

УДК 530.145.61

НОВОЕ О ПОВЕДЕНИИ ВОЛН В ПРОЗРАЧНЫХ,  
ПЕРИОДИЧЕСКИХ И МНОГОКАНАЛЬНЫХ  
СТРУКТУРАХ

*Б. Н. Захарьев,\* В. М. Чабанов*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	1506
РЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПОЛОС ПРИ ВКЛЮЧЕНИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ВОЗМУЩЕНИЯ	1507
СПЕКТРАЛЬНЫЙ КОНТРОЛЬ С ПОМОЩЬЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ И КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ СУПЕРСИММЕТРИИ	1512
ИЗМЕНЕНИЕ СТЕПЕНИ ЗАПРЕЩЕННОСТИ	1522
ВОССТАНОВЛЕНИЕ $M$ -КАНАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА ШТУРМА–ЛИУВИЛЛЯ ПО $M + 1$ СПЕКТРУ	1528
МНОГОКАНАЛЬНЫЕ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ	1536
НОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОТЕНЦИАЛОВ	1538
ГИПОТЕЗЫ О РЕЗОНАНСНОЙ ПРИРОДЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И ЭФФЕКТА ДЖОЗЕФСОНА	1543
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	1543

---

\*E-mail: zakharev@thsun1.jinr.ru

УДК 530.145.61

## НОВОЕ О ПОВЕДЕНИИ ВОЛН В ПРОЗРАЧНЫХ, ПЕРИОДИЧЕСКИХ И МНОГОКАНАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

Б. Н. Захарьев\*, В. М. Чабанов

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Скрытая резонансная природа формирования спектральных щелей при включении периодического потенциального возмущения имеет простое объяснение. Удивительное совпадение частот колебаний потенциала и решений для *континуума* значений энергии приводит к неограниченному (запретному) росту амплитуд осцилляций  $\Psi(x)$ . Понимание этого неожиданно оказывается ключевым для объяснения поведения также и физических решений в разрешенных зонах. Там из-за отклонения от резонанса сменяются подобные взаимно компенсирующие режимы роста решений в разные стороны. В результате решения в разрешенных зонах не разрастаются неограниченно, а имеют характерные биения. Демонстрируются универсальные алгоритмы управления границами спектральных зон вплоть до *слияния соседних зон* проводимости. Оказывается, можно также задавать и скорость роста решений в любой энергетической точке запрещенной зоны. Это имеет важный физический смысл *контроля степени запрещенности* внутри спектральной щели, определяющей свойства проникаемости в конфигурационном пространстве. Например, в гетерогенной композиции из участков разных периодических структур отрезок с запрещенной зоной при избранной энергии будет служить эффективным барьером между участками с разрешенными зонами и можно менять его прозрачность. Объясняются новые симметрии проникаемости отдельных частей разрезанных потенциалов. Проясняются спектральные особенности многоканальных структур.

The hidden resonance nature of spectral gap formation by periodical potential perturbation has simple explanation. Wonderful coincidence of  $V(x)$  oscillation frequencies for the *continuum* of energy values results in unlimited (forbidden) increase of  $\Psi(x)$  oscillation amplitudes. This understanding unexpectedly appears a key moment also for explanation of behavior of physical solutions in allowed zones. There the violation of exact resonance leads to alteration of mutually compensating regimes of growth in opposite directions. So, the solutions in allowed zones do not swing with infinitely increasing amplitudes, but have beating. Also are demonstrated universal control algorithms of spectral zone boundaries up to the *merging of neighbor conducting zones*. It appears possible to control the rate of growth of solutions in any energy point of forbidden zone. It has important physical sense of the degree of forbiddenness control inside the spectral gap that determines the penetrability properties in configuration space. For example, in heterogeneous composition of intervals with different periodic structures the section with forbidden zone at chosen energy will serve as effective barrier between the sections with allowed zones, and we can change its transparency. Also are explained new transparency symmetries of separate parts of some potentials cut in arbitrary points. In addition some spectral peculiarities of multichannel structures are explained.

---

\*E-mail: zakharev@thsun1.jinr.ru

Квантовая механика — это наше все, это образ нашего мышления.

*И. В. Волович*

... Чем больше люди занимаются вычислениями, тем меньше они понимают.

*Р. Хофман, нобелевский лауреат*

Мы думаем, что вычисления могут быть все же очень полезны, чтобы подкреплять наши догадки.

## ВВЕДЕНИЕ

Эта статья о новинках в области квантового «дизайна». Она продолжает серию наших обзорных публикаций «Секреты квантовой интуиции» (см., например, ЭЧАЯ [1–5] и другие издания [6–8]). Одной из целей упомянутых обзоров было донести до русскоязычных читателей информацию, опубликованную нами в зарубежных журналах. Российской науке, особенно в этот ее кризисный период, требуется всяческая поддержка. Подход обратной задачи и компьютерной визуализации способствовал выявлению простых и универсальных закономерностей, единых алгоритмов построения и преобразования квантовых систем, сочетанию доступности, широты охвата и точности теории. Сравнивая сейчас наше представление о квантовой механике до и после того, как мы в последние годы начали осваивать обратную задачу и суперсимметрию, поражаешься резкому контрасту: насколько прозрачнее становятся связи между свойствами потенциалов, волновыми функциями, их спектральными характеристиками.

К чудесам обратной задачи можно отнести единое, предельно экономное представление о полных наборах потенциальных форм. Вместо десятка разрозненных точных моделей мы имеем качественную картину непрерывных связей между системами с любыми потенциалами. Их часто можно непрерывно трансформировать друг в друга, изменяя отдельные спектральные параметры (что отвечает «движению» в пространстве моделей). Нам здесь еще открылась роль отдельных пучностей как универсальных волновых строительных элементов, что многократно упростило понимание управления спектрами, рассеянием, распадами. Квантовая механика стала поистине «послушной» [7]. Часто оказывается возможным даже в уме решать задачи качественно, что очень облегчает открытие новых явлений. И при этом всегда можно подкрепить результаты с помощью точных моделей. На примере периодических систем мы вскрыли ранее не замеченный, но фундаментальный механизм резонансного разрушения (физических) решений в целых полосах спектра (образование запрещенных зон) [9]. Выяснились новые особенности

многоканальных систем. Их изучение — это путь к описанию многомерных и многочастичных систем. В настоящем обзоре мы отразили последние результаты по одному из вариантов обратной задачи для  $M$ -канальных систем, когда восстановление потенциала удастся осуществить только по набору  $M+1$  спектров (без приведенных ширин). Существуют и соответствующие точно решаемые модели, которые можно строить с использованием преобразований дарбугу-суперсимметрии, — об этом, впрочем, будет сказано в отдельной публикации.

При всем этом возникает чувство сожаления из-за того, что инертность физического сообщества (социальный принцип Ле-Шателье) или неинформированность мешают ликвидировать дефекты квантовой грамоты. Мы и сами чувствуем какую-то ответственность за это. С другой стороны, нас все время беспокоит сознание того, что нам самим еще не ясны многие уже установленные фундаментальные результаты в физике и математике, которые, как нам представляется, могли бы помочь нашим исследованиям. Но их изложение в литературе не удовлетворяет нас (не достаточно понятно), да и уровень взаимопомощи в научном сообществе далек от наибольшего благоприятствования. Мы неохотно способствуем пониманию другими того, что понимаем сами, кроме того, объективно сложно находить общий язык между понимающим и незнающим (недостаток культуры коммуникации). И это при том, что такое общение незаменимо, полезно обеим сторонам. В наших работах мы стараемся преодолеть эту тенденцию, насколько можем. . .

## 1. РЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПОЛОС ПРИ ВКЛЮЧЕНИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ВОЗМУЩЕНИЯ

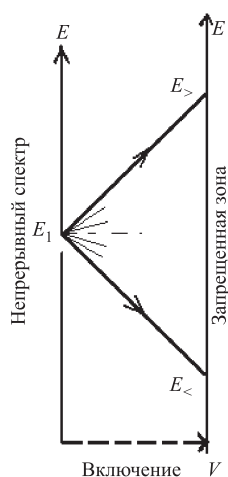
«Это глупо, как факт», — сказал Бальзак, и этим он как нельзя более точно определил значение факта самого по себе. Факт. . . очень малопоучителен и ценен до поры, пока путем толкования и исследования не будет превращен в феномен.

*М. Горький*

Несколько парадоксальное мнение Оноре де Бальзака с комментариями Максима Горького в эпитафии представляется нам очень уместным для того, чтобы подчеркнуть принципиальное значение в науке ясности (то, что мы называем интуицией) (см. также мнение Декарта в эпитафии к гл. 2 книги [7]), которой так пока не хватает и которой посвящается данный обзор, как и предыдущие публикации.

Имеется три фундаментально различных типа спектров: дискретный, непрерывный и составленный из отдельных полос. В последнем случае непрерывный спектр распадается на разделенные конечными промежутками

разрешенные зоны, или зоны проводимости. Описание таких систем было дано уже более 70 лет назад с помощью замечательного формализма Блоха–Флоке [10] (см. также [11]). С тех пор эта теория, казавшаяся совершенной, служит основой исследований квантовых волновых процессов в кристаллах и их всевозможных приложениях, например, в микроэлектронике. Все это время не возникало и мысли об усовершенствовании, упрощении достигнутых здесь представлений, возможно, именно благодаря красоте предложенных решений. При этом, оказывается, простая физическая причина разрыва непрерывного спектра запрещенными зонами в случае периодических потенциалов оставалась незамеченной. В некотором смысле классическая теория представляла собой как бы «темный ящик». Короткие формулы с заданными параметрами можно заложить в компьютер и довольно быстро получить в конкретном случае результат с нужной точностью. Обычно, правда за исключением случаев редких тогда точных моделей, требовалось решить стандартными численными методами уравнение Шредингера на конечном интервале (периоде). Но все это не позволяло ясно представить себе результат при другом выборе параметров, поскольку для этого нужен был новый расчет. Предсказать же качественно результаты в общем случае было сложно. В рамках традиционного подхода прямой задачи квантовой механики не была вскрыта простая, но *замаскированная резонансная природа явления*. Оставалась туманной общая картина закономерностей связей наблюдаемых величин и волн с формой потенциала. Можно было лишь изменять потенциал и какие-либо исходные параметры, повторяя численную процедуру столько раз, сколько требуется рассмотреть варианты.



Подход же обратной задачи (ОЗ) и квантово-механической суперсимметрии (SUSY QM) [7] помог нам выявить сущность механизма, «разрушающего» физические решения. Конечно, не удивительно, что здесь сыграло роль *совпадение частот* колебаний решений и потенциала. Но далеко не тривиально, что такое *точное резонансное совпадение оказывается возможным не в отдельных значениях энергии, а на целых участках исходного (невозмущенного) непрерывного спектра* (создание целых спектральных «просек» — запрещенных зон) (см. рис. 1).

Рис. 1. Разрыв непрерывного спектра при включении периодического потенциального возмущения  $V(x)$ . Спектральная точка  $E_1$ , соответствующая совпадению частот осциллирующей потенциала возмущения и исходного свободного решения ( $\sin kx$ ), «растягивается» в целый непрерывный энергетический резонансный интервал

Это оказалось следствием очень своеобразного резонансного процесса. В отличие от привычного возрастания частоты колебаний волн с энергией, мы выяснили, что периодическому потенциалу удастся как бы «заморозить» резонансные частоты раскачивания *специальных* фундаментальных решений (Флоке) на всем интервале спектральной щели. Это оказалось связанным с тем, что некая средняя *эффективная кинетическая энергия остается неизменной, несмотря на рост полной энергии  $E$* , что и обеспечивает точное резонансное воздействие потенциальных периодов на волны решений не при одном изолированном значении  $E$ , а перманентно во всех точках запрещенной зоны. Точки же спектра разрешенного движения волн, лежавшие на месте образовавшихся разрывов, не просто исчезают, а как бы «сгребаются» в полосы проводимости. Мы используем термин «сгребание» для подчеркивания сгущения (компрессии) непрерывно распределенных точек исходного сплошного спектра свободного движения у краев разрешенных полос. При такой группировке спектральных точек там возрастает спектральная плотность.

Нашу интерпретацию такого сгущения спектральной плотности мы объясним на примере гребенки Дирака — эквидистантных потенциальных дельта-пиков. Будем последовательно рассматривать одну бесконечную прямоугольную яму, затем такую яму удвоенной ширины ( $2a$ ), но разделенную пополам потенциальной перегородкой в виде дельта-пика. Потом перейдем к яме шириной  $L = 4a$  с тремя подобными эквидистантными перегородками, затем — к яме шириной  $L = 8a$  с семью перегородками и т. д. В пределе перейдем к бесконечной периодической системе с полосатым спектром. При переходе от «парциальной» ямы с  $L = a$  к яме с  $L = 2a$  все уровни исходной ямы расщепятся на дублеты. Сила расщепления связана с силой проницаемости перегородки. То же произойдет и на следующем шаге удвоения  $L$ , но каждый раз расщепление будет все меньше, что обусловлено ослаблением некоторой усредненной проницаемости системы при возрастании числа потенциальных перегородок. При этом происходит сгущение состояний вблизи уровней первого дублета.

Сейчас еще недостаточно широко известно среди физиков, что *уравнение Шредингера с периодическими потенциалами почти не имеет периодических решений, за исключением значений энергии, относящихся к точкам зонных границ*. В других же точках раньше решения представлялись совершенно нерегулярными. Только теперь появилось существенно более ясное представление о полной качественной картине поведения всех возможных решений при различных энергиях в разных зонах. Именно *внутри щелей при каждом значении энергии имеются по два специальных реальных решения, хотя и непериодических, но с периодическими узлами колебаний (с растущими или убывающими амплитудами) с частотой периодического потенциала или кратной ей*. У одного из этих решений амплитуда колебаний растет влево, у другого — вправо.

Такое «разбалтывание» решений хотя бы в одну сторону характерно для «физически запрещенного» поведения. Из этих линейно независимых решений, представляющих множество меры нуль среди всех других, можно построить все остальные решения, хотя у последних резонансные свойства скрыты. Узлы одного решения располагаются между узлами другого, а при составлении линейных комбинаций расположение нулей приобретает совершенно нерегулярный характер. Так что в «стогах» таких решений как бы прячутся по паре «иголок» их чисто резонансных составляющих. При этом, несмотря на такой камуфляж, каждая из резонансных составляющих обычных решений подвергается когерентным толчкам от периодического потенциального возмущения на каждом из последующих периодов. Это приводит к «нефизическому экспоненциальному росту» амплитуд их колебаний в обе стороны. Причем это разбалтывание в *разные стороны* происходит так, что произвольные решения стремятся в асимптотике (при  $x \rightarrow \pm\infty$ ) к *чисто* резонансным решениям, т. е. в каждом направлении выживает лишь только одна растущая фундаментальная составляющая в чистом виде. Кстати, и нерегулярное расположение узлов решений переходит на асимптотике в периодическое.

Находкой Блоха и Флоке было выделение *периодического множителя в общем случае непериодических функций* как в разрешенных, так и в запрещенных зонах. Но они не отметили, что только в запрещенных зонах имеется точный резонанс, в то время как в разрешенных зонах из-за нарушения точного совпадения частот колебаний потенциала  $V(x)$  и функций  $\operatorname{Re} \psi(x)$ ,  $\operatorname{Im} \psi(x)$  происходит последовательная смена резонансных режимов вдоль оси  $x$  (рост  $\psi$  чередуется с ее убыванием).

Для выяснения ряда принципиальных вопросов нам достаточно будет ограничиться стационарным одномерным уравнением Шредингера

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

и его матричным многоканальным аналогом.

Обычно даже специалисты не обращают особого внимания на решения в запрещенных зонах, как на «нефизические». А как раз они имеют ключевое значение для понимания проблемы в целом. В них, в частности, заключена разгадка волнового поведения в разрешенных зонах. Это аналогично роли подбарьерного (классически запрещенного) движения с отрицательной кинетической энергией, имеющего принципиальное значение для понятий квантового движения: туннелирования и дискретности спектра связанных состояний. Объясним следующий важный факт, который в дальнейшем будет подкреплён строгим математическим формализмом. Разные *действительные* решения, например со сдвинутыми узлами, чувствуют *один и тот же потенциал как различные эффективные потенциалы*, более или менее отталкивающие (притягивающие), в отличие от случая свободного движения, где сдвиг

решения практически не меняет его свойств (см. рис. 2). Одномерное дифференциальное уравнение Шредингера второго порядка имеет два линейно независимых решения. Достаточно зафиксировать положение одного из узлов для задания решения с точностью до несущественного нормировочного множителя. Для постоянного потенциала  $V$  (в частности, нулевого) имеется непрерывный спектр  $E > V$ . Типичное решение:  $\sin(kx + \alpha)$ ;  $E_1 = k^2$  с фазой  $\alpha$ . Волны обладают различной чувствительностью к локальным значениям потенциала: максимально чувствительны волновые пучности вблизи их экстремумов, а минимально — вблизи узлов действительных решений, т. е., согласно уравнению Шредингера в вышеприведенной форме, изменение локальной интенсивности изгиба  $(d^2/dx^2)\psi(x)$  волновой функции  $\psi(x)$  пропорционально самой функции  $\psi(x)$  как фактору в члене возмущения  $V(x)\psi(x)$  в правой части. Так, к примеру, если экстремум некоторого решения находится в области расположения барьера, то здесь будет превалировать отталкивание: «эффективная потенциальная энергия»  $V_{\text{эфф}}$  возрастает, и для фиксированной полной энергии  $E$  величина эффективной кинетической энергии  $E - V_{\text{эфф}}$  уменьшается, что приводит к увеличению расстояния между узлами. Однако увеличение при этом  $E$  может сохранить разницу  $E - V_{\text{эфф}}$  неизменной.

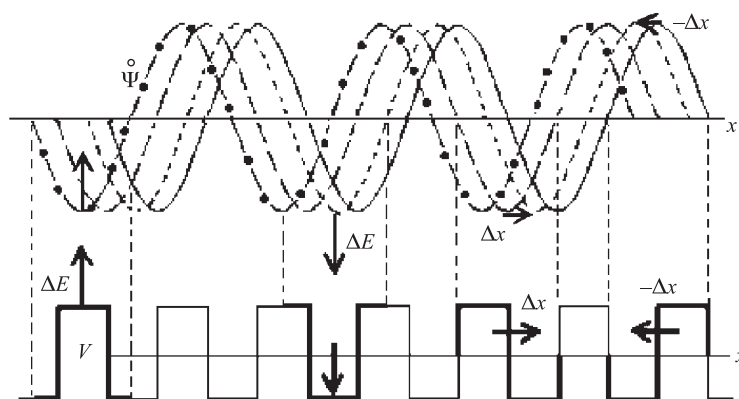


Рис. 2. Вверху: отдельные представители непрерывного множества свободных решений  $\sin(kx + \alpha)$  при энергии совпадения частоты осцилляций с частотой периодического потенциального возмущения, которое предполагается включить. Внизу: пример такого потенциала (потенциал Кронига–Пенни). Все решения  $\Psi$  идентичны с точностью до сдвига по  $x$ . В противоположность свободным волнам, формы возмущенных решений оказываются очень чувствительными к  $x$ -сдвигам и даже могут сохранять одинаковые частоты осцилляций при сдвигах по шкале энергий и существенно разный вид, как показано на рис. 3, 6



Это позволяет *компенсировать изменение энергии* для удержания периода узлов постоянным на всем энергетическом интервале запрещенной зоны. Для этого достаточно сдвигать действительное решение по отношению к периодам потенциала. Так, чтобы межузловое расстояние резонансных решений оставалось неизменным, когда *одновременно происходят сдвиги по энергии вдоль оси  $E$  и сдвиги решетки волновых узлов вдоль оси  $x$* . Здесь, для формирования спектральных щелей, важно еще нарушение симметрии решений на периоде. Ритмичные потенциальные удары по волновым пучностям толкают их вправо или влево тем сильнее, чем больше нарушение симметрии притяжения и отталкивания между соседними узлами волн (см. рис. 3).

Ниже мы также объясним поведение решений и в разрешенных зонах, используя опыт, приобретенный при объяснении механизма образования щелей.

Но сначала мы напомним некоторые точные математические результаты, послужившие основой качественного объяснения формирования спектральных полос. Соответствующие формулы позволят нам также строить новые классы точно решаемых моделей для периодических потенциалов. Эти модели также послужили основой при создании алгоритмов заданного сдвига границ спектральных зон и желаемого изменения степени запрещенности при произвольном значении энергии в спектральной щели.

## 2. СПЕКТРАЛЬНЫЙ КОНТРОЛЬ С ПОМОЩЬЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ И КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ СУПЕРСИММЕТРИИ

Великий архитектор ограничился решением прямой задачи, оставив нам более сложную — обратную задачу.

*В. Теребиж*

Нетрудно испечь пирог, если есть рецепт, но можно ли воссоздать рецепт, отведав пирог?

*Р. Фейнман*

Полные наборы точно решаемых моделей обратной задачи на конечном пространственном интервале [7] способствовали лучшему пониманию решений для *периодических потенциалов на всей оси  $x$* . Но прежде, чем перейти к периодике, напомним некоторые ранее установленные нами важные факты теории. С помощью компьютерной визуализации упомянутых моделей нам удалось найти законы преобразования волновых функций и потенциалов и сформулировать их в виде простейших универсальных правил. Было открыто, что эти правила применимы к элементарным «кирпичикам и блокам», из которых можно строить системы с любыми заданными свойствами [6]. Так, каждая действительная (не комплексная) волна состоит из отдельных

пучностей, ограниченных узлами. Мы напомним здесь *два простых* правила преобразования *одной* волновой пучности [6, 7], после чего становятся ясными и общие правила для произвольных состояний с любым числом пучностей.

Для периодических задач особенно удобно продемонстрировать это на примере задачи на собственные значения на конечном интервале (периоде) с нулевыми граничными условиями (что эквивалентно преобразованию волн в исходной бесконечной прямоугольной яме с вертикальными потенциальными стенками на краях периода). Это позволило существенно расширить класс ранее известных точных решаемых моделей для периодических систем: кусочно-постоянных потенциалов типа потенциалов Кронига–Пенни, дельта-пиков Дирака и конечно-зонных потенциалов. Интересно, что модели, отвечающие всевозможным изменениям отдельных спектральных параметров  $\{c_\nu, E_\nu\}$  задачи Штурма–Лиувилля на периоде, открыли новые возможности контроля физических свойств периодических систем. Эти спектральные веса и собственные значения  $\{c_\nu, E_\nu\}$  оказались удобными рычагами управления границами зон и степенью запрещенности в любой энергетической точке спектральных щелей.

**Первое правило:** для сдвига основного состояния с одной пучностью по шкале энергий  $E$  нужно подействовать потенциальным барьером (ямкой) вблизи экстремума пучности, где волна наиболее чувствительна к потенциальному возмущению  $V$ . Вблизи стенок исходного потенциала могут оказаться ямы/барьеры, где у функции  $\Psi_1(x)$  расположены узлы и где она наименее чувствительна к изменениям потенциала. Такие ямы/барьеры играют вспомогательную роль, например, для удержания остальных уровней энергии  $E_{i \neq 1}$  на прежних местах, чтобы скомпенсировать влияние центральной части возмущения. Это иллюстрация факта, что *разные состояния могут «чувствовать» один и тот же потенциал как разные эффективные потенциалы*. Это правило для одной пучности обобщается на любые состояния (применяется к каждой пучности). Примеры преобразований симметричных потенциалов и соответствующих волновых решений приведены на рис. 3, а, б и рис. 6, полученных визуализацией точных формул (5), (6) и (9) данного обзора, а также на рис. 1.1–1.8 в книге [7].

**Второе правило:** для сдвига пространственной локализации волновой пучности вправо (влево) на конечном интервале требуется потенциальное возмущение в виде блока барьер–ямка (ямка–барьер) (см. рис. 3, в, г, рис. 6, а также рис. 2.1–2.9 в [7]).

Обратите внимание на важную для исследования периодических систем неподвижность узлов основного состояния при непрерывном сдвиге уровня энергии и трансформации отдельного состояния. Это же свойство иллюстрируется на рис. 3, 4 и 6 в следующих разделах. Оно помогло нам найти специальные *резонансные* решения (см. рис. 4) при значениях энергии вну-

три спектральной щели, играющие принципиальную роль в теории волн в периодических структурах.

Точные формулы (теории SUSY QM и обратной задачи) для линейно независимых решений (6), (9), (11) дают нам полные наборы (!) новых точно решаемых периодических моделей. Используя фундаментальные решения для одного выбора цепочки периодов, мы можем построить решения с другим выбором периодов. Таким образом, можно строить произвольные решения, включая те, которые рассматриваются в данном обзоре. То же верно и для потенциала Кронига–Пенни. Периодическое возмущение в общем случае нарушает периодичность узлов действительных решений.

Такие решения, сильно отличающиеся друг от друга (с разными вариациями расположения узлов), при любом значении энергии образуют континуум. Но даже в этом случае можно выбрать в щелях специальные фундаментальные решения с эквидистантными узлами. Из них можно построить любые другие решения.

**2.1. Решения непериодические, но с периодически расположенными узлами.** Рассмотрим механизм образования зон, используя метод, основанный на периодическом продолжении задачи Штурма–Лиувилля на конечном интервале. Граничные условия такой задачи возьмем такими, что решения обращаются в нуль на концах конечного интервала (периода)  $[\varepsilon, a + \varepsilon]$  для любого  $0 < \varepsilon < a$ , а потенциал

$$V^\varepsilon(x) = V_{\text{per}}(x), \quad x \in [\varepsilon, a + \varepsilon], \quad (1)$$

где  $V_{\text{per}}(x)$  есть некий периодический потенциал с периодом  $a$ . Пусть это будет потенциал Кронига–Пенни — все результаты, которые мы получим, не трудно распространить на общий случай одномерного периодического потенциала. Соответствующий спектр на конечном интервале представляет дискретный набор  $\{E_n^\varepsilon\}_{n=0}^\infty$ . Если продолжить периодически потенциал  $V^\varepsilon(x)$ , мы восстановим весь потенциал  $V_{\text{per}}(x)$ , который, разумеется, не зависит от выбора  $\varepsilon$ , но, кроме того, найдем частные решения  $\Psi^{\text{per}}(x, E_n^\varepsilon)$ , отвечающие потенциалу  $V_{\text{per}}(x)$  при энергии  $E_n^\varepsilon$ , используя собственные функции  $\Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)$  вспомогательной задачи Штурма–Лиувилля на конечном интервале.

Непрерывность решения  $\Psi^{\text{per}}(x, E_n^\varepsilon)$  (но еще не непрерывность производной!) всегда гарантируется тем, что  $\Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)$  обращаются в нуль на краях интервала, т. е. в точках сшивания  $na + \varepsilon$  (точках стыковки смежных интервалов). Гладкость же сшивания достигается путем умножения собственной функции на соседнем интервале на множитель, равный по модулю отношению производных на правом и левом краю интервала. Если этот множитель по модулю равен 1, то волновые функции  $\Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)$  гладко сшиваются, так что волновая функция для всего периодического потенциала не расходится и, кроме того, сама является периодической, что служит маркером границы между разрешенной и запрещенной зонами. Этот случай соответствует такому

положению интервала  $[\varepsilon, a + \varepsilon]$ , для которого потенциал  $V^\varepsilon(x)$  симметричен (по отношению к центру интервала). Такой потенциал имеет прямоугольный барьер (яму) посередине, и соответствующие собственные функции также симметричны (либо строго антисимметричны) (см. рис. 3, а, в).

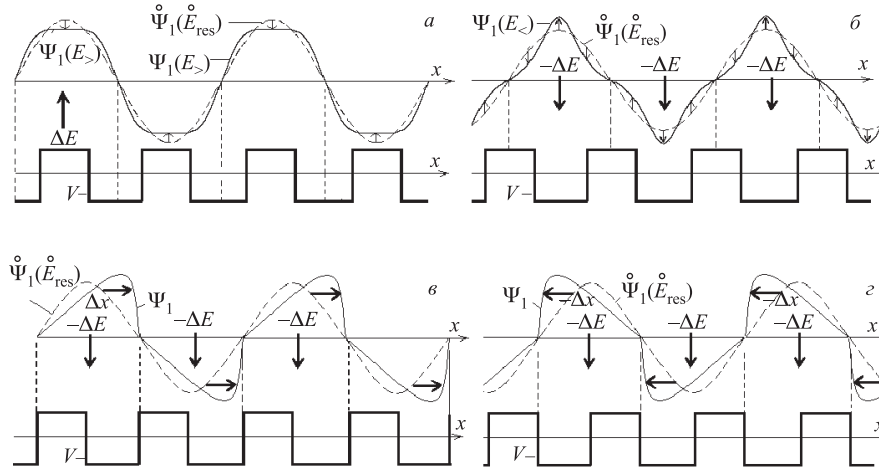


Рис. 3. Волновые функции на верхней  $E_>$  (а) и нижней  $E_<$  (б) границах спектральной щели; примеры решений внутри щели (в, з) на разных периодах без гладкого сшивания. Сшивание производных в узлах требует введения дополнительного умножения на один и тот же фактор на каждом следующем периоде, что приводит к экспоненциальному росту (спаданию) амплитуды осцилляций в спектральной зоне, как показано на рис. 4

Но стоит симметрии потенциала нарушиться (за счет изменения  $\varepsilon$ ),  $\Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)$  теряет свою прежнюю симметрию (см. рис. 3, в, з), что приводит к тому, что

$$\left| \frac{\frac{d}{dx} \Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)|_{x=a+\varepsilon}}{\frac{d}{dx} \Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)|_{x=\varepsilon}} \right| \equiv |\xi_{E_n^\varepsilon}^\varepsilon| \neq 1.$$

Однако, если мы умножим  $\Psi^\varepsilon(x, E_n^\varepsilon)$  на последующем интервале  $[a + \varepsilon, 2a + \varepsilon]$  на  $\xi_{E_n^\varepsilon}^\varepsilon$  и так далее для следующих интервалов  $[(n - 1)a + \varepsilon, na + \varepsilon]$ , мы обеспечим сшивание производных. Поскольку  $\xi_{E_n^\varepsilon}^\varepsilon$  больше не равен единице, умножение на этот фактор приводит либо к постоянному росту, либо к спаданию амплитуды (при  $x \rightarrow \infty$ ) решения на всей оси:

$$\Psi_n^{\text{per}}(x, E_{\text{frbd}}^{(n)}) = (\xi_{E_n^\varepsilon}^\varepsilon)^l \Psi^\varepsilon(x - la, E_n^\varepsilon = E_{\text{frbd}}^{(n)}), \quad (2)$$

$$x \in [la + \varepsilon, (l + 1)a + \varepsilon], \quad l = 0, \pm 1, \dots,$$

где  $E_{\text{frbd}}^{(n)}$  — значение энергии в  $n$ -й запрещенной зоне, а параметр  $\varepsilon$  выбран так, что  $E_n^\varepsilon = E_{\text{frbd}}^{(n)}$ . Таким образом, изменяя параметр  $\varepsilon$  (как бы сканируя периодический потенциал интервалом  $[\varepsilon, a + \varepsilon]$ ), мы добиваемся того, что энергия  $E_n^\varepsilon$  пробегает всю  $n$ -ю спектральную лауну, пока потенциал  $V^\varepsilon(x)$  снова не окажется симметричным, но с обратным расположением барьеров и ям. Это означает, что  $E_n^\varepsilon$  оказывается на границе зоны  $E_{>}^{(n)}$  или  $E_{<}^{(n)}$  (см. соответственно рис. 3, а, б). Дальнейшее изменение  $\varepsilon$  приводит к движению  $E_n^\varepsilon$  в противоположном направлении, так что для любой энергии  $E_{\text{frbd}}^{(n)}$  в запрещенной зоне мы имеем два решения (2), соответствующие двум возможностям:  $E_n^\varepsilon$  пересекает  $E_{\text{frbd}}^{(n)}$ , двигаясь вверх или двигаясь вниз. Нетрудно видеть, что эти два решения  ${}^{(1,2)}\Psi_n^{\text{per}}(x, E_{\text{frbd}}^{(n)})$  являются линейно независимыми, поскольку они построены из вспомогательных собственных решений на конечном интервале с теми же энергиями  $E_n^\varepsilon = E_n^{\varepsilon'}$ , но для *разных* потенциалов  $V^\varepsilon(x) \neq V^{\varepsilon'}(x)$ , которые переходят друг в друга при отражении относительно центра интервала (плюс трансляционный перенос по оси  $x$ ).

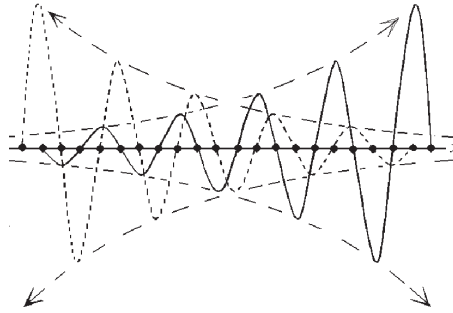


Рис. 4. Фундаментальные «резонансные функции», возрастающая (сплошная линия) и спадающая (пунктирная линия), колеблющиеся с эквидистантными перемежающимися узлами. Период узлов совпадает с периодом потенциального возмущения. Любое решение в спектральной щели можно построить как линейную комбинацию этих резонансных функций при одной и той же энергии

Итак, мы имеем фундаментальную систему действительных решений с периодически расположенными узлами при энергиях, принадлежащих запрещенной зоне. Эти решения асимптотически расходятся (убывают) и, что особенно важно, сохраняют неизменным расстояние между узлами, равное длине периода потенциала  $V_{\text{per}}(x)$  во всей полосе запрещенной зоны (хотя решетка узлов в целом не зафиксирована и движется при изменении  $\varepsilon$ ) (см. рис. 4). Каждое решение в запрещенной зоне представимо в виде комбинации таких двух линейно независимых резонансных решений (2). Так как одно из них расходится при  $x \rightarrow \infty$ , в то время как другое убывает в этом направлении,

и наоборот для  $x \rightarrow -\infty$ , любое решение в периодическом потенциале при энергии, принадлежащей запрещенной зоне, переходит в одно из таких фундаментальных решений на асимптотике  $x \rightarrow \pm\infty$ . На границах лакуны эти решения являются строго периодическими (их рост прекращается).

Еще раз повторим, что указанные решения имеют тот физический смысл, что они позволяют понять резонансную природу запрещенной зоны, а следовательно, зонной структуры спектра периодических систем в целом. Этот резонанс, *который имеет место во всей энергетической лакуне*, есть результат совпадения периода потенциала  $V_{\text{пер}}(x)$  и расстояния между периодически расположенными узлами резонансных решений, что приводит к повторяющимся воздействиям потенциала на волновую функцию, заставляя ее «разбалтываться» все сильнее и сильнее.

Подводя промежуточный итог, мы выяснили, что при симметричном расположении периода потенциала относительно его пиков или ям собственные функции, отвечающие нулевым граничным условиям на краях интервала, оказываются также симметричными. Это позволяет продолжить их периодически на всю ось. Это характерно для решений на верхней  $E_>$  и нижней  $E_<$  границах запрещенной зоны (см. рис. 3, а, г). Рассмотрим собственные функции, отвечающие значениям энергии между  $E_>$ ,  $E_<$  с узлами на границах потенциальных барьеров и ям (см. рис. 3, б, в). В этом случае под каждой пучностью имеется блок ямка–барьер или барьер–ямка, который нарушает симметрию пучности решения, в частности производных в точках узлов. Здесь происходит экспоненциальный рост разбалтывания решений вправо или влево. В общем случае, при другом расположении узлов по отношению к потенциалу, нарушение симметрии возмущенных пучностей приводит к растущим решениям с эквидистантными узлами. Так что вся спектральная лакуна непрерывно заполняется такими фундаментальными решениями с постепенным изменением «степени запрещенности» от нуля на одной из границ зоны до максимума в окрестности ее середины и снова до нуля на другой границе. Это происходит из-за роста/убывания нарушения симметрии возмущающего периодического потенциала *в области между узлами* (обратите особое внимание на постепенное изменение сдвигов состояния по  $E$  и локализации пучностей на оси  $x$ ). Здесь мы имеем дело с редким случаем, когда математически точное доказательство сосуществует с простым, почти очевидным объяснением без формул (на базе вышеуказанных правил и соответствующей интуиции).

Аналогичные рассуждения приложимы к другим запрещенным зонам. Нужно только использовать исходные свободные синусоидальные решения при более высоких энергиях, соответствующих частоте узлов, вдвое (и более раз) превосходящей частоту периодических осцилляций потенциала. Сдвиги следующего уровня энергии  $E_2$  покрывают всю вторую запрещенную зону и т. д.

Можно обобщить эту теорию на случай периодического потенциала, для которого нельзя уже выбрать положение интервала, отвечающее симметричной форме потенциала на этом интервале (рис. 5). Несмотря на эту асимметрию, все-таки можно выбрать интервал так, чтобы соответствующие собственные функции при энергиях  $E_{<,>}$  имели равные по модулю производные на краях интервала. Это будут периодические решения на границах зоны. Действительно, для любого периодического потенциала можно всегда выбрать два каких-нибудь положения интервала  $[\varepsilon, a + \varepsilon]$ , отвечающих большей производной волновой функции либо на левом краю интервала, либо на правом, т. е.  $V^\varepsilon(x)$  сгибают волну больше либо в левом направлении, либо в правом (см. [7, 6]). Следовательно, имеется некоторое промежуточное положение  $[\varepsilon, a + \varepsilon]$ , когда эти производные (на противоположных концах интервала) имеют равное значение.

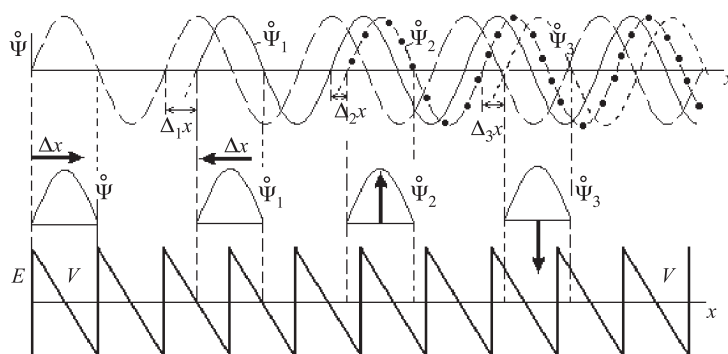


Рис. 5. Возмущение свободного движения несимметричным пилообразным потенциалом. Схематически показаны положения пучностей в первой лакуне в случаях: резонансного решения, растущего направо, налево; периодического решения на верхней и нижней границах первой лакуны

Выше  $E_>$  уже в разрешенной зоне частота узлов возрастает с  $E$ , пока число узлов на одном периоде не увеличится на единицу. Решения в зоне проводимости имеют сменяющиеся режимы роста и спада амплитуд колебаний. Такие *биения* решений в разрешенных зонах можно объяснить следующим образом. Там нет точных аналогов резонансных решений с эквидистантными узлами, кроме предельных случаев границ зон, где решения становятся чисто периодическими. При удалении от границы зоны резонансные условия нарушаются все сильнее и сильнее. Как в случае свободных решений, с ростом полной энергии эффективная кинетическая энергия тоже обязательно возрастает, поскольку потенциальные барьеры исчерпали уже резервы увеличения

средней потенциальной энергии. Так что происходит повышение плотности неэквидистантных узлов. При сдвиге по оси  $x$  происходит монотонное накопление разности фаз колебаний решений по сравнению с колебаниями потенциала. Это ведет к последовательной смене «приближенно-резонансных» режимов: амплитуда колебаний решения то возрастает со сдвигом по оси  $x$ , то начинает убывать и т. д. Обнаружение общей физики в разном поведении волн в соседних зонах было для нас приятным сюрпризом. Такие биения соответствуют произведению двух функций с различными периодами в формуле блоховских волн [11]:

$$\psi(x) = \exp(iKx)u_K(x), \tag{3}$$

где  $K$  есть квазиимпульс, а  $u_K(x)$  имеет тот же период, что и потенциал. Другими словами, в некоторых областях оси  $x$  имеется больше эффективного («взвешенного») притяжения слева и отталкивания справа между узлами решения. Это заставляет решение «разбалтываться» с ростом амплитуды влево. Затем из-за сдвига по фазе осцилляций решения относительно периодов потенциала ситуация сменяется на противоположную: появляется преобладание отталкивания слева и притяжения справа. Так что увеличение и уменьшение амплитуд раскачивания сменяется вдоль оси  $x$ . Длина таких модулированных осцилляций (биений) убывает от  $\infty$  на нижней границе разрешенной зоны до величины порядка потенциального периода на верхней границе.

На границах зон кроме периодических решений имеются также решения с линейно растущими амплитудами осцилляций в обоих направлениях. Это напоминает ситуацию вблизи уровня связанного состояния  $E_\nu$  в конечной потенциальной яме на всей оси  $x$ . Выше и ниже  $E_\nu$  имеется по два линейно независимых решения с экспоненциально растущими (убывающими) абсолютными значениями вправо (влево). А в пределе, при энергии  $E_\nu$ , возникают два решения: одно — растущее в обе стороны, другое, наоборот, спадающее в обе стороны  $x \rightarrow \pm\infty$ .

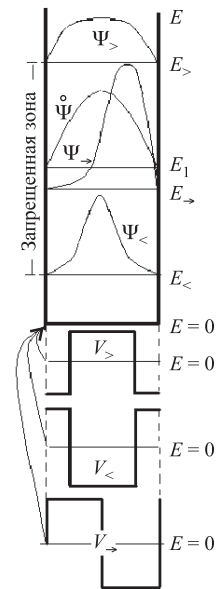


Рис. 6. Сохранение расстояния между узлами для решений, возмущаемых различными потенциалами, отвечающими разным сдвигам периода по оси  $x$  с нулевыми граничными условиями на краях интервала. Показаны возмущенные собственные функции  $\Psi_<$ ,  $\Psi_>$ ,  $\Psi_>$  на различных потенциальных периодах: с ямкой посередине  $V_<$ , с блоком барьер-ямка  $V_>$  и с барьером посередине  $V_>$



На рис. 6 иллюстрируется эквидистантность узлов для резонансных решений при различных энергиях  $E_<$ ,  $E_>$ ,  $E_>$  и различных выборах положения периодов относительно потенциала. На этом рисунке схематически показано влияние различных частей *того же самого* периодического потенциала на конечном интервале одной и той же длины: происходит сдвиг энергии уровня на отрезке запрещенной зоны.

Используем тот факт, что отдельные собственные значения задачи Штурма–Лиувилля на конечном интервале (с симметричным потенциалом) *представляют собой границы зон* в периодически продолженном потенциале. Применим алгоритмы сдвигов этих собственных значений, которые основаны на точно решаемых моделях (ТРМ) обратной задачи и суперсимметрии для сдвигов уже границ зон наперед заданным образом. Итак, удается перенести весь богатый набор ТРМ с потенциалами (5) для задач на отрезке на периодические потенциалы.

Выпишем теперь соответствующие формулы для *точных* потенциалов и собственных функций для квантовых систем на конечном интервале  $x \in [0, \pi]$  в подходе SUSY QM [13–17] для сдвигов отдельного уровня энергии  $E_n$  на новую позицию  $E_n + t$  на энергетической шкале. Для этого требуется двойное преобразование SUSY QM. Уровень энергии  $E_n$  может быть сдвинут только на отрезке энергетической шкалы между положениями его нижнего и верхнего соседа  $[E_{n+1}, E_{n-1}]$ . В предельных же случаях совпадения двух уровней происходит эффективная аннигиляция вырожденных состояний. Детали этого обнаруженного нами явления описаны в [6].

Пусть  $\psi_0(x, E_n)$  является собственной функцией при энергии  $E_n$ , отвечающей потенциалу  $V_0(x)$ ,  $x \in [0, \pi]$ , симметричному относительно центра интервала  $[0, \pi]$ . Выберем в качестве  $\bar{\psi}_0(x, E_n + t)$  «нефизическое» вспомогательное решение с исходным потенциалом, но при сдвинутой энергии  $E_n + t$  с симметрией по отношению к центру ( $x = \pi/2$ ) интервала, противоположной симметрии функции  $\psi_0(x, E_n)$ . Построим с этими решениями вронскиан

$$\theta(x) = \psi'_0(x, E_n)\bar{\psi}_0(x, E_n + t) - \psi_0(x, E_n)\bar{\psi}'_0(x, E_n + t), \quad (4)$$

который не исчезает при всех  $x$  на пространственном и энергетическом интервалах  $[0, \pi]$  и  $E_{n-1} < E_n + t < E_{n+1}$ . Сдвиг уровня  $E_n \rightarrow E_n + t$  при неизменных положениях других уровней  $E_{m \neq n}$  производится симметричной трансформацией потенциала (в вышеуказанном смысле)

$$V(x) = V_0(x) - 2t \frac{d}{dx} \{ \psi_0(x, E_n)\bar{\psi}_0(x, E_n + t)\theta(x)^{-1} \}. \quad (5)$$

Выражения для преобразованных решений (включая их линейно независимых партнеров) при произвольных энергиях  $E$ , которые могут понадобиться для построения новых точно решаемых моделей периодической задачи на всей

оси и собственных функций при энергии  $E_n + t$ , имеют вид

$$\psi(x, E) = \psi_0(x, E) - t(E_n - E)\bar{\psi}_0(x, E_n + t)\theta(x)^{-1} \times \{\psi'_0(x, E_n)\psi_0(x, E) - \psi_0(x, E_n)\psi'_0(x, E)\}, \quad (6)$$

$$\psi(x, E_n + t) = \psi_0(x, E_n)\theta(x)^{-1}. \quad (7)$$

Последняя функция представляет собой собственную функцию при новом значении энергии, сдвинутом на  $t$ , сохраняющую симметрию исходного решения  $\psi_0(x, E_n)$ . Мы докажем дальше, что при периодическом продолжении потенциала  $V(x)$  эта волновая функция будет соответствовать чисто периодическому решению при энергии, отвечающей границе между проводящей и запрещенной зонами. Таким образом, *сдвиг  $E_n$  оказывается эквивалентным сдвигу границы зоны*.

Положим

$$V^{\text{per}}(x + l\pi) = V(x), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (8)$$

для  $x \in [0, \pi]$ . Рассмотрим этот потенциал со вставленной гребенкой — периодически расставленные  $\delta$ -потенциальные барьеры или ямы

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} v\delta(x - m\pi),$$

т. е. следующий периодический потенциал:

$$\tilde{V}_{\text{per}}(x) \equiv \sum_{m=-\infty}^{\infty} v\delta(x - m\pi) + V^{\text{per}}(x).$$

Эта вставка гребенки Дирака выполнена, чтобы исходный периодический потенциал  $\tilde{V}_{\text{per}}(x)$  имел полосатый спектр. Если выбрать периодическую решетку так, чтобы дельта-пики располагались на узлах решетки (на краях интервала  $[\varepsilon, \pi + \varepsilon]$ ), уровень  $E_n^\varepsilon$  будет как раз границей  $n$ -й спектральной щели исходной гребенки Дирака.

Итак, сдвиг  $E_n$  приводит к сдвигу границы  $n$ -й запрещенной зоны, т. е. к новому положению этой границы для  $\tilde{V}_{\text{per}}(x)$  по отношению к ее прежнему положению в исходной гребенке Дирака. Пример такого управления зонами показан на рис. 7, где полосы разрешенного движения обозначены толстыми линиями. Границы зон точно рассчитаны с использованием волновых функций (6) и аналогичных выражений для линейно независимых решений, где вместо  $\psi_0(x, E)$  надо брать соответствующие линейно независимые решения исходного уравнения Шредингера.

Можно брать исходную гребенку Дирака с разными знаками силы  $v$ . Это соответствует двум случаям, когда  $E_n$  является либо верхней границей  $n$ -й запрещенной зоны ( $v < 0$ ), либо нижней ( $v > 0$ ). На рис. 7 показан второй случай. Заметим, что мы можем контролировать только одну из границ зон, а именно отвечающую  $E_n$ . То же относится и к другим лагунам, поскольку их границы (точнее, их часть), относящиеся к  $E_m, m \neq n$ , остаются неподвижными, коль скоро все  $E_m$  удерживаются от сдвигов специальной формой трансформации потенциала (5).

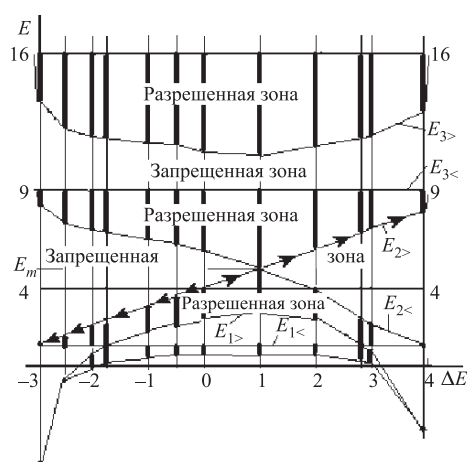


Рис. 7. Сдвиг верхней границы второй разрешенной спектральной зоны (показано стрелками) с исходной гребенкой Дирака  $\delta$ -ям. Обратите внимание на слияние этой зоны с соседней разрешенной, лежащей выше при сдвиге границы на  $\Delta E = 1$  ( $v = 4$ )

Было обнаружено интересное явление слияния разрешенных зон при специальном выборе параметра  $t$ . Разделяющая их лагуна пропадает, что можно увязать с полной компенсацией дельта-потенциалов новым потенциалом  $V_{\text{per}}(x)$  при энергии слияния зон  $E_{\text{merg}}$ , понимаемой в следующем смысле. При варьировании  $\varepsilon$  (см. раздел выше), вне зависимости от того, каким взят параметр  $\varepsilon$ , энергия связанного состояния  $E_n^\varepsilon = E_{\text{merg}}$  остается на том же месте, при этом соответствующая собственная функция все время симметрична (т. е. нет «раскачки»).

### 3. ИЗМЕНЕНИЕ СТЕПЕНИ ЗАПРЕЩЕННОСТИ

ТРМ ОЗ позволяют «управлять» степенью расходимости («запрещенности») решений в любой выбранной точке лагуны, изменяя производную соб-

ственной функции на краю интервала, она же — спектральный весовой фактор  $c_m$  (см. главы 2 и 3 в [7]).

Выпишем сначала *точные* формулы для преобразований потенциалов и решений для квантовых систем на конечном интервале  $x \in [0, \pi]$  в подходе обратной задачи для пространственного сдвига локализации волновых функций (более детальное описание см. в [7]). Именно, дадим формулы для преобразования потенциала и волновых функций, отвечающих вариациям спектрального весового фактора  $c_m$  избранного связанного состояния при энергии  $E_m$  (здесь не требуется сохранение симметрии потенциала). Пусть  $\overset{\circ}{\psi}_m(x)$  обозначает собственную функцию начального гамильтониана, отвечающего  $m$ -му собственному значению, а  $\overset{\circ}{c}_m$  представляет собой исходное значение спектрального весового множителя. Тогда изменение  $\overset{\circ}{c}_m \rightarrow c_m$  дает выражение для преобразованной собственной функции  $\psi_n(x)$  при любом  $n$  для нового потенциала:

$$\psi_n(x) = \overset{\circ}{\psi}_n(x) + \frac{(1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \overset{\circ}{\psi}_m(x)}{1 - (1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \int_0^x \overset{\circ}{\psi}_m^2(y) dy} \int_0^x \overset{\circ}{\psi}_m(y) \overset{\circ}{\psi}_n(y) dy, \quad (9)$$

$$V(x) = \overset{\circ}{V}(x) + 2 \frac{d}{dx} \frac{(1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \overset{\circ}{\psi}_m^2(x)}{1 - (1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \int_0^x \overset{\circ}{\psi}_m^2(y) dy}. \quad (10)$$

Для линейно независимых решений при произвольных энергиях  $E$  имеем

$$\begin{aligned} \psi(x, E) = & \overset{\circ}{\psi}(x, E) + (E_m - E) \frac{(1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \overset{\circ}{\psi}_m(x)}{1 - (1 - c_m^2 / \overset{\circ}{c}_m^2) \int_0^x \overset{\circ}{\psi}_m^2(y) dy} \times \\ & \times \left\{ \overset{\circ}{\psi}'_m(x) \overset{\circ}{\psi}(x, E) - \overset{\circ}{\psi}_m(x) \overset{\circ}{\psi}'(x, E) \right\}. \quad (11) \end{aligned}$$

Важно отметить, что все уровни энергии  $E_n$  и все спектральные весовые множители, кроме одного,  $c_m$ , остаются неизменными.

Теперь, как и в прошлый раз, мы будем периодически продолжать потенциалы на конечном интервале, только задаваемые формулой (10). Изменение  $c_m$  приводит к нарушению симметрии для исходной волновой функции  $\overset{\circ}{\psi}_m(x) = \sqrt{2/\pi} \sin(mx)$  (для  $\overset{\circ}{V}(x) = 0$  на интервале  $[0, \pi]$ ) (см. рис. 2.1–2.9 в книге [7]). В результате волновая функция на всей оси, «считая» из  $\psi_m(x)$ , будет асимптотически расходиться. А параметр  $c_m$  как раз представляет собой показатель скорости расходимости, «запрещенности». В част-

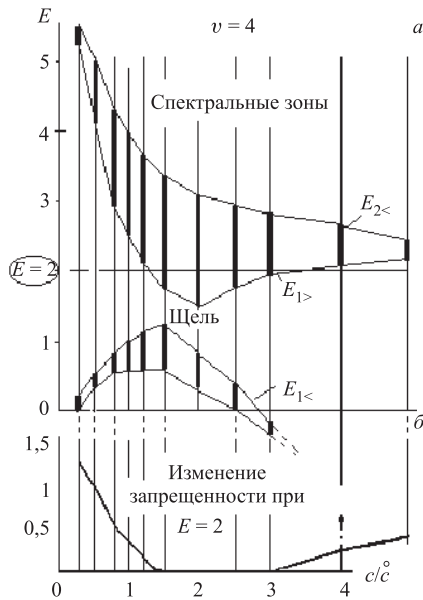


Рис. 8. *а*) Изменения зонной структуры, отвечающие вариациям спектрального весового множителя на одном конце периода  $c/\dot{c}$  в точке энергии  $E = 2$ . Исходный периодический потенциал  $v\delta(x - n\pi)$  представляет собой гребенку пиков Дирака с силой  $v = 4$  и периодом  $\pi$ . Волновая функция в точке  $E = 2$  на каждом периоде есть собственная функция задачи Штурма–Лиувилля с граничными условиями, подобранными так, чтобы данная точка  $E = 2$  являлась одним из собственных значений этой задачи. *б*) Изменения мнимой части квазиимпульса  $\text{Im} K(E)$ , представляющего показатель запрещенности — интенсивность экспоненциального роста амплитуды колебания решений. Из сопоставления *а*) и *б*) видно, что, когда  $E = 2$  попадает в разрешенную зону ( $\sim 1,5 \lesssim c/\dot{c} \lesssim 3$ ), неограниченный рост решений прекращается

ности, можно «разрывать» непрерывный спектр в точке  $E_m$  (при исходном свободном движении).

На рис. 8 представлены результаты вычислений с применением несколько отличной схемы. Именно, сначала выбирается энергия (на рисунке  $E = 2$ ) из лакуны между первой и второй разрешенными зонами для исходной гребенки Дирака  $\sum_{m=-\infty}^{\infty} v\delta(x - m\pi)$  с силой  $v = 4$  и периодом  $\pi$ . А интервал для вспомогательной задачи Штурма–Лиувилля выбирается таким, что дельта-потенциалы оказываются на краях интервала. Поскольку мы берем произвольную энергию, связанное с ней собственное значение существует при однородных граничных условиях, вообще говоря отличных от нулевых:  $\psi'(0, E) + g\psi(0, E) = 0$ ;  $\psi'(\pi, E) + G\psi(\pi, E) = 0$  для некоторых  $g$  и  $G$ . Все же формулы ОЗ для такой задачи аналогичны только что приведенным для нулевых граничных условий (9), (10).

Почти все, что мы нашли для периодических структур (специальные резонансные решения с периодическими узлами в запрещенных зонах, биения в разрешенных зонах, и т. д.), применимо к *конечным* интервалам периодических потенциалов, в частности к резонансному туннелированию сквозь конечное число потенциальных барьеров, расположенных периодически. При этом мультиплеты резонансов служат дискретными аналогами разрешенных зон,

а спектральные щели между мультиплетами отвечают запрещенным зонам. Похоже, что знаменитая модель (атомных и ядерных) оболочек имеет общее в механизме формирования спектра с периодикой (оболочкам отвечают разрешенные зоны, разделенные спектральными щелями). Такие связи систем, рассматривавшихся как далекие по своей физической природе, служили бы упрощению наших представлений о микромире.

Стоит отметить и возможность порождения локализованных связанных состояний в периодических структурах по аналогии с преобразованием свободного движения волн (солитоноподобные потенциалы, полностью прозрачные для блоховских волн). И строятся они как обычные солитоноподобные потенциалы, только в качестве исходных, невозмущенных потенциалов и решений вместо свободных волн и потенциалов  $V(x) = 0$  или  $V(x) = \text{const}$  используются блоховские волны и периодические потенциалы [18, 19]. Кстати, некоторые (конечно-зонные) периодические потенциалы сами служат в нелинейных уравнениях (типа КдФ) в качестве устойчивых волн (решений). А для линейного уравнения Шредингера  $V(x)$ , будучи безотражательными для блоховских решений, обладают прозрачностью, аналогичной солитонобразным потенциалам.

**3.1. Многоканальные системы.** Даже в одноканальном случае новая концепция резонанса оказалась «удивительной». Тем более «поразительно» совпадение частот колебаний жестко зафиксированных элементов матрицы взаимодействия с многими каналовыми функциями  $\Psi_i$ , по-разному зависящими от полной энергии  $E$ . При разных порогах каналовой энергии  $E - \varepsilon_i$  могут сильно различаться даже при одном значении энергии  $E$  (см. также разд. 5). У нас есть надежда, что нам удастся обобщить нашу теорию на системы зацепленных уравнений Шредингера (см. (15)). И в качестве первого шага мы рассмотрим приведенные ниже примеры, иллюстрирующие некоторые существенные стороны сложных систем (см. также разд. 6).

1. Пусть будут равны периодические диагональные элементы  $V_{11}(x) = V_{22}(x)$  матрицы взаимодействия и одинаковы пороги обоих каналов  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ . Для несвязанных независимых каналов развитая одноканальная теория поведения решений обобщается тривиально. Спектральные полосы в каждой из спектральных ветвей отдельных каналов совпадают. Теперь включим симметричное зацепление каналов  $V_{12}(x) = V_{21}(x)$ . Если выбрать одинаковые граничные условия для обоих каналов, получим одинаковые каналовые функции  $\Psi_1(x) = \Psi_2(x)$ . Это позволяет произвести в первом уравнении системы (15) подстановку  $V_{12}(x)\Psi_2(x) \rightarrow V_{12}(x)\Psi_1(x)$  и аналогично поступить со вторым каналом. В результате происходит расщепление каналов (диагонализация матрицы взаимодействия) с новыми эффективными потенциалами  $V_{11\text{eff}} = V_{11}(x) + V_{12}(x)$ ;  $V_{22\text{eff}} = V_{22}(x) + V_{21}(x)$  независимых парциальных уравнений. Спектральные полосы этих разделенных каналов будут совпадать. Общий спектр системы из этих двух одинаковых спектральных

ветвей, очевидно, будет иметь ту же структуру спектральных полос. При выборе разных знаков парциальных волн (отвечающих соответствующим граничным условиям) в новых эффективных потенциалах расцепленных каналов поменяются знаки в линейных комбинациях  $V_{11\text{eff}} = V_{11}(x) - V_{12}(x)$ ;  $V_{22\text{eff}} = V_{22}(x) - V_{12}(x)$ . Все это приведет к двум спектральным ветвям с полосатой структурой (запрещенные зоны расширятся или сужаются).

2. Важным элементом многоканальной грамоты является возможность, несмотря на разность порогов, добиваться в обоих каналах одинаковой частоты экспоненциального разбалтывания (вправо или влево) в запрещенных спектральных зонах специальных фундаментальных решений с эквидистантными узлами. Покажем это на простом двухканальном примере. Пусть пороги двух каналов различаются:  $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ , диагональные элементы матрицы взаимодействия положим равными нулю:  $V_{11}(x) = V_{22}(x) = 0$ , а коэффициенты связи каналов — постоянными:  $V_{12}(x) = V_{21}(x) = \text{const}$ . Выберем нулевые (периодические) граничные условия на краях конечного интервала:  $\Psi_i(0) = \Psi_i(\pi) = 0$ ;  $i = 1, 2$ . Это означает эквидистантность узлов в разных каналах с отличными парциальными канальными энергиями  $E_i = E - \varepsilon_i$ . Такая «парадоксальная» ситуация может осуществляться, несмотря на мешающую резонансу разницу порогов каналов, если «эффективная» («средняя» на периоде) интенсивность изгиба в обоих каналах оказывается равной. Этого можно добиться выбором величины относительной амплитуды парциальных компонент соответствующей задачи Штурма–Лиувилля на периоде. Тогда уравнения в системе (15) (для двух уравнений) можно разделить специальным выбором амплитуд. Заменяя  $\Psi_1(x)$  функцией  $c_1/c_2\Psi_2(x)$  и аналогично для второй канальной функции, имеем

$$\begin{aligned} -\Psi_1''(x) &= (E - \varepsilon_1 - V_{12}c_2/c_1)\Psi_1, \\ -\Psi_2''(x) &= (E - \varepsilon_2 - V_{21}c_1/c_2)\Psi_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Выражения в скобках в правых частях уравнений представляют собой эффективные кинетические энергии каналов, которые становятся равными при

$$c_2/c_1 = \Delta\varepsilon_{12}/2V_{12} \pm \sqrt{\Delta\varepsilon_{12}^2/(4V_{12}^2) + 1}.$$

Так что на этом упрощенном примере становится очевидным, что связь каналов способна к таким неожиданным эффектам (выравниванию частот осцилляций при, казалось бы, препятствующей этому разности порогов). Разница амплитуд функций позволяет компенсировать разницу порогов за счет противодействия членов связи каналов (усиленного в одном канале и ослабленного в другом).

**3.2. Комплексные периодические потенциалы.** Мы уже писали [1, 21] о нашей неожиданной находке (контрпример (!) обычной ситуации) периодических потенциалов без лакун. Был получен непрерывный, а не полосатый

спектр при однократном SUSY QM преобразовании сдвига точки непрерывного спектра в комплексную плоскость. Использовалась исходная комплексная функция (плоская волна  $\exp(ikx)$ ) свободного движения, и получался комплексный периодический потенциал. Эти негамовские распадающиеся состояния имели общее с исследованными Бендером [22] РТ-симметричными системами, с неэрмитовыми гамильтонианами, но имеющими действительные собственные значения (в комплексную плоскость энергий сдвигалась лишь единственная точка). При введении мнимой добавки к периодическому потенциалу пропадали некоторые лакуны [22]. Теперь мы нашли некоторое качественное объяснение явления исчезновения лакун под действием мнимой компоненты потенциала. По-видимому, потенциальная составляющая  $\text{Im } V$  нарушает условия резонансного разбалтывания решений в лакунах, способствуя возникновению разницы в частотах колебаний действительной и мнимой частей решений  $\text{Re } \Psi''$  и  $\text{Im } \Psi''$  (эквидистантности их узлов). В системе связанных уравнений Шредингера (именно мнимая часть потенциала служит здесь связующим коэффициентом)

$$-\text{Re } \Psi'' = (E - \text{Re } V) \text{Re } \Psi + \text{Im } V \text{Im } \Psi,$$

$$-\text{Im } \Psi'' = (E - \text{Re } V) \text{Im } \Psi - \text{Im } V \text{Re } \Psi.$$

Обратите внимание на *противоположность знаков* членов, стоящих справа и осуществляющих сцепление уравнений. Подробнее мы обсудим этот феномен позднее в специальной публикации. В системах многоканальных уравнений, наоборот, связь каналов может способствовать совпадению частот (резонансу пространственных колебаний) парциальных решений с колебаниями матрицы взаимодействия даже при разных порогах парциальных каналов.

**3.3. Классические системы с периодическим во времени возмущением, аналогичные периодическим (в пространстве) квантовым системам.** Мы однажды уже рассматривали классические аналоги точно решаемых квантовых моделей [23, 24]. Представляется интересным познакомиться с соответствующими моделями периодических по времени возмущений, на которых отчетливо видны аналоги разрешенных и запрещенных спектральных зон и механизмы их образования. Здесь с квантовым квазиимпульсом оказывается связана «квасисила». Мы начнем с квантового одноканального случая. Соответствующее уравнение Шредингера

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) - V(x)\psi(x) \tag{13}$$

может быть переписано заменой обозначений

$$\psi \rightarrow z; \quad x \rightarrow t; \quad \frac{d^2}{dx^2} \rightarrow \frac{d^2}{dt^2}; \quad [v(x) - E]\psi \rightarrow F(t, z)$$



так, что оно будет иметь вид уравнения движения для классической частицы под действием силы  $F(t, z)$ , зависящей от времени  $t$  и координаты  $z$ :

$$\ddot{z}(t) = [v(t) - E]z \equiv F(t, z). \quad (14)$$

Это уравнение Ньютона: ускорение частицы, движущейся вдоль оси  $z$ , определяется силой  $F(t, z)$ , линейно зависящей от  $z$ , отвечает осцилляторному потенциалу ( $\sim z^2$ ) с зависящей от времени частотой. В классическом уравнении прежняя квантовая энергия  $E$  и потенциал  $v(x)$  становятся параметром и функцией, характеризующими внешнюю силу. Спектральным зонам на шкале энергий квантовой задачи в классическом случае отвечают однопараметрические (с параметром  $E$ ) семейства моделей с разными потенциалами (силами). Эти потенциалы имеют вид осцилляторных ям при  $[v(t) - E] > 0$  (или перевернутых осцилляторов при  $[v(t) - E] < 0$ ) с зависящей от времени переменной частотой (изменяющимся раствором стенок: их движение напоминает взмахи крыльев бабочки). Таким образом, ньютоновым аналогом периодических потенциалов служат зависящие от времени силы  $[v(t) - E]$ . Здесь  $E$  выступает в роли особого параметра, определяющего режимы устойчивого (соответствует разрешенным зонам) и неустойчивого (соответствует запрещенным зонам) движения. Главное здесь не то, что такие режимы существуют для периодических по времени сил (это еще в XIX в. показал как раз Флоке), а возможность прямого переноса алгоритмов управления зонами в подходе обратной задачи на дуальные классические (ньютоновы) системы.

Аналогичным преобразованием можно получить многоканальные и многочастичные точно решаемые модели с периодическими по времени матрицами взаимодействия, дуальные уравнениям (15) [23]:

$$F_{ij}(t) = \sum_j v_{ij}(t)z_j(t) - E_i z_i(t).$$

Идея о резонансной природе разрывов непрерывного спектра запрещенными зонами послужила толчком к публикации одним из авторов данного обзора (Б. З.) статьи «Концепция всеобщей способности делать открытия» [25].

#### 4. ВОССТАНОВЛЕНИЕ $M$ -КАНАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА ШТУРМА–ЛИУВИЛЛЯ ПО $M + 1$ СПЕКТРУ

Для системы  $M$  связанных уравнений Шредингера установлено соотношение между векторнозначными нормировочными константами и  $M + 1$  спектрами, соответствующими той же матрице потенциалов, но с разными граничными условиями. При специальном выборе граничных условий это уравнение для нормировочных векторов имеет единственное решение. Набор

нормировочных векторов и с ними связанного спектра одной из  $M + 1$  краевых задач однозначно задает матрицу потенциалов в многоканальном уравнении Шредингера.

**4.1. Предварительные замечания.** Рассмотрим систему связанных одномерных уравнений Шредингера

$$-\frac{d^2}{dx^2}\Psi_\alpha(x) + \sum_{\beta} V_{\alpha\beta}(x)\Psi_\beta(x) = (E - \varepsilon_\alpha)\Psi_\alpha(x), \quad \alpha = 1, \dots, M. \quad (15)$$

В этой системе каждое уравнение называется «каналом», а  $\varepsilon_\alpha$  есть энергии каналовых «порогов». Как только  $E \geq \varepsilon_\alpha$ , говорят, что  $\alpha$ -й порог становится открытым. Система (15) является матричным обобщением обычного одномерного уравнения Шредингера. Связанные уравнения Шредингера возникают в единой теории ядерных реакций Фешбаха (см. [26]) и соответствуют так называемому приближению сильной связи (когда в (15) остается конечное число уравнений). В настоящее время этот метод, обновленный и обобщенный (см., например, [8]), находит множество приложений и по праву является одним из наиболее универсальных приемов микроскопического описания систем со многими степенями свободы (ядерная структура и реакции, молекулы и т. д.).

Также разработана и обратная задача для многоканального оператора Шредингера (15) [28–30]. Как и в одноканальном случае, можно однозначно восстановить потенциальную матрицу  $V_{\alpha\beta}(x)$  по спектральной мере, которая, например, для случая конечного интервала задается полным набором собственных значений  $E_n$  и так называемых нормировочных векторов (спектральных весовых векторов)  $\gamma_\alpha(E_n)$ . Такие векторы характеризуют поведение волновых функций  $\Psi_\alpha(x, E_n)$  на одном из краев интервала (или в начале координат для задачи на полуоси и т. д.) (см. также ниже).

В то же время в одноканальном случае у нас имеется больше вариантов постановки обратной задачи. Среди них укажем на обратную задачу для оператора Штурма–Лиувилля на конечном интервале, где вообще нет нормировочных констант. Именно, потенциал однозначно восстанавливается по двум разным спектрам, каждый соответствует отдельной паре однородных граничных условий (с тем же потенциалом) [31]. Были установлены необходимые и достаточные условия существования решения обратной задачи Штурма–Лиувилля по двум спектрам (см., например, [32]).

В статье [33] была предпринята попытка (на основе конечно-разностной аппроксимации) обобщить эту теорему на случай многоканального оператора Штурма–Лиувилля. Эта работа дала саму идею существования такого обобщения в принципе. Несомненно, возможность получения потенциальной матрицы исходя из знания определенного набора спектров внесла бы вклад в теорию обратной задачи. Недавно были получены новые результаты в этой области [34]. В статье [34] было доказано, что  $M + 1$  спектров опреде-

ляют  $V_{\alpha\beta}(x)$  и при определенных условиях можно однозначно восстановить многоканальный оператор Штурма–Лиувилля.

Центральной идеей здесь является вывод соотношения между  $M + 1$  спектрами и  $M$ -компонентным нормировочным вектором  $\gamma_\alpha(E_n)$ , относящимся к одной из  $M + 1$  краевых задач на конечном интервале. В этом случае, располагая двойным набором собственных значений и нормировочных векторов, можно однозначно восстановить матрицу взаимодействия на конечном интервале, используя классическую процедуру обратной задачи Гельфанда–Левитана. Читатель может ознакомиться с многоканальным обобщением обратной задачи (см., например, [28, гл. 9, § 4 «Связанные каналы»).

Следующий подраздел посвящен изложению этих результатов. Мы найдем искомое выражение, которое, однако, не гарантирует единственности решения само по себе. Только при определенном выборе граничных условий искомая формула может быть записана в виде системы линейных алгебраических уравнений, которые дают простой критерий единственности решения и его существования. Для удобства читателя изложение организовано так, чтобы оно шло (насколько это возможно) параллельно стандартному выводу формул обратной задачи по двум спектрам, приведенному в [32, гл. 3].

**4.2. Вывод формулы для нормировочного вектора.** Начнем с предварительных обозначений. Запишем систему (15) в более символическом виде

$$-\frac{d^2}{dx^2}y(x) + \hat{V}(x)y(x) = \lambda y(x), \quad x \in [0, a], \quad (16)$$

где  $y$  обозначает целое векторное (вектор-столбец) решение

$$y(x) \equiv \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \vdots \\ \Psi_M(x) \end{pmatrix}$$

и

$$\hat{V} \equiv V_{\alpha\beta} + \varepsilon_\alpha \delta_{\alpha\beta}, \quad \lambda \equiv E.$$

Потенциальная матрица есть действительная симметричная матрица непрерывных функций,  $x \in [0, a]$ . В этом подразделе «шляпка» всегда будет обозначать матрицу. Далее, дополним уравнение (16) следующими граничными условиями:

$$\begin{cases} y'(0) - \hat{h}y(0) = 0, & y'(a) + \hat{H}y(a) = 0, \\ y'_i(0) - \hat{h}_i y_i(0) = 0, & y'_i(a) + \hat{H}_i y_i(a) = 0, \quad i = 1, \dots, M, \end{cases} \quad (17)$$

где мы полагаем  $\hat{h}$ ,  $\hat{h}_i$  и  $\hat{H}$  симметричными матрицами. Мы обозначаем спектры  $M + 1$  задач (16) и (17) как  $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$  и  $\{\lambda_n^i\}_{n=1}^\infty$  соответственно. В

многоканальном случае нет теоремы о перемежаемости спектров, так что мы дополнительно требуем, чтобы никаких вырождений спектра (или между спектрами) не было.

Обозначим также через  $\hat{\phi}(x, \lambda)$  и  $\hat{\chi}_i(x, \lambda)$  матричные решения уравнения (16), удовлетворяющие следующим начальным условиям:

$$\hat{\phi}(0, \lambda) = \hat{1}, \quad \hat{\phi}'(x, \lambda)|_{x=0} = \hat{h}, \quad \hat{\chi}_i(0, \lambda) = \hat{1}, \quad \hat{\chi}'_i(x, \lambda)|_{x=0} = \hat{h}_i, \quad (18)$$

где штрих обозначает производную по  $x$ . Матричное решение уравнения (16) означает, что каждый столбец матрицы представляет собой вектор-решение, только удовлетворяющее специальному начальному (граничному) условию. Собственные значения краевых задач (16) и (17) совпадают с нулями детерминантов матриц

$$\begin{cases} \hat{\Phi}(\lambda) = \bar{\phi}'(x, \lambda)|_{x=a} + \bar{\phi}(a, \lambda)\hat{H}, \\ \hat{\Phi}_i(\lambda) = \bar{\chi}'_i(x, \lambda)|_{x=a} + \bar{\chi}_i(a, \lambda)\hat{H}, \end{cases} \quad (19)$$

где черта обозначает транспонирование.

Теперь мы вводим нормировочные векторы, связанные со спектром  $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$ :

$$\gamma_{\lambda_n} \equiv \begin{pmatrix} \gamma_1(\lambda_n) \\ \vdots \\ \gamma_M(\lambda_n) \end{pmatrix},$$

такие, что

$$\hat{\phi}(x, \lambda_n)\gamma_{\lambda_n} = y(x, \lambda_n), \quad (20)$$

причем  $y'(x, \lambda_n)|_{x=a} + \hat{H}y(a, \lambda_n) = 0$  и  $\int_0^a \sum_{\alpha=1}^M [\Psi_\alpha(x, \lambda_n)]^2 dx = 1$ . Точно так же для спектров  $\{\lambda_n^i\}_{n=1}^\infty$

$$\gamma_{\lambda_n^i} \equiv \begin{pmatrix} \gamma_1(\lambda_n^i) \\ \vdots \\ \gamma_M(\lambda_n^i) \end{pmatrix},$$

так что

$$\hat{\chi}_i(x, \lambda_n^i)\gamma_{\lambda_n^i} = y_i(x, \lambda_n^i), \quad (21)$$

причем  $y'_i(x, \lambda_n^i)|_{x=a} + \hat{H}y_i(a, \lambda_n^i) = 0$  и  $\int_0^a \sum_{\alpha=1}^M [\Psi_\alpha(x, \lambda_n^i)]^2 dx = 1$ . Введем также функцию  $\gamma_\lambda$  (от  $\lambda$ ), такую, что  $\gamma_\lambda = \gamma_{\lambda_n}$ , когда  $\lambda = \lambda_n$ , и  $\gamma_\lambda = \gamma_{\lambda_n^i}$ , когда  $\lambda = \lambda_n^i$ . Эта функция имеет смысл только в точках  $\lambda_n$  и  $\lambda_n^i$ . Между ними мы располагаем свободой задавать ее произвольно. Мы можем только требовать, чтобы эта функция была непрерывно дифференцируемая, не имела сингулярностей, а также  $\gamma_\lambda \neq 0$ .

Положим

$$f_i(x, \lambda) \equiv \bar{\gamma}_\lambda \bar{\chi}_i(x, \lambda) + m_i(\lambda) \bar{\gamma}_\lambda \bar{\phi}(x, \lambda), \quad (22)$$

где  $m_i(\lambda)$  есть скаляр, и потребуем, чтобы

$$f'_i(x, \lambda)|_{x=a} + f_i(a, \lambda) \hat{H} = 0 \implies \quad (23)$$

$$m_i(\lambda) [\bar{\gamma}_\lambda \bar{\phi}'(x, \lambda)|_{x=a} + \bar{\gamma}_\lambda \bar{\phi}(a, \lambda) \hat{H}] = -[\bar{\gamma}_\lambda \bar{\chi}'_i(x, \lambda)|_{x=a} + \bar{\gamma}_\lambda \bar{\chi}_i(a, \lambda) \hat{H}]. \quad (24)$$

Сравнивая с (19), имеем

$$m_i(\lambda) = -\frac{\bar{\Phi}_i(\lambda) \Phi(\lambda)}{\bar{\Phi}(\lambda) \Phi(\lambda)}, \quad (25)$$

где мы обозначаем  $\bar{\Phi}(\lambda) \equiv \bar{\Phi}(\lambda) \gamma_\lambda$  и  $\bar{\Phi}_i(\lambda) \equiv \bar{\Phi}_i(\lambda) \gamma_\lambda$ .

Далее, применяя известную формулу Грина, имеем

$$\begin{aligned} (\lambda - \lambda_n) \int_0^a f_i(x, \lambda) \hat{\phi}(x, \lambda_n) \gamma_{\lambda_n} dx &= f'_i(x, \lambda)|_{x=0} \hat{\phi}(0, \lambda_n) \gamma_{\lambda_n} - \\ &- f_i(0, \lambda) \hat{\phi}'(x, \lambda_n)|_{x=0} \gamma_{\lambda_n} = \bar{\gamma}_\lambda (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n}, \end{aligned}$$

где мы воспользовались определениями (18), (22) и (25). Последнее равенство следует из того факта, что матрицы в (17) симметричны. С другой стороны,

$$\begin{aligned} (\lambda - \lambda_n) \int_0^a f_i(x, \lambda) \hat{\phi}(x, \lambda_n) \gamma_{\lambda_n} dx &= (\lambda - \lambda_n) \int_0^a \bar{\gamma}_\lambda \bar{\chi}_i(x, \lambda) \hat{\phi}(x, \lambda_n) \gamma_{\lambda_n} dx - \\ &- (\lambda - \lambda_n) \int_0^a \frac{\bar{\Phi}_i(\lambda) \Phi(\lambda)}{\bar{\Phi}(\lambda) \Phi(\lambda)} \bar{\gamma}_\lambda \bar{\phi}(x, \lambda) \hat{\phi}(x, \lambda_n) \gamma_{\lambda_n} dx = \bar{\gamma}_\lambda (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n}. \quad (26) \end{aligned}$$

Перейдем к пределу  $\lambda \rightarrow \lambda_n$ . Тогда уравнение (26) переходит в

$$-\frac{d}{d\lambda} [\bar{\Phi}(\lambda) \Phi(\lambda)]|_{\lambda=\lambda_n} \bar{\gamma}_{\lambda_n} (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n} = 1, \quad (27)$$

где мы воспользовались правилом Лопиталья и определением (20).

Мы докажем, что эту формулу можно переписать в следующем виде:

$$(\lambda_n^i - \lambda_n)^{-1} \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq n}}^{\infty} \frac{\lambda_\mu - \lambda_n}{\lambda_\mu^i - \lambda_n} \bar{\gamma}_{\lambda_n} (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n} = 1. \tag{28}$$

Так как  $\Phi(\lambda)$  и  $\Phi_i(\lambda)$  являются целыми голоморфными функциями, они определяются (с точностью до постоянных множителей) своими нулями и, следовательно, могут быть представлены следующим образом:

$$\Phi(\lambda) = C \prod_{\mu=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_\mu}\right); \quad \Phi_i(\lambda) = C_i \prod_{\nu=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_\nu^i}\right). \tag{29}$$

Подставляя (29) в (27), имеем

$$\frac{1}{\lambda_n} \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq n}}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_\mu}\right) \bar{C}C \over \prod_{\nu=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\lambda_n}{\lambda_\nu^i}\right) \bar{C}_i C \bar{\gamma}_{\lambda_n} (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n} = 1. \tag{30}$$

Нам необходимо выяснить, каково должно быть выражение для  $\bar{C}C/\bar{C}_iC$ . Нам понадобится определенная информация об асимптотическом поведении решений системы уравнений (16). Прежде всего, эти уравнения расцепляются в пределе  $\lambda \rightarrow \infty$ . Так что, как и в одноканальном случае, имеем  $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \hat{\Phi}(\lambda) \{\hat{\Phi}_i(\lambda)\}^{-1} = 1$  и то же для транспонированных матриц. Здесь предел берется для расходящейся последовательности  $\lambda \equiv \lambda(k) = k^{2+\varepsilon} + O(1)$  для любого  $\varepsilon > 0$  и  $k$ , являющегося целым числом и достаточно большим (мы выбираем такую последовательность, чтобы  $\lambda(k)$  не совпадала с  $M + 1$  спектрами хотя бы и в одной точке).

Принимая это во внимание, получаем

$$\frac{\bar{C}C}{\bar{C}_iC} \prod_{\mu=1}^{\infty} \frac{\lambda_\mu^i}{\lambda_\mu} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \prod_{\mu=1}^{\infty} \frac{\lambda_\mu - \lambda}{\lambda_\mu^i - \lambda} = 1. \tag{31}$$

Имеем следующие асимптотические формулы для  $\lambda$  и  $\lambda^i$ :  $\lambda_\mu = (\pi/a)^2 \mu^2 + O(1)$  и то же самое для  $\lambda^i$ . Тогда  $\lambda_\mu^i - \lambda_\mu = O(1)$  и ряд  $\sum_{\mu} |(\lambda_\mu - \lambda_\mu^i)/(\lambda_\mu^i - \lambda)|$  равномерно сходится при  $\lambda \rightarrow \infty$  на множестве  $\mathbb{R} \setminus (\lambda_\mu \cup \lambda_\mu^i)$ . Следовательно,

мы можем перейти к пределу в каждом сомножителе бесконечного произведения

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \prod_{\mu=1}^{\infty} \frac{\lambda_{\mu} - \lambda}{\lambda_{\mu}^i - \lambda} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \prod_{\mu=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{\lambda_{\mu} - \lambda_{\mu}^i}{\lambda_{\mu}^i - \lambda} \right) = 1. \quad (32)$$

Из (32) и (31) можно видеть, что

$$\frac{\bar{C}C}{\bar{C}_i C} \prod_{\mu=1}^{\infty} \frac{\lambda_{\mu}^i}{\lambda_{\mu}} = 1. \quad (33)$$

Наконец, мы можем получить окончательное выражение для  $\gamma_{\lambda_n}$ . Подставляя (33) в (30), имеем формулу (28) — систему  $M$  уравнений ( $i = 1, \dots, M$ ) для определения  $M$  компонент вектор-столбца  $\gamma_{\lambda_n}$ .

В одноканальном случае формула (28) переходит в известное выражение для двух спектров:

$$(\lambda_n^2 - \lambda_n^1)^{-1} \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq n}}^{\infty} \frac{\lambda_{\mu}^1 - \lambda_n^1}{\lambda_{\mu}^2 - \lambda_n^1} (h_2 - h_1) \gamma_{\lambda_n}^2 = 1, \quad (34)$$

где матричные величины становятся скалярами и мы обозначаем индексами 1 и 2 два спектра, определяющие скалярный нормировочный фактор  $\gamma_{\lambda_n}$ .

Система (28) — нелинейная: каждая строка (уравнение) в ней содержит квадратичную форму  $\bar{\gamma}_{\lambda_n} (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n}$ . Следовательно, эти уравнения, вообще говоря, нельзя решить однозначно (в том числе это касается и самой разрешимости). Другими словами, мы должны наложить определенное ограничение на выбор матриц  $\hat{h}_i$ , т. е. на разность  $\hat{h}_i - \hat{h}$ . Среди прочих возможностей мы даем здесь несколько примеров, реализующих однозначную разрешимость системы (28).

и) Симметричная матрица  $\hat{h}_i - \hat{h} \equiv \hat{\xi}^{(i)}$  имеет вид матрицы Якоби:

$$\hat{\xi}^{(i)} = \begin{pmatrix} \xi_{11}^{(i)} & \xi_{12}^{(i)} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \xi_{12}^{(i)} & 0 & \xi_{23}^{(i)} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \xi_{23}^{(i)} & 0 & \xi_{34}^{(i)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \xi_{M-1M}^{(i)} \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \xi_{M-1M}^{(i)} & 0 \end{pmatrix}, \quad (35)$$

где основная диагональ содержит только один ненулевой элемент,  $\xi_{11}^{(i)}$ . Тогда

$$\bar{\gamma}_{\lambda_n} (\hat{h}_i - \hat{h}) \gamma_{\lambda_n} = \xi_{11}^{(i)} \gamma_1(\lambda_n)^2 + 2 \sum_{k \neq 1}^M \xi_{k-1k}^{(i)} \gamma_{k-1}(\lambda_n) \gamma_k(\lambda_n). \quad (36)$$

Вводя новые переменные  $\omega_1 \equiv \gamma_1(\lambda_n)^2$  и  $\omega_k \equiv \gamma_{k-1}(\lambda_n)\gamma_k(\lambda_n)$ ,  $k = 2, \dots, M$ , мы можем следующим образом переписать последнее выражение:

$$\bar{\gamma}_{\lambda_n}(\hat{h}_i - \hat{h})\gamma_{\lambda_n} = \xi_{11}^{(i)}\omega_1 + 2 \sum_{k \neq 1}^M \xi_{k-1k}^{(i)}\omega_k. \tag{37}$$

Тогда (28) становится системой линейных алгебраических уравнений для переменных  $\omega$ . Если  $\omega_1 = \gamma_1(\lambda_n)^2 > 0$ , тогда  $\gamma_1(\lambda_n) = \pm\omega_1^{1/2}$ ,  $\gamma_2(\lambda_n) = \pm\omega_2/\omega_1^{1/2}$  и т.д. Знак перед  $\omega_1^{1/2}$  в уравнении для  $\gamma_1(\lambda_n)$  определяет общий знак для  $\gamma_{\lambda_n}$  и, следовательно, является несущественным: целая векторнозначная волновая функция определяется с точностью до знака ( $\pm$ ). Для ненулевого элемента  $\xi_{ll}^{(i)} \neq 0$ ,  $l \neq 1$ , расположенного в произвольном месте основной диагонали, схема будет аналогичной.

ii) Матрица  $\hat{h}_i - \hat{h} \equiv \hat{\zeta}^{(i)}$  представляется следующим образом:

$$\hat{\zeta}^{(i)} = \begin{pmatrix} 0 & \cdot & 0 & \zeta_{1l}^{(i)} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \zeta_{l-1l}^{(i)} & 0 & \cdot & \cdot \\ \zeta_{1l}^{(i)} & \cdot & \zeta_{ll-1}^{(i)} & \zeta_{ll}^{(i)} & \zeta_{ll+1}^{(i)} & \cdot & \zeta_{lM}^{(i)} \\ \cdot & \cdot & 0 & \zeta_{l+1l}^{(i)} & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & 0 & \zeta_{Ml}^{(i)} & 0 & \cdot & 0 \end{pmatrix}, \tag{38}$$

т.е. матрица содержит один ненулевой столбец и одну ненулевую строку, которые пересекают друг друга там, где расположен элемент  $\zeta_{ll}^{(i)}$ . Для квадратичной формы (используя симметрию  $\hat{h}_i - \hat{h}$ ) имеем

$$\bar{\gamma}_{\lambda_n}(\hat{h}_i - \hat{h})\gamma_{\lambda_n} = \zeta_{ll}^{(i)}\gamma_l(\lambda_n)^2 + 2 \sum_{k \neq l}^M \zeta_{lk}^{(i)}\gamma_l(\lambda_n)\gamma_k(\lambda_n). \tag{39}$$

Вводя новые переменные  $\theta_k \equiv \gamma_l(\lambda_n)\gamma_k(\lambda_n)$ ,  $k \neq l$ , и  $\theta_l \equiv \gamma_l(\lambda_n)^2$ , мы можем теперь снова взглянуть на (28) как на линеаризованную систему:

$$(\lambda_n^i - \lambda_n)^{-1} \prod_{\substack{\mu=1 \\ \mu \neq n}}^{\infty} \frac{\lambda_\mu - \lambda_n}{\lambda_\mu^i - \lambda_n} \left\{ \zeta_{ll}^{(i)}\theta_l + 2 \sum_{k \neq l}^M \zeta_{lk}^{(i)}\theta_k \right\} = 1. \tag{40}$$

Получив  $\theta_i$ , можно тривиально вывести  $\gamma_i(\lambda_n)$ . Конечно, разрешимость в этом случае зависит от того, равен или не равен нулю детерминант для системы (40), а также от условия  $\theta_l > 0$ .



Во всех случаях знание полного набора  $\{\lambda_n, \gamma_{\lambda_n}\}_{n=1}^{\infty}$  позволяет однозначно восстановить матрицы потенциалов по стандартной теории Гельфанда–Левитана (ее многоканальному обобщению).

В заключение отметим, что здесь мы не затронули проблему необходимых и достаточных условий существования решения обратной задачи по  $M + 1$  спектру, что требует специального изучения. Ясно, что нам понадобится тщательно изучить асимптотическое поведение спектров с разными граничными условиями. Это тесно связано с определением класса дифференцируемых функций, к которому должна принадлежать матрица  $V_{\alpha\beta}(x)$ . Таким образом, приведенные результаты представляют собой в некотором смысле промежуточную стадию в исследованиях по затронутой здесь тематике.

## 5. МНОГОКАНАЛЬНЫЕ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

Для развития теории возбуждений в кристаллах могут оказаться полезными точные решения для квазичастиц с дополнительными степенями свободы внутренних (многоканальных) возбуждений.

Суть многоканальной специфики можно уловить, рассмотрев двухканальную систему [27]. Для двух несвязанных каналов с периодическими  $V_{\alpha\alpha}(x)$  имеются две независимые спектральные ветви с энергетическими полосами разрешенного и запрещенного движения с квазимпульсом  $K_{1,2}$ . Например, в случае элементов матрицы взаимодействия в виде гребенки (пиков) Дирака

$$V_{\alpha\alpha}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_{\alpha} \delta(x + na) \text{ для каждого из расцепленных каналов мы имеем}$$

$$\cos(K_{\alpha}a) = \frac{\sin(k_{\alpha}a)V_{\alpha}}{2k_{\alpha}} + \cos(k_{\alpha}a), \quad k_{\alpha} = \sqrt{E - \epsilon_{\alpha}}. \quad (41)$$

Может показаться, что включение слабой связи будет препятствовать распространению волн при энергиях, принадлежащих к запрещенной зоне хотя бы в одном из каналов и даже к разрешенной зоне в другом канале. Действительно, можно, казалось бы, ожидать, что влияние экспоненциального роста компоненты волновой векторной функции в запрещенной зоне будет превалировать и вызывать физически неприемлемую асимптотическую расходимость решений. На самом же деле оказывается, что включение связи каналов лишь несколько меняет расположение разрешенных зон несвязанных каналов. Так что возможен и режим подавления возрастания осцилляций в исходной запрещенной зоне. В действительности имеются два типа обобщенных двухканальных блоховских волн

$$\Psi_{B_{\alpha}}^{(1,2)}(x) = \exp(\pm i\mathcal{K}^{(1,2)}a) \Psi_{B_{\alpha}}^{(1,2)}(x - a) \quad (42)$$

с квазиимпульсом  $\mathcal{K}^{(1,2)}(E)$ , общим для двух каналов даже с разными значениями пороговых энергий. Можно найти такие квазиимпульсы, используя точную модель со следующей периодической дельта-матрицей взаимодействия:

$$V_{\alpha\beta}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_{\alpha\beta}\delta(x + na). \quad (43)$$

При таком выборе  $V_{\alpha\beta}(x)$  имеем

$$\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}a) = \frac{1}{2} \left\{ \cos(K_1a) + \cos(K_2a) \pm \sqrt{[\cos(K_1a) - \cos(K_2a)]^2 + \frac{W^2 \sin(k_1a) \sin(k_2a)}{k_1k_2}} \right\}, \quad (44)$$

где  $W \equiv V_{12} = V_{21}$ ;  $V_{\alpha} \equiv V_{\alpha\alpha}$ , а выражения для  $\cos(K_{1,2}a)$  даны в формуле (41). Так что условие  $|\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}a)| \leq 1$  служит критерием поиска разрешенных зон. На рис. 9 показано, что квазиимпульсы  $\mathcal{K}^{(1,2)}$  близки к тем, которые были до включения связи каналов (для  $W = 1$ ).

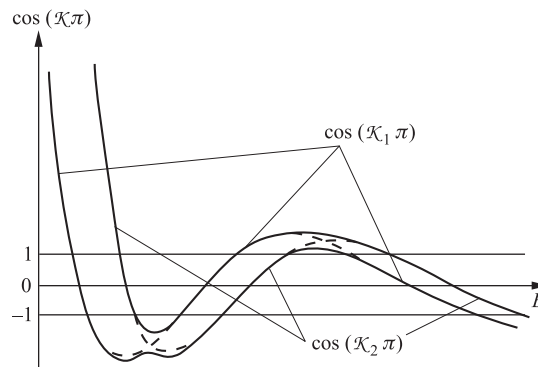


Рис. 9. Функции  $\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}\pi)$  (сплошная линия), определяющие расположение спектральных зон для двухканальных систем. Разрешенные и запрещенные зоны определяются соотношениями  $|\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}\pi)| \leq 1$  и  $|\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}\pi)| \geq 1$  соответственно. Были выбраны следующие значения параметров:  $V_1 = 6$ ;  $V_2 = 5$ ;  $W = 1$ ;  $a = \pi$ ;  $\epsilon_1 = 0$ ;  $\epsilon_2 = 1$ . В случае расцепленных каналов соответствующие кривые  $\cos(\mathcal{K}^{(1,2)}\pi)$  для отдельных каналов сдвигаются друг от друга из-за разницы порогов и имеют пересечения, показанные штриховыми линиями. Включение связи каналов преобразует пересечения (штриховые линии) в квазипересечения, так что имеются верхние и нижние сплошные линии для двух ветвей полосатого спектра. Интервалы сплошных линий, выходящих за пределы  $[-1, 1]$ , соответствуют запрещенным зонам связанной системы уравнений

## 6. НОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОТЕНЦИАЛОВ

В этом разделе доказывается строгое (с точностью до фазовых множителей) равенство проицаемостей ( $T_L(E_{\text{res}}) = T_R(E_{\text{res}})$ ) левых и правых частей  $V_L, V_R$  разрезанного в произвольной пространственной точке  $x'$  потенциала  $V(x)$  при энергиях  $E_{\text{res}}$  резонансной прозрачности. Мы нашли, что имеется континуум ранее не замеченных таких равенств для  $V_L, V_R$ -пар при полной непохожести потенциалов ( $V_L(x) \neq V_R(x)$ ). И этому нашлось поразительно простое и универсальное объяснение. То же верно и для солитонообразных потенциалов, прозрачных при любых энергиях (дополнительное континуальное размножение равенств). Класс потенциалов  $V_L, V_R$  бесконечно расширяется их трансформациями.

Было найдено и обобщение подобной теоремы на случаи произвольных исходных потенциалов  $V(x)$  с  $T \neq 1$  и даже для комплексных потенциалов.

Рассмотрим потенциал  $V(x)$ , резонансно-прозрачный при  $E = E_{\text{res}}$ . Его полная проицаемость  $T(E_{\text{res}} = 1)$  объясняется [1] взаимным уничтожением отраженной волны и «распадающейся назад» из  $V(x)$ , где она задерживается в квазисвязанном состоянии.

«Разрежем» потенциал  $V(x)$  в точке  $x'$  на две части ( $V_L(x) \neq V_R(x)$ ). Волновую функцию в точке бесконечно узкого прямоугольного разреза (с дном на уровне  $E = 0$ ) потенциала всегда можно представить в виде двух волн, двигающихся навстречу друг другу с разными амплитудами (см. рис. 10):

$$A \exp(ikx) + B \exp(-ikx). \quad (45)$$

Убирая левую часть потенциала, можно рассматривать (45) как волны: падающую слева и отраженную от правой части  $V_R(x)$ . Аналогично, оставив лишь левую часть  $V_L(x)$ , можно выражение, сопряженное (45):

$$A^* \exp(-ikx) + B^* \exp(ikx) \quad (46)$$

рассматривать как волны, падающую справа и отраженную от левой части  $V(x)$ . Нормируя падающие волны в обоих случаях, получаем равные по модулю коэффициенты прохождения  $T_R(E_r) = |1/A| = |1/A^*| = T_L(E_r)$  и отражения  $R_R(E_r) = |B/A| = |B^*/A^*| = R_L(E_r)$ .

Для обоснования сказанного приведем следующие рассуждения. Если бы разрез был конечной ширины, действительная и мнимая части волновой функции внутри разреза претерпевали бы изгибы конечной величины. В пределе нулевой ширины разреза и при конечной его глубине эти изгибы исчезают. При этом разрез не возмущает решения.

Можно «разрезать» потенциалы бесконечно узкими прямоугольными разрезами с «дном» выше или ниже  $E = 0$ . Тогда можно доказать, что равенство

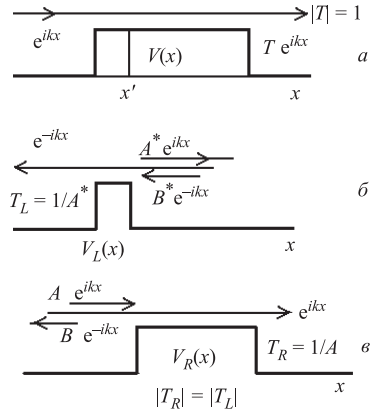


Рис. 10. Разрез в исходном потенциале: а)  $V(x)$  в произвольной точке  $x'$  и картинка прохождения волн отдельно через левую и правую части ( $V_L(x)$  и  $V_R(x)$ ); б, в) в общем случае неравных прямоугольных барьеров. Волны, отвечающие формуле (45) внутри разреза, продолжены бесконечно вправо (б) и влево (в). Их сравнение делает очевидным совпадение прозрачностей  $V_L(x)$  и  $V_R(x)$

проницаемости верно и для потенциалов с дополнительными ступеньками (см. рис. 11).

Можно даже «пришивать» (справа, слева) к  $V_L, V_R$  потенциалы  $V(\mp x)$ , стремящиеся к нулю при  $x \rightarrow \mp\infty$ , не нарушая равенства прозрачностей трансформированных потенциалов  $V_L, V_R + V(\mp x)$  (см. рис. 12).

Можно еще вставлять в разрез резонансно-прозрачного или безотражательного потенциала блоховские волны, что соответствует «пришиванию» к  $V_L, V_R$  периодических хвостов  $V(\mp x)$ .

Предыдущие результаты удастся распространить и на потенциальные возмущения, обладающие 100%-й резонансной проницаемостью для блоховских волн в периодических структурах. При этом в разрез потенциала можно «вставлять» либо невозмущенные блоховские волны, либо функции свободного движения, либо решения потенциалов, спадающих вдаль от разреза.

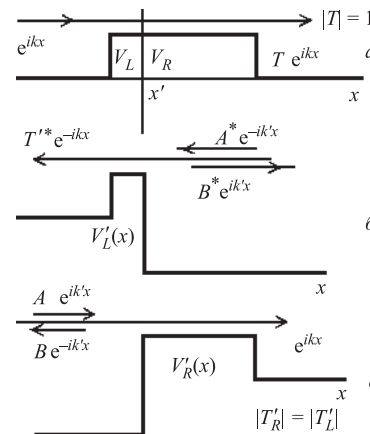


Рис. 11. Более глубокий разрез в исходном потенциале: а)  $V(x)$  в произвольной точке  $x'$  и картинка прохождения волн отдельно через левую и правую части ( $V'_L(x)$  и  $V'_R(x)$ ); б, в) с дополнительными потенциальными ступеньками. Волны, отвечающие формуле (45) внутри разреза, продолжены бесконечно вправо (б) и влево (в)

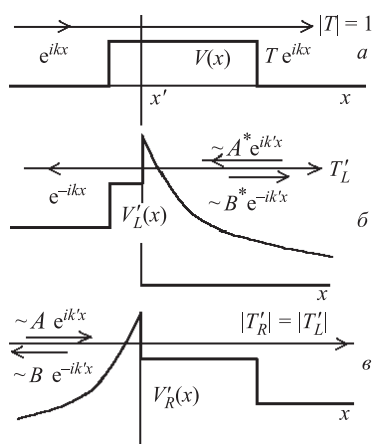


Рис. 12. а) Исходный потенциал  $V(x)$ , разрезанный в произвольной точке  $x'$ . В точке разреза можно вставлять решения уравнения Шредингера с потенциальными добавками (кулоновский, центробежный и другие затухающие на бесконечности потенциалы). Картинки прохождения волн отдельно через левую и правую части  $V'_L(x)$  и  $V'_R(x)$  (б, в) с дополнительными потенциальными возмущениями. Свободные волны в формуле (45) с подправленными  $k \rightarrow k'$ , являющиеся асимптотиками продолжений решений вправо (влево), обозначены соответствующими индексами

Нужно только позаботиться о том, чтобы при избранных энергиях на пути волн не вставали препятствия в виде бесконечных участков зон запрещенного движения волн.

В случае дискретной пространственной переменной  $n$  вместо  $x$  [5, 7] вышеприведенные доказательства можно выполнить с учетом редукции бесконечного непрерывного спектра до конечной разрешенной зоны (или конечного их числа).

Наши рассуждения верны и для комплекснозначных потенциалов, способных породить и поглощать волны. В этом случае резонансно-прозрачным потенциалам соответствуют безотражательные потенциалы, в которых поток входящих волн отличается от потока волн выходящих. Эта разница аддитивно складывается для левой и правой частей и входит в баланс потоков, исправляя нарушение закона сохранения потока.

Было получено обобщение обнаруженного явления на многоканальный случай (случай разделения матрицы взаимодействия на части с равной проницаемостью при фиксированной энергии резонансной прозрачности этой матрицы). При этом ситуация несколько усложняется, хотя одновременно и обогащается рядом новых нюансов. В общем случае несимметричных матриц взаимодействия, в отличие от потенциалов одноканальных, нарушается симметрия проницаемости в противоположные стороны. Кроме того, для резонансной прозрачности требуется специальный выбор (собственно-канальных) граничных условий: отношение амплитуд падающих волн в разных каналах должно быть специальным для прозрачности полной, неразрезанной матрицы взаимодействия [7]. Доказательство равенства прозрачностей левых и правых частей получается лишь для волн, падающих на левую часть справа, а на правую — слева. Это нужно, чтобы обеспечить стопроцентное уничтоже-

ние отражения волнами, распадающимися назад через левую часть, в полном взаимодействии.

По-видимому, в качестве иллюстрации многоканального случая нетрудно провести расчеты соответствующих точных безотражательных моделей [7].

**6.1. Связь проницаемостей левой и правой частей любого потенциала, разрезанного в произвольной точке  $x'$ .** Предыдущие результаты обобщаются на произвольные 1D-потенциалы с проницаемостью  $T$ , в общем случае отличной от 100 %.

Не зависящая от положения точки разреза  $x'$  связь  $T_L, R_L, T_R, R_R$  остается неизменной при любых энергиях непрерывного спектра (возможно также расширение подобных связей на ступеньки). В частном случае полной прозрачности исходного потенциала эти соотношения переходят в рассмотренные ранее равенства  $|T_L(E_{\text{res}})| = |T_R(E_{\text{res}})|$ , выполняющиеся лишь на подмножестве меры нуль произвольных потенциалов.

Рассмотрим волны, падающие на правый изолированный потенциал  $V_R(x)$ , с амплитудами, соответствующими разрезу исходного потенциала  $V(x)$ , в точке  $x'$ :  $A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$  при  $x < x'$  и  $T \exp(ikx)$  при  $x \rightarrow \infty$ , откуда получаем амплитуды

$$A = T/T_R; \quad B = RT/T_R.$$

Рассмотрим волны, падающие на левый изолированный потенциал  $V_L(x)$ , с амплитудами, соответствующими разрезу исходного потенциала  $V(x)$ , в точке  $x'$ :  $\exp(ikx) + R \exp(-ikx)$  при  $x \rightarrow -\infty$ , а также  $A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$  при  $x > x'$ .

В качестве линейно независимого решения воспользуемся комплексно-сопряженным выражением

$$\exp(-ikx) + R^* \exp(ikx), \quad x \rightarrow -\infty;$$

$$A^* \exp(-ikx) + B \exp(ikx), \quad x > x'.$$

Из двух таких решений, поделенных для нормировки падающих волн на  $B$  и  $B^*$  соответственно, можно построить решение, в котором не будет волны, падающей на потенциал  $V(x)$ , например, справа:

$$(1/B - R^*/A^*) \exp(ikx) + (R/B - 1/A^*) \exp(-ikx), \quad x \rightarrow -\infty;$$

$$A/B - B^*/A^* \exp(ikx), \quad x > x'.$$

Нормируя падающую волну на единичный поток и используя выражения для  $A, B$ , находим

$$R_L = \frac{RT_R T^* - T T_R^* R_R}{T_R T^* - R^* T_R^* T R_R}.$$

Аналогично получаем

$$T_L = \frac{(1 - |R_R|^2)R_R T T^*}{T_R T^* - R_R R^* T_R^*}.$$

Оба равенства не зависят явно от значения точки разреза полного потенциала. Они остаются верными при любой конечной глубине разрезающей ямы или высоте разрезающего барьера (случаи дополнительных ступенек, как в рассмотренном выше примере прозрачного полного потенциала). Эти же равенства переходят в пределе прозрачного полного потенциала в доказанные выше равенства

$$|R_L| = |R_R|; |T_L| = |T_R|.$$

Мы нашли некоторые работы, посвященные рассеянию волн на системе нескольких непересекающихся рассеивателей [35–37], однако в них рассматривался 3D-случай, но в приближении малых орбитальных моментов и была зависимость результата от расстояний между рассеивателями.

Эта теория может быть применена к конечно-разностному уравнению Шредингера [5]

$$-\frac{\Psi(n+1) - 2\Psi(n) + \Psi(n-1)}{\Delta^2} + V(n)\Psi(n) = E\Psi(n). \quad (47)$$

Как разрезать потенциал, заданный только в отдельных точках? Мы можем рассмотреть весь потенциал, составленный из двух частей: левая часть — до точки  $n$  и дальше продолженная как  $V(m) = 0$  вместо правой части и правая часть — от точки  $n+1$  и продолженная влево как  $V(m) = 0$ . Таким образом, решения с  $V_R(m)$ ,  $V_L(m)$ ,  $V(m)$  в пространственных точках  $m = n$  и  $m = n+1$  могут быть выбраны одинаковыми. И они однозначно определяют те же коэффициенты  $A$  и  $B$ :

$$A \exp(ikm) + B \exp(-ikm), \quad (48)$$

соответствующие  $V_R(m)$  для  $m < n+2$ ,  $V_L(m)$  для  $m > n-1$ , и  $V(m)$  для  $m = n; n+1$ . Отличие от непрерывного случая состоит в том, что здесь свободное решение (48) определяется на конечном отрезке  $[n, n+1]$ , а не на бесконечно узком «интервале» разреза. Это потому, что конечно-разностное уравнение (47) имеет нелокальный оператор второй производной, так что значения решения в двух соседних точках  $m-1$ ,  $m$  определяют решение в третьей точке  $m+1$  независимо от величины потенциала  $V(m+1)$ . Имеется лишь одна разрешенная зона конечной ширины с непрерывным спектром состояний рассеяния.

## 7. ГИПОТЕЗЫ О РЕЗОНАНСНОЙ ПРИРОДЕ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ И ЭФФЕКТА ДЖОЗЕФСОНА

Рассмотренный нами выше эффект резонансного проникновения через систему двух одинаковых барьеров одной частицы имеет аналог резонансной прозрачности одного барьера для пары одинаковых частиц [1, 38]. Составляющие пару связанные частицы проходят барьер одна за другой, и при ширине барьера, меньшей, чем расстояние между частицами, пара воспринимает один барьер как два.

Возможно, механизм проницаемости потенциального барьера коллективом частиц в сверхпроводящем (сверхтекучем) состоянии связан с резонансным туннелированием и безотражательным движением блоховских волн в периодических структурах: один потенциальный барьер воспринимается конденсатом как периодическое потенциальное возмущение.

Скажем еще иначе: всякое нарушение периодичности внешнего потенциала каким-либо вкраплением воспринимается всем конденсатом как некоторая периодическая добавка к исходному потенциалу, исправляющая дефект периодичности. Более того, прозрачность (сверхпроводимость), возможно, будет и при допущении внутренних степеней свободы конденсата (многоканальные периодические структуры).

Резонансный механизм прозрачности, казалось бы, мог нагляднее объяснить и суть эффекта Джозефсона, и теорию сверхпроводимости. Узкое препятствие (изолятор) на пути сверхпроводящего конденсата («поезда») воспринимается им тоже как периодическое поле.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Захарьев Б. Н., Чабанов В. М.* Спектроскопия, потенциальные барьеры, резонансы (новые успехи квантового дизайна) // ЭЧАЯ. 2002. Т. 33. С. 348–392.
2. *Захарьев Б. Н., Чабанов В. М.* К качественной теории элементарных преобразований одно- и многоканальных квантовых систем в подходе обратной задачи (их конструирование с заданными спектральными параметрами) // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. С. 277.
3. *Захарьев Б. Н., Чабанов В. М.* Качественная теория управления спектрами, рассеянием, распадами // ЭЧАЯ. 1994. Т. 25. С. 1561.
4. *Захарьев Б. Н., Чабанов В. М.* Уроки квантовой интуиции // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21. С. 914.
5. *Захарьев Б. Н.* Дискретная и непрерывная квантовая механика // ЭЧАЯ. 1992. Т. 23. С. 1387.
6. *Zakhariev B. N., Chabanov V. M.* New situation in quantum mechanics (wonderful potentials from the inverse problem) // Inverse Problems. 1997. V. 13. P. R47–R79.



7. *Захарьев Б. Н., Чабанов В. М.* Послушная квантовая механика: новый статус теории в подходе обратной задачи. М.: Регулярная и хаотическая динамика, 2003; English translation: *Zakhariev B. N., Chabanov V. M., Mineev M. A.* Submissive Quantum Mechanics: New Status of the Theory in the Inverse Problem Approach. <http://thsun1.jinr.ru/~zakharev/>
8. *Zakhariev B. N., Suzko A. A.* Direct and Inverse Problems. Heidelberg: Springer, 1990.
9. *Zakhariev B. N., Chabanov V. M.* // Bulletin of the Center of Chemotronics. 2004. No. 3. P. 79–98.
10. *Bloch F.* // Z. Phys. 1928. Bd. 52. S. 555–600.
11. *Flugge S.* Practical quantum mechanics. Heidelberg: Springer, 1971.
12. *Chabanov V. M., Zakhariev B. N., Sofianos S. A.* // Ann. Phys. 1997. V. 6. P. 136–143.
13. *Cooper F., Khare A., Sukhatme U.* // Phys. Rep. 1995. V. 251. P. 267–385.
14. *Sukumar C. V.* // J. Phys. A. 1985. V. 18. P. 2917–2936; 2937–2955; L57–L61; J. Phys. A. 1986. V. 19. P. 2297–2316; J. Phys. A. 1988. V. 21. P. L455–L458; J. Phys. A. 1987. V. 20. P. 2461–2481.
15. *Amado R. D., Cannata F., Dedonder J.-P.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2901–2904; Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 3797–3800.
16. *Baye D.* // J. Phys. A. 1987. V. 20. P. 5529–5540; Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 2738–2741.
17. *Pöschel J., Trubowitz E.* // Inverse Spectral Theory. N. Y.: Acad. Press, 1987.
18. *Chabanov V. M. et al.* // Lecture Notes in Phys. 1997. V. 488. P. 197.
19. *Fernandez D. J. et al.* // Phys. Lett. A. 2002. V. 294. P. 168–174; J. Phys. A. 2002. V. 35. P. 4279–4291.
20. *Khare A., Sukhatme U.* // J. Phys. A. 2004. V. 37, No. 43. P. 10037–10055.
21. *Zakhariev B. N., Chabanov V. M.* // Inverse Problems. 2001. V. 17. P. 683–693.
22. *Bender C. M., Dunne G. V., Meisinger P. N.* Complex Periodic Potentials with Real Band Structure // Phys. Lett. A. 1999. V. 252. P. 272–276.
23. *Zakhariev B. N., Chabanov V. M.* // Few-Body Syst. 2001. V. 30. P. 143–147.
24. *Mielnik B., Reyes M. A.* // J. Phys. A. 1996. V. 29. P. 6009.
25. *Zakhariev B. N.* // Concepts of Physics (in press); <http://www.futuring.de/>; <http://www.erfahrungswissenschaft.de/erf4.html>; То же на рус. яз.: *Захарьев Б. Н.* // НТР (направлено).
26. *Feshbach H.* // Ann. Phys. 1962. V. 19. P. 287–313.
27. *Chabanov V. M., Zakhariev B. N.* // Ann. Phys. 2000. V. 285. P. 1–24.
28. *Chadan K., Sabatier P.* Inverse Problems in Quantum Scattering Theory. 2nd ed. Heidelberg: Springer, 1989; Пер. 1-го изд.: *Шадан К., Сабатье П.* Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. М.: Мир, 1980.

- 
29. *Cox J. R.* // Ann. Phys. 1966. V. 39. P. 216–236; J. Math. Phys. 1967. V. 8. P. 2327–2331.
  30. *Cox J. R., Garcia H. R.* // J. Math. Phys. 1975. V. 16. P. 1402–1409.
  31. *Borg G.* // Acta Math. 1946. V. 78. P. 1–96.
  32. *Левитан Б. М.* Обратные задачи Штурма–Лиувилля. М.: Наука, 1984; English translation: *Levitan B. M.* Inverse Sturm–Liouville Problems. Zeist: VSP, 1987.
  33. *Zakhariev B. N.* // JINR Rapid Commun. 1990. No. 6[45]. P. 41–48.
  34. *Chabanov V. M.* // J. Math. Phys. 2004. V. 45, No. 11. P. 4255.
  35. *Brueckner K. A.* // Phys. Rev. 1953. V. 89. P. 834.
  36. *Барышевский В. Г., Любошиц В. Л., Подгорецкий М. И.* ОИЯИ, Р-2111. Дубна, 1965; *Любошиц В. Л.* // ЖЭТФ. 1967. Т. 52, № 4. С. 926; 1630.
  37. *Амирханов И. В. и др.* // ЯФ. 1967. Т. 6, вып. 1. С. 194.
  38. *Пеньков Ф. М.* // ЖЭТФ. 1999. Т. 115. С. 1993.