_j^2 + k_j^2} = n\pi + \arctan \left(\frac{P_l}{k_l} \right) - \arctan \left(\frac{P_{l+m}}{k_{l+m}} \right). \quad (44)$$

Перейшовши до границі, коли $n \rightarrow \infty$, а $h \rightarrow 0$ одержуємо

$$\int_{x_{t1}}^{x_{t2}} k(x) dx - \int_{x_{t1}}^{x_{t2}} \frac{P(x)}{P^2(x) + k^2(x)} dk = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (45)$$

Другий інтеграл можна перетворити, визначивши із

$$P(x) = \psi'(x)/\psi(x)$$

похідну від хвильової функції

$$\psi'(x) = P(x)\psi(x)$$

та знайшовши її другу похідну

$$\psi''(x) = P'(x)\psi(x) + k^2\psi(x).$$

Підставивши знайдену похідну у рівняння Шредингера, одержимо

$$P'(x)\psi(x) + P\psi'(x) + k^2(x)\psi(x) = 0,$$

або поділивши одержане рівняння на $\psi(x)$, знайдемо

$$P'(x) + P^2(x) + k^2(x) = 0, \quad (46)$$

яке є т.з. рівнянням Ріккаті. Рівняння Ріккаті хоча і є рівнянням першого порядку, але воно – нелінійне відносно $P(x)$. Визначивши із рівняння Ріккаті $P^2(x) + k^2(x)$, та підставивши у другий інтеграл рівняння (45), одержимо

$$\int \frac{P(x)}{P^2(x) + k^2(x)} dk = \int \frac{P(x)}{P'(x)} dk = \int \frac{P(x)}{P'(x)} \frac{dk(x)}{dx} dx = \int \frac{P(x)}{P'(x)} k'(x) dx.$$

Тоді, дисперсійне рівняння (45) набуває вигляду

$$\int_{x_{t1}}^{x_{t2}} \left(k(x) - \frac{P(x)}{P'(x)} k'(x) \right) dx = n\pi \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (47)$$

Власні значення енергії можна розрахувати із рівняння (47), що є рівнянням на власні значення багаточарової системи, яка апроксимує потенціал довільної форми.

Зазначимо, що загальне хвильове число $K(x)$ в рівнянні (45) містить іншу функцію $P(x) = \psi'(x)/\psi(x)$, яка виглядає як відношення похідної від розв'язку рівняння Шредингера до самого розв'язку. Отже, щоби обчислити вираз (45), треба мати вираз для $P(x)$, для одержання якого слід спочатку розв'язати рівняння (46). Насправді, $P(x)$ може бути повністю визначено рівнянням (38) без розв'язання рівняння Шредингера. Отже, рівняння (45) є замкнутим виразом.

4 Застосування методу аналітичної трансфер-матриці до тунельного подолання потенці-альних бар'єрів

4.1 Тунелювання через прямокутний потенціальний бар'єр

Розглянемо одновимірну прямокутну потенціальну яму, з потенціалом (рис.6)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0, \\ V_1 & 0 < x < h, \\ V_0 & x > h. \end{cases}$$

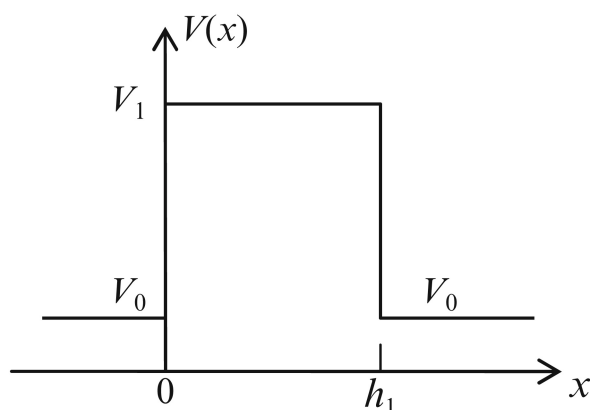


Рис. 9: Прямокутний потенціальний бар'єр

За умови $V_0 < E < V_1$ хвильова функція у виділених трьох інтервалах є такою

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0(x) & x < 0, \\ \psi_1(x) & 0 < x < h, \\ \psi_2(x) & x > h, \end{cases} = \begin{cases} A_0 \exp(ik_0x) + B_0 \exp(-ik_0x) & x < 0, \\ A_1 \exp(-\kappa_1x) + B_1 \exp(\kappa_1x) & 0 < x < h, \\ A_2 \exp(ik_0x) & x > h, \end{cases}$$

де

$$\begin{aligned} \kappa_1^2 &= 2m(V_1 - E)/\hbar^2, \\ k_0^2 &= 2m(E - V_0)/\hbar^2. \end{aligned}$$

Зазначимо, що $A_0 \exp(ik_0x)$ описує плоску хвилю, що падає на бар'єр зліва у області $x < 0$, а $B_0 \exp(-ik_0x)$ відбиту від бар'єру хвилю у тій же ж області. $A_1 \exp(-\kappa_1x)$ і $B_1 \exp(\kappa_1x)$ є загасаючими компонентами хвилі всередині бар'єра, що поширюються зліва направо та справа наліво – відповідно. При $x > h$ хвиля, що пройшла описується виразом $A_2 \exp(ik_0x)$.

Матричне рівняння, що пов'язує хвильові функції на двох границях має такий вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \psi_0'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_1 h) & -\frac{1}{\kappa_1} \sinh(\kappa_1 h) \\ -\kappa_1 \sinh(\kappa_1 h) & \cosh(\kappa_1 h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2(h) \\ \psi_2'(h) \end{pmatrix}, \quad (48)$$

Вставивши явний вигляд хвильових функцій при $x = 0$ і $x = h$ рівняння для власних значень приводиться до вигляду

$$\begin{pmatrix} -ik_0 \frac{1-r}{1+r} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh(\kappa_1 h) & -\frac{1}{\kappa_1} \sinh(\kappa_1 h) \\ -\kappa_1 \sinh(\kappa_1 h) & \cosh(\kappa_1 h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ ik_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (49)$$

де $r = B_0/A_0$. Перемноживши матриці у останньому рівнянні приходимо до рівняння

$$ik_0 \left(1 - \frac{1-r}{1+r}\right) \cosh(\kappa_1 h) = \kappa_1 \left(1 + \frac{k_0^2}{\kappa_1^2} \frac{1-r}{1+r}\right) \sinh(\kappa_1 h).$$

Представивши гіперболічні функції експонентами перетворимо його до виду

$$\frac{ik_0}{\kappa_1} \left(1 - \frac{1-r}{1+r}\right) (e^{\kappa_1 h} + e^{-\kappa_1 h}) = \left(1 + \frac{k_0^2}{\kappa_1^2} \frac{1-r}{1+r}\right) (e^{\kappa_1 h} - e^{-\kappa_1 h}),$$

звідки знайдемо вираз для r

$$r = \frac{\left(1 + \frac{k_0^2}{\kappa_1^2}\right) (1 - e^{-2\kappa_1 h})}{\left(1 + i \frac{k_0}{\kappa_1}\right)^2 e^{-2\kappa_1 h} - \left(1 - i \frac{k_0}{\kappa_1}\right)^2}.$$

Оскільки

$$\begin{aligned} \cos(\arctan(x)) &= \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}, \\ \sin(\arctan(x)) &= \frac{x}{\sqrt{1+x^2}}, \end{aligned}$$

то

$$1 + \frac{k_0^2}{\kappa_1^2} = e^{-2i\varphi_{01}},$$

$$1 + i\frac{k_0}{\kappa_1} = e^{-4i\varphi_{01}}$$

де

$$\varphi_0 = \arctan\left(\frac{\kappa_1}{k_0}\right).$$

Тоді

$$r = \frac{B_0}{A_0} = \frac{e^{-2i\varphi_{01}}(1 - e^{-2\kappa_1 h})}{1 - e^{-4i\varphi_{01}} e^{-2\kappa_1 h}}.$$

Вираз для коефіцієнта відбивання R є квадратом величини r , тобто $R = |r|^2$, а коефіцієнт проходження рівний $T = 1 - R$.

4.2 Тунелювання через потенціальний бар'єр довільної форми

Потенціальний бар'єр довільної форми можна розглядати як сукупність тонких прямокутних потенціальних бар'єрів.

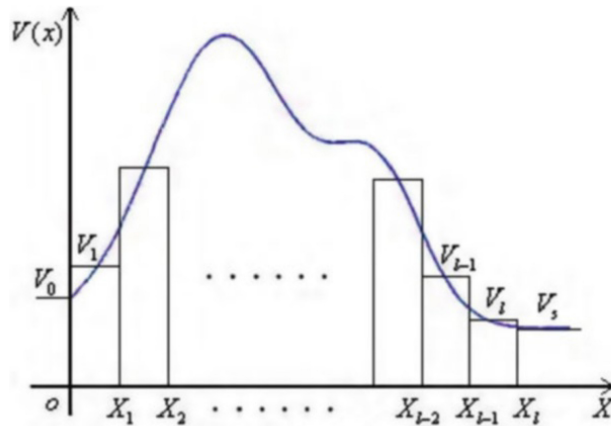


Рис. 10: Бар'єр довільної форми

Чим меншою буде ширина кожного із прямокутних потенціальних бар'єрів тим точніше вони відображатимуть істинний потенціал. Для

кожного із прямокутних потенціальних бар'єрів рівняння Шредингера матиме вигляд

$$\frac{d^2\psi_j(x)}{dx^2} + k_j^2\psi_j(x) = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, l), \quad (50)$$

де

$$k_j^2 = \frac{2m(E - V_j)}{\hbar^2}. \quad (51)$$

Вважатимемо, що частинки поширюються зліва і мають енергію $E > V_0$. Хвильові функції у областях $x < 0$ і $x > x_l$ мають такий вигляд

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_0(x) & x < 0, \\ \psi_{m+1}(x) & x > x_l. \end{cases} = \begin{cases} A_0 \exp(ik_0x) + B_0 \exp(-ik_0x) & x < 0, \\ A_{l+1} \exp(ik_{l+1}x) & x > x_l. \end{cases} \quad (52)$$

$A_0 \exp(ik_0x)$ описує плоску хвилю, що падає на бар'єр зліва у області $x < 0$, а $B_0 \exp(-ik_0x)$ відбиту від бар'єру хвилю у тій же ж області. При $x > l$ хвиля, що пройшла описується виразом $A_2 \exp(ik_0x)$. Коефіцієнти відбивання і проходження задаються так

$$r = \frac{B_0}{A_0}, \quad (53)$$

$$t = \frac{A_{l+1}}{A_0}.$$

Потенціал j -го шару рівний V_j , а його трансфер-матриця має вигляд

$$\hat{M}_j = \begin{pmatrix} \cos(k_j h) & -\frac{1}{k_j} \sin(k_j h) \\ k_j \sin(k_j h) & \cos(k_j h) \end{pmatrix}. \quad (54)$$

Для шару у якому $E < V_j$ хвильовий вектор слід замінити на $i\alpha_j$. Матричне рівняння для багат шарової структури має вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \psi'_0(0) \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^l \hat{M}_j \begin{pmatrix} \psi_{l+1}(x_l) \\ \psi'_{l+1}(x_l) \end{pmatrix}, \quad (55)$$

яке засвідчує, що співвідношення неперервності для хвильової функції та її похідної на двох границях при $x = 0$ і $x = t$ пов'язані з допомогою трансфер-матриці. Рівняння на власні значення має вигляд

$$\begin{pmatrix} -\frac{\psi'_0(0)}{\psi_0(0)} & 1 \end{pmatrix} \prod_{j=1}^l \hat{M}_j \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\psi'_{l+1}(x_l)}{\psi_{l+1}(x_l)} \end{pmatrix} = 0. \quad (56)$$

Визначивши P_j як

$$\frac{\psi'_j(x)}{\psi_j(x)} = -P_j \quad (j = 1, 2, \dots, l) \quad (57)$$

Підставляючи це визначення у (58) одержуємо

$$\left(-ik_0 \frac{A_0 - B_0}{A_0 + B_0} \quad 1 \right) \prod_{j=1}^l \hat{M}_j \begin{pmatrix} 1 \\ -P_{l+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (58)$$

яке можна спростити ввівши

$$-ik_0 \frac{A_0 - B_0}{A_0 + B_0} = P_1, \quad (59)$$

$$-P_{l+1} = ik_{l+1}, \quad (60)$$

$$P_j = k_j \tan \left[\arctan \left(\frac{P_{j+1}}{k_j} \right) - k_j h_j \right] \quad (j = 1, 2, \dots, l). \quad (61)$$

Увівши

$$\phi_j = \arctan \left(\frac{P_j}{k_j} \right) \quad (62)$$

та використавши вираз для P_j із (61) одержимо

$$\begin{aligned} \phi_j = n\pi + \arctan \left(\frac{P_{j+1}}{k_j} \right) - k_j h_j = n\pi + \arctan \left(\frac{k_{j+1}}{k_j} \tan \phi_{j+1} \right) - k_j h_j \\ (n = 0, 1, 2, \dots; j = 1, 2, \dots, l - 1). \end{aligned} \quad (63)$$

Цю формулу можна переписати у такому вигляді

$$k_j h_j + \left[\phi_{j+1} - \arctan \left(\frac{k_{j+1}}{k_j} \tan \phi_{j+1} \right) \right] = n\pi + (\phi_{j+1} \phi_j). \quad (64)$$

Якщо $j = l$, то

$$k_l h_l = n\pi + \arctan \left(\frac{P_{l+1}}{k_l} \right) - \phi_l. \quad (65)$$

Враховуючи рівняння (64), (65) і (61) та виконавши підсумовування по j одержуємо

$$\sum_{j=1}^l k_j h_j + \sum_{j=1}^{l-1} \left[\phi_{j+1} - \arctan \left(\frac{k_{j+1}}{k_j} \tan \phi_{j+1} \right) \right] = n\pi + \arctan \left(\frac{P_{l+1}}{k_l} \right) - \phi_1. \quad (66)$$

Це рівняння можна переписати як

$$\begin{aligned} & \exp(-2i\phi_1) = \\ & \exp \left\{ 2i \left[\prod_{j=1}^l k_j h_j + \left\{ \prod_{j=1}^{l-1} \left(\phi_{j+1} - \arctan \left(\frac{k_{j+1}}{k_j} \tan \phi_{j+1} \right) \right) - \arctan \left(\frac{P_{l+1}}{k_l} \right) \right\} \right] \right\} \end{aligned} \quad (67)$$

Враховуючи (59) можна записати

$$\frac{k_0}{k_1} \cdot \frac{A_0 - B_0}{A_0 + B_0} = \frac{iP_1}{k_1}, \quad (68)$$

звідки можна одержати

$$r = \frac{B_0}{A_0} = \frac{r_{01} + \exp(-2i\phi_1)}{1 + r_{01} \exp(-2i\phi_1)}, \quad (69)$$

де

$$r_{01} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}. \quad (70)$$

Для потенціала довільної форми перший вклад у рівнянні (66) можна записати у вигляді такого інтеграла

$$\sum_{j=1}^l k_j h_j = \int_0^{x_l} k(x) dx, \quad (71)$$

другий вклад дає

$$\sum_{j=1}^{l-1} \left[\phi_{j+1} - \arctan \left(\frac{k_{j+1}}{k_j} \tan \phi_{j+1} \right) \right] = \int_0^{x_l} \frac{P}{p^2 + k^2} \frac{dk}{dx} dx. \quad (72)$$

Із рівняння (??) випливає, що

$$\exp \left[-2i \arctan \left(\frac{P_{l+1}}{k_l} \right) \right] = \exp \left[-2i \arctan \left(\frac{ik_{l+1}}{k_l} \right) \right] = \frac{k_l - k_{l+1}}{k_l + k_{l+1}} = r_{l,l+1}. \quad (73)$$

Враховуючи (71), (72) і (73) рівняння (67) можна переписати у такому вигляді

$$\exp(2i\phi_1) = r_{l,l+1} \cdot \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]. \quad (74)$$

Тепер коефіцієнт відбивання можна записати у такому вигляді

$$r = \frac{r_{01} + r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]}{1 + r_{01} r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]}. \quad (75)$$

Імовірність відбивання можна визначити як квадрат модуля коефіцієнта відбивання r

$$R = |r|^2 = \left| \frac{B_0}{A_0} \right|^2 = \left| \frac{r_{01} + r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_m} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]}{1 + r_{01} r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]} \right|^2. \quad (76)$$

$$T = 1 - R = 1 - \left| \frac{r_{01} + r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]}{1 + r_{01} r_{l,l+1} \exp \left[2i \int_0^{x_l} \left(k + \frac{P}{P^2 + k^2} \frac{dk}{dx} \right) dx \right]} \right|^2. \quad (77)$$

5 Застосування методу аналітичної трансфер-матриці до задачі розсіювання потенціальними ямами

5.1 Розсіювання прямокутною потенціальною ямою

Розглянемо одновимірну потенціальну яму із таким потенціалом (рис.11)

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < 0, \\ V_1 & 0 < x < h_1, \\ V_0 & x > h_1. \end{cases}$$

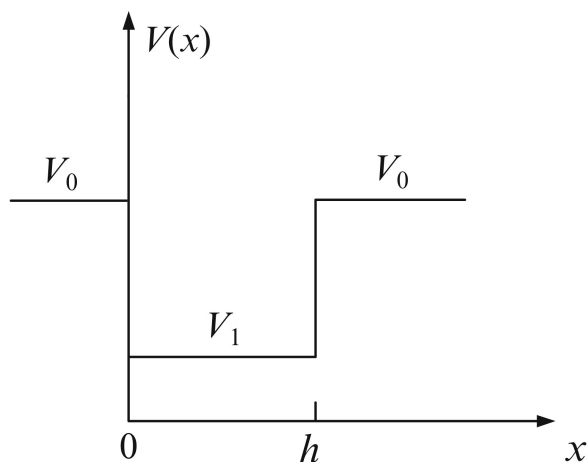


Рис. 11: Прямокутна потенціальна яма.

Розв'язок рівняння Шредингера за умови $E > V_0$, матиме вигляд

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= A_0 e^{ik_0 x} + B_0 e^{-ik_0 x}, & x < 0, \\ \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, & 0 < x < h_1, \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_0 x}, & x > h_1.\end{aligned}$$

Матричне рівняння, що пов'язує розв'язки на границях ями, має вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi_0(0) \\ \psi_0'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(k_1 h_1) & \frac{1}{k_1} \sin(k_1 h_1) \\ -k_1 \sin(k_1 h_1) & \cos(k_1 h_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2(h_1) \\ \psi_2'(h_1) \end{pmatrix},$$

Підставивши вирази для хвильових функцій у матричне дисперсійне рівняння, одержимо

$$\left(-ik_0 \frac{1-r}{1+r} \quad 1 \right) \begin{pmatrix} \cos(k_1 h_1) & \frac{1}{k_1} \sin(k_1 h_1) \\ -k_1 \sin(k_1 h_1) & \cos(k_1 h_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ ik_0 \end{pmatrix} = 0,$$

де $r = B_0/A_0$.

Виконавши перемноження матриць, приходимо до рівняння

$$ik_0 \left(1 - \frac{1-r}{1+r} \right) \cos(k_1 h_1) + k_1 \left(1 - \frac{k_0^2}{k_1^2} \cdot \frac{1-r}{1+r} \right) \sin(k_1 h_1) = 0.$$

Визначивши із цього рівняння r , знаходимо

$$r = \frac{\left(1 - \frac{k_0^2}{k_1^2}\right) \sin(k_1 h_1)}{\left(1 - \frac{k_0^2}{k_1^2}\right) \sin(k_1 h_1) - 2i \frac{k_0}{k_1} \cos(k_1 h_1)}.$$

Використавши експоненціальну форму для тригонометричних функцій

$$\begin{aligned} \cos(k_1 h_1) &= \frac{1}{2} \exp ik_1 h_1 (1 + \exp -2ik_1 h_1), \\ \sin(k_1 h_1) &= \frac{1}{2i} \exp ik_1 h_1 (1 - \exp -2ik_1 h_1), \end{aligned}$$

знайдемо для r

$$r = \frac{(k_1^2 - k_0^2)(1 - \exp(-2ik_1 h_1))}{(k_1 + k_0)^2 - (k_1 - k_0)^2 \exp(-2ik_1 h_1)}.$$

Або

$$r = \frac{r_{10}(1 - \exp(-2ik_1 h_1))}{1 - r_{10}^2 \exp(-2ik_1 h_1)}.$$

5.2 Розсіювання ямою довільної форми

Розглянемо притягуючий потенціал довільної форми, що заданий на проміжку $[0, s]$,

$$V(x) = \begin{cases} V(0), & x < 0, \\ V(x), & 0 < x < x_s, \\ 0, & x > x_s, \end{cases}$$

який має такий вигляд (рис. 12)

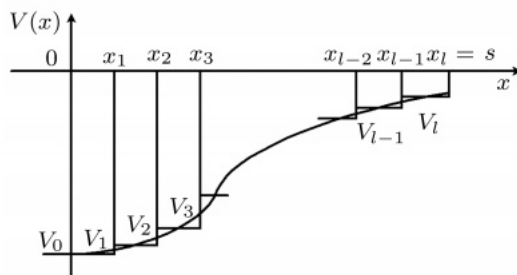


Рис. 12: Яма довільної форми.

і частинки масою m , що налітають зліва, енергія яких $E > 0$. Інтервал $[0, s]$ ділимо на l проміжків шириною h , на кожному з яких потенціальна енергія стала і рівна $V_j = V(x_{j-1} + h/2)$. На кожному із вибраних кроків відбуватиметься відбивання і проходження хвиль, які, можливо, раніше зазнавали відбивання і проходження.

Розв'язки рівняння Шредингера при $x < 0$ і $x > x_s$, матимуть вигляд

$$\psi(x) = \begin{cases} A_0 \exp(ik_0x) + B_0 \exp(-ik_0x), & x < 0, \\ A_s \exp(ik_sx), & x > x_s, \end{cases} \quad (78)$$

де

$$k_0 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar},$$

$$k_s = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Матричне рівняння для переносу від точки $x = x_s$ до $x = 0$, матиме вигляд

$$\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^l \hat{M}_j \begin{pmatrix} \psi(x_s) \\ \psi'(x_s) \end{pmatrix} \quad (79)$$

Матриця переносу, яка відповідає j -му шару, має вигляд

$$\hat{M}_j = \begin{pmatrix} \cos(k_j h) & -\frac{1}{k_j} \sin(k_j h) \\ k_j \sin(k_j h) & \cos(k_j h) \end{pmatrix}.$$

Підставляючи вигляд хвильових функцій (78) у (79) та враховуючи, що $r = B_0/A_0$, одержимо рівняння для власних значень

$$\begin{pmatrix} -ik_0 \frac{1-r}{1+r} & 1 \end{pmatrix} \prod_{j=1}^l \hat{M}_j \begin{pmatrix} 1 \\ ik_s \end{pmatrix} = 0. \quad (80)$$

Запишемо дисперсійне рівняння для j -го шару

$$k_j h + \arctan\left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}}\right) - \arctan\left(\frac{P_{j-1}}{k_j}\right) = n_j \pi + \arctan\left(\frac{P_{j-1}}{k_{j-1}}\right) - \arctan\left(\frac{P_j}{k_j}\right)$$

$$(j = 1, 2, \dots, s), \quad (81)$$

підсумуємо ці рівняння по всіх j , застосуємо перетворення

$$\exp \left[-2i \arctan \left(\frac{P_{m+1}}{k_m} \right) \right] = \exp \left[-2i \arctan \left(\frac{ik_{m+1}}{k_m} \right) \right] = \frac{k_m - k_{m+1}}{k_m + k_{m+1}} = r_{m,m+1}$$

визначимо з одержаних рівнянь r та перейдемо до границі $l \rightarrow \infty$. Тоді

$$r = \frac{r_{01} + r_{ls} \exp \left(2i \int_0^s K(x) dx \right)}{1 + r_{01} r_{ls} \exp \left(2i \int_0^s K(x) dx \right)},$$

де r_{01} і r_{ls} визначені із

$$r_{ij} = \frac{k_i - k_j}{k_i + k_j} \quad (82)$$

при $k_i = k_0$ і $k_j = k_1$ та $k_i = k_l$ і $k_j = k_s$, відповідно. Хвильове число $K(x)$ має вигляд

$$K(x) = k(x) + \frac{P(x)k'(x)}{P^2(x) + k^2(x)},$$

де

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{\sqrt{(2m(E - V(x)))}}{\hbar}, \\ P(x) &= -\frac{\psi'(x)}{\psi(x)}. \end{aligned} \quad (83)$$

Як видно із (82), для неперервного потенціала, зокрема, й у точці $x = 0$, при зменшенні ширини інтервала $h \rightarrow 0$, через точнішу апроксимацію потенціального профілю $k_0 - k_1 \rightarrow 0$, так, що r_{01} можна покласти рівним нулю. Це означає, що основна хвиля, пройшла у всіх сегментах без будь-якого відбивання, у той час як субхвилі зазнають багаторазового відбивання.

Тоді вираз для r спрощується і набуває вигляду

$$r = r_{ls} \exp \left(2i \int_0^s K(x) dx \right) = r_{ls} \exp \left(2i \int_0^s \left(k(x) + \frac{P(x)k'(x)}{P^2(x) + k^2(x)} dx \right) \right).$$

Оскільки, при $E > V(x)$ $k(x)$ є додатним, то

$$\left| \exp \left(2i \int_0^s k(x) dx \right) \right| \equiv 1,$$

що означає, що при обчисленні коефіцієнта відбивання $R = rr^*$, перший доданок у інтегралі, через який виражається r , не впливає на результат. Тому можна записати

$$|r| = \left| r_{ls} \exp \left(2i \int_0^s \frac{P(x)k'(x)}{P^2(x) + k^2(x)} dx \right) \right|. \quad (84)$$

Тепер розглянемо питання щодо розрахунку r_{ls} . Якщо потенціал має скінчений радіус дії, то r_{ls} можна просто розрахувати за формулою (82) для інтервалу на межі дії потенціалу. Якщо ж потенціал має нескінченний радіус дії, то для розрахунку r_{ls} слід використати точну хвильову функцію, яку, переважно, можна обчислити завдяки її простій асимптотичній поведінці на хвості потенціала. Зокрема якщо відома асимптотика хвильової функції на інтервалі $[x_s, \infty]$, то r_{ls} можна знайти у такий спосіб. Якщо

$$\lim_{x \rightarrow x_s} \psi(x) \propto \exp [ik(x_s)(x - x_s)] + r(x_s) \exp [-ik(x_s)(x - x_s)],$$

то у точці $x = x_s$ виконуватимуться такі рівняння

$$\begin{aligned} \psi(x_s) &\propto 1 + r(x_s), \\ \frac{\partial \psi(x_s)}{\partial x} &\propto ik(x_s)[1 - r(x_s)]. \end{aligned}$$

Тоді $r(x_s)$ буде рівним

$$r(x_s) = \frac{k(x_s)\psi(x_s) + i\frac{\partial \psi(x_s)}{\partial x}}{k(x_s)\psi(x_s) - i\frac{\partial \psi(x_s)}{\partial x}}.$$

Розглянемо результати розрахунків для конкретного потенціала, зокрема так званого потенціала Вудса-Саксона

$$V(x) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{x}{L}\right)},$$

де V_0 і L – параметри потенціала. відомий точний розв'язок для цього потенціала ([6])

$$R = \left(\frac{\sin(h[\pi(k_1 - k_2)L])}{\sin(h[\pi(k_1 + k_2)L])} \right)^2,$$

а результати розрахунків за формулою (84) наведені на рисунку.

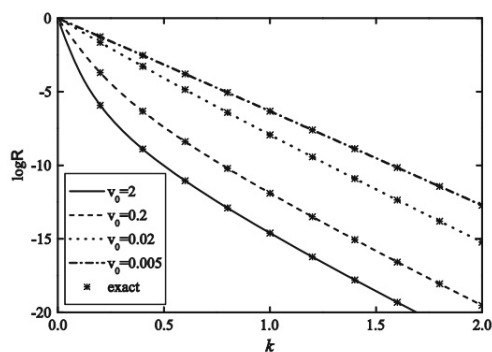


Рис. 13: Коефіцієнт відбивання для потенціала Вудса-Саксона.

Література

- [1] Вакарчук І.О. Квантова механіка. Львів: ЛНУ ім.Івана Франка, 2012. 872 с.
- [2] Кейн Е.О. Основные представления о тунелировании/в сб. Туннельные явления в твердых телах пер. с англ. под ред. В.Н. Переля. М.: Мир, 1973, 422 с.
- [3] Аладышкин А.Ю. Туннельные явления в нанопизике. ipmras.ru/UserFiles/publications/.../tunnel_202010.pdf, 32с.
- [4] Давыдов А. С. Квантовая механика. Москва: Наука, 1973. 704с.
- [5] Борн М., Вольф Е. Основы оптики. М. Наука, 1973. 720с.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика т. 3. Квантовая теория. Нерелятивистская теория. Москва: Наука, 1989. 768с.
- [7] Kwong W., Rosner J.L. Supersymmetric Quantum Mechanics and Inverse Scattering. Progress of Theoretical Physics Supplement. No. 86, 1986, p.p. 366-376.

- [8] Yuan W. et.al. Quantum reflection as the reflection of subwaves. Chin.Phys. B. V.19, №9 (2010) 093402.
- [9] Xu W. et.al. The analytical transfer matrix method for quantum reflection. Chin.Phys. B. V.19, №4 (2010) 040307.
- [10] Бурштейн Э., Субашиев А.В. Туннельные явления в твердых телах. М.: Мир, 1973. 422 с.
- [11] Беляев Ю. Н. Характеристическая матрица слоисто-периодической структуры. Вестн. Сам.гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2011, выпуск 2(23), с. 142.