

УДК 517.958:530.145.6

© Л. Е. Морозова, Ю. П. Чубурин

«ПОСЛОЙНОЕ» РАССЕЙНИЕ ДЛЯ РАЗНОСТНОГО ОПЕРАТОРА ШРЁДИНГЕРА

В современной физической литературе неоднократно возникала потребность в формулах, позволяющих в квантовой одномерной задаче рассеяния свести вычисление вероятности отражения (прохождения) для потенциала, состоящего из нескольких «барьеров», к вероятностям отражения и прохождения через эти «барьеры». В настоящей работе исследуется задача рассеяния для разностного оператора Шрёдингера с потенциалом, являющимся суммой N функций (описывающих «барьеры» или «слои») с попарно непересекающимися носителями. С помощью уравнения Липпмана–Швингера доказана теорема, позволяющая вычисление амплитуд отражения и прохождения для данного потенциала свести к вычислению амплитуд отражения и прохождения для слагаемых. Для $N = 2$ получены простые явные формулы, осуществляющие такое сведение. Рассмотрены частные случаи четного первого барьера и двух одинаковых четных (после соответствующих сдвигов) барьеров. Разумеется, аналогичные результаты справедливы и для вероятностей отражения и прохождения. Получено простое уравнение для нахождения резонансов двухбарьерной структуры в терминах амплитуд для каждого из двух барьеров.

В статье также приведена иная схема доказательства полученных результатов, основанная на разложении в ряд T -оператора, позволяющая обосновать физические представления о рассеянии на многослойной структуре как о многократном рассеянии на отдельно взятых слоях. При доказательстве утверждений используется известный прием сведения уравнения Липпмана–Швингера к «модифицированному» уравнению в гильбертовом пространстве, что позволяет, в свою очередь, воспользоваться теорией Фредгольма. Конечно, все полученные результаты остаются справедливыми и для «непрерывного» оператора Шрёдингера, а выбор дискретного подхода обусловлен его растущей популярностью в квантовой теории твердого тела.

Ключевые слова: разностный оператор Шрёдингера, уравнение Липпмана–Швингера, коэффициенты отражения и прохождения.

Введение

В физической литературе нередко возникает потребность в формулах, позволяющих в квантовой одномерной задаче рассеяния свести вычисление вероятности отражения (прохождения) для потенциала, состоящего из нескольких «барьеров», к вероятностям отражения и прохождения через эти «барьеры» (см. [1–3]). В настоящей работе такие формулы получены для конечно-разностного оператора Шрёдингера. Кроме того, приведена иная схема доказательства этих формул, позволяющая обосновать физические представления о рассеянии на многослойной структуре как о многократном рассеянии на отдельно взятых слоях [4]. Разумеется, подобные результаты остаются справедливыми и для «непрерывного» оператора, а выбор дискретного подхода обусловлен его растущей популярностью в разделах квантовой физики твердого тела, исследующих транспорт электронов в наноразмерных структурах (см. [5]).

Разностное одномерное уравнение Шрёдингера

$$-\frac{\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))}{h^2} + V(x_n) = \lambda\psi(x_n), \quad n \in \mathbb{Z},$$

где $(\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))/h^2$ является аппроксимацией $\psi''(x_n)$, а $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$ — вещественная функция (потенциал), можно переписать в виде

$$\psi(n+1) + \psi(n-1) + \tilde{V}(n)\psi(n) = \lambda\psi(n), \quad n \in \mathbb{Z},$$

где $\tilde{V}(n) = -h^2 V(x_n)$, $\lambda' = -h^2 \lambda + 2$. Поэтому для простоты обозначений будем рассматривать в дальнейшем самосопряженные ограниченные операторы в $l^2(\mathbb{Z})$ вида

$$(H_0\psi)(n) = \psi(n-1) + \psi(n+1)$$

и $H = H_0 + V$, где $V = V(n)$, $n \in \mathbb{Z}$, — оператор умножения на ненулевую вещественную функцию, удовлетворяющую неравенству

$$|V(x)| \leq C e^{-a|x|}$$

для некоторых $C, a > 0$.

Известно (см. [6]), что спектр оператора H_0 совпадает с отрезком $[-2, 2]$.

Через $R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$ обозначим резольвенту оператора H_0 . Ядро $G_0(n, n', \lambda)$ этой резольвенты (функция Грина), продолженное по параметру λ на интервал $(-2, 2)$, имеет вид (см. [7])

$$G_0(n, n', \lambda) = -\frac{1}{\sqrt{\lambda^2 - 4}} \left(\frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2} \right)^{|n-n'|}, \quad n, n' \in \mathbb{Z}.$$

Заметим, что функция $g(\lambda) = \lambda/2 - \sqrt{(\lambda/2)^2 - 1}$ является обратной функцией к функции Жуковского $w = \frac{1}{2}(z + \frac{1}{z})$ для $z = \lambda/2$. Риманова поверхность \mathcal{M} функции $g(\lambda)$ двулистка. Ее листы склеиваются вдоль интервала $(-2, 2)$, а точки ± 2 являются точками ветвления. Функция $G_0(n, n', \lambda)$ аналитически продолжается на второй лист поверхности \mathcal{M} . Выбор знака перед корнем отвечает экспоненциальному убыванию функции G_0 при $|n - n'| \rightarrow \infty$ для $\lambda > 2$.

Введем обозначение (только для V) $\sqrt{V} = \sqrt{|V|} \operatorname{sgn} V$. Операторнозначная функция

$$\sqrt{|V|} R_0(\lambda) \sqrt{V}$$

принимает значения в множестве операторов Гильберта–Шмидта и аналитически продолжается в достаточно малые окрестности точек интервала $(-2, 2)$ на каждый из листов римановой поверхности \mathcal{M} своей функцией Грина.

Определим угол $\theta \in (-\pi, 0) \cup (0, \pi)$ равенствами $\cos \theta = \lambda/2$, $\sin \theta = -\sqrt{1 - (\lambda/2)^2}$, тогда функция $G_0(n, n', \lambda)$ примет вид

$$G_0(n, n', \theta) = \frac{1}{2i \sin \theta} e^{i\theta|n-n'|}. \quad (1)$$

Для исследования задачи рассеяния будем использовать уравнение Липпмана–Швингера, которое для оператора H имеет вид (см. [8])

$$\psi^\pm(n) = e^{\pm i\theta n} - \frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{i\theta|n-n'|} V(n') \psi^\pm(n'), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

При этом знаки «+» и «-» в показателе экспоненты уравнения (2) отвечают движению квантовой частицы слева направо и справа налево соответственно, а пределы $G_0(n, n', \lambda + i0)$ и $G_0(n, n', \lambda - i0)$ отвечают соответственно изменению $\theta \in (-\pi, 0)$ и $\theta \in (0, \pi)$.

Уравнение (2) рассматривается в классе $l^\infty(\mathbb{Z})$. Для того чтобы использовать аппарат теории гильбертовых пространств, умножим (2) на $\sqrt{|V|}$ и, вводя обозначения

$$\varphi^\pm(n) = \sqrt{|V(n)|} \psi^\pm(n), \quad \varphi_0^\pm(n) = \sqrt{|V(n)|} e^{\pm i\theta n},$$

получим «модифицированное» уравнение Липпмана–Швингера [9] вида

$$\varphi^\pm(n) = \varphi_0^\pm(n) - \frac{\sqrt{|V(n)|}}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{i\theta|n-n'|} \sqrt{|V(n')|} \varphi^\pm(n'), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (3)$$

рассматриваемое в $l^2(\mathbb{Z})$. Обозначим через $K = K(\theta)$ оператор Гильберта–Шмидта с ядром

$$\frac{\sqrt{|V(n)|}e^{i\theta|n-n'|}\sqrt{|V(n')|}}{2i \sin \theta}.$$

В силу компактности K существование ограниченного обратного оператора $(I + K(\theta))^{-1}$ эквивалентно тому, что $\ker(I + K(\theta)) = \{0\}$, причем θ , соответствующие ненулевому ядру, отвечают собственным значениям или резонансам оператора H (см. [7]), причем их множество конечно (это следует из мероморфной теоремы Фредгольма [10] и ограниченности оператора H). Введем обозначение

$$a(\pm, \pm) = -\frac{1}{2i \sin \theta}(\varphi^\pm, \sqrt{V}e^{\pm i\theta n}) = -\frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{\mp i\theta n'} \sqrt{|V(n')|} \varphi^\pm(n') \quad (4)$$

(знаки в правой части изменяются независимо друг от друга, при этом первый знак в обозначении $a(\pm, \pm)$ соответствует знаку в φ^\pm , то есть направлению движения частицы, а второй — знаку в $e^{\mp i\theta n'}$). Совокупность чисел $a(\pm, \pm)$ назовем амплитудой рассеяния (см. [11]), а величины $a(+, -)$ и $1 + a(+, +)$ (величины $a(-, +)$ и $1 + a(-, -)$) — коэффициентами отражения и прохождения для оператора $H = H_0 + V$ при движении слева направо (соответственно справа налево). Как известно (см., например, [8, 12]), вероятность прохождения квантовой частицы через потенциальный барьер равна $P^+ = |1 + a(+, +)|^2$, а вероятность отражения равна $P^- = |a(+, -)|^2$ при движении слева направо (соответственно $P^+ = |1 + a(-, -)|^2$ и $P^- = |a(-, +)|^2$ при движении справа налево).

§ 1. Общая формула

Будем далее предполагать, что $V = \sum_{l=1}^N V_l$ и $\text{supp } V_l \subset [x_l, x_{l+1}]$, $l = 1, \dots, N$, где $-\infty = x_0 < x_1 < \dots < x_N = \infty$ для некоторого натурального N , причем $|V_l(n)| \leq C e^{-a|n|}$ для $l = 1, \dots, N$. Положим $\Omega_l = [x_{l-1}, x_l]$, $\psi_l^\pm = \psi^\pm|_{\Omega_l}$, $l = 1, \dots, N$. Тогда уравнение (3) можно переписать в виде совокупности уравнений

$$\begin{aligned} \psi_l^\pm(n) = e^{\pm i\theta n} - \frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \Omega_l} e^{i\theta|n-n'|} V_l(n') \psi_l^\pm(n') - \frac{e^{i\theta n}}{2i \sin \theta} \sum_{m=1}^{l-1} \sum_{n' \in \Omega_m} e^{-i\theta n'} V_m(n') \psi_m^\pm(n') - \\ - \frac{e^{-i\theta n}}{2i \sin \theta} \sum_{m=l+1}^N \sum_{n' \in \Omega_m} e^{i\theta n'} V_m(n') \psi_m^\pm(n'), \quad n \in \Omega_l. \end{aligned} \quad (5)$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} \varphi_l^\pm(n) = \sqrt{|V_l|} \psi_l^\pm(n), \quad \varphi_{l0}^\pm(n) = \sqrt{|V_l|} e^{\pm i\theta n}, \\ a_m(\pm, \pm) = -\frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \Omega_m} e^{\mp i\theta n'} \sqrt{|V_m(n')|} \varphi_m^\pm(n'), \end{aligned} \quad (6)$$

а через K_l обозначим оператор Гильберта–Шмидта с ядром

$$\frac{\sqrt{|V_l(n)|}e^{i\theta|n-n'|}\sqrt{|V_l(n')|}}{2i \sin \theta}.$$

Из (5) получаем уравнения

$$\varphi_l^\pm(n) = \varphi_{l0}^\pm(n) + \varphi_{l0}^\pm(n) \sum_{m=1}^{l-1} a_m(\pm, +) + \varphi_{l0}^\pm(n) \sum_{m=l+1}^N a_m(\pm, -) - (K_l \varphi_l)(n), \quad l = 1, \dots, N. \quad (7)$$

Далее будем предполагать существование операторов $(1 + K_l)^{-1}$ (см. обсуждение во введении). В силу (7) имеем

$$\begin{aligned} \varphi_l^\pm &= (1 + K_l)^{-1} \varphi_{l0}^\pm + (1 + K_l)^{-1} \varphi_{l0}^+ \sum_{m=1}^{l-1} a_m(\pm, +) + \\ &+ (1 + K_l)^{-1} \varphi_{l0}^- \sum_{m=l+1}^N a_m(\pm, -), \quad l = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (8)$$

Положим $\tilde{\varphi}_l^\pm = (1 + K_l)^{-1} \varphi_{l0}^\pm$, $l = 1, \dots, N$, где $\tilde{\varphi}_l^\pm$ — это решения модифицированного уравнения Липпмана–Швингера для оператора $H_l = H_0 + V_l$. Тогда уравнения (8) примут вид

$$\varphi_l^\pm = \tilde{\varphi}_l^\pm + \left(\sum_{m=1}^{l-1} a_m(\pm, +) \right) \tilde{\varphi}_l^+ + \left(\sum_{m=l+1}^N a_m(\pm, -) \right) \tilde{\varphi}_l^-, \quad l = 1, \dots, N. \quad (9)$$

Скалярно умножая уравнения (9) на $\sqrt{V_l} e^{\pm i\theta n} / 2i \sin \theta$, $l = 1, \dots, N$, и вводя обозначения

$$\tilde{a}_l(\pm, \pm) = -\frac{1}{2i \sin \theta} (\tilde{\varphi}_l^\pm, \sqrt{V_l} e^{\pm i\theta l}),$$

получаем равенства

$$a_l(\pm, \pm) = \tilde{a}_l(\pm, \pm) + \tilde{a}_l(+, \pm) \sum_{m=1}^{l-1} a_m(\pm, +) + \tilde{a}_l(-, \pm) \sum_{m=l+1}^N a_m(\pm, -), \quad l = 1, \dots, N, \quad (10)$$

где величины $\tilde{a}_l(\pm, \pm)$ являются амплитудой рассеяния для оператора H_l .

Соотношения (10) можно рассматривать как систему $4N$ линейных уравнений относительно $4N$ неизвестных $a_l(\pm, +)$ и $a_l(\pm, -)$, $l = 1, \dots, N$. Далее, согласно (4) и (6),

$$a(\pm, \pm) = \sum_{l=1}^N a_l(\pm, \pm). \quad (11)$$

Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 1. *Величины $a(\pm, \pm)$, образующие амплитуду рассеяния для оператора H , выражаются через амплитуды рассеяния $\tilde{a}_l(\pm, \pm)$ для операторов H_l с помощью формулы (11), где $a_l(\pm, \pm)$, $l = 1, \dots, N$, являются решением системы (10).*

§ 2. Случай двух потенциальных барьеров

В данном разделе рассмотрим важный частный случай $V(n) = V_1(n) + V_2(n)$. Для определенности будем рассматривать движение частицы слева направо.

Теорема 2. *Предположим, что $1 - \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -) \neq 0$. Тогда имеют место формулы*

$$\begin{aligned} a(+, +) &= \frac{\tilde{a}_1(+, +)[1 + \tilde{a}_2(+, +)] + \tilde{a}_2(+, +) + \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -)}{1 - \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -)}, \\ a(+, -) &= \tilde{a}_1(+, -) + \frac{\tilde{a}_2(+, -)[1 + \tilde{a}_1(+, +)][1 + \tilde{a}_1(-, -)]}{1 - \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Доказательство. Формулы (12) получаем, используя теорему 1, из (10), (11) для $N = 2$. При этом система (10) легко решается с помощью формул Крамера. \square

Следствие 1. Пусть $V_1(n) = V_1(-n)$. Тогда справедливы формулы

$$a(+, +) = \frac{\tilde{a}_1(+, +)[1 + \tilde{a}_2(+, +)] + \tilde{a}_2(+, +) + \tilde{a}_1(+, -)\tilde{a}_2(+, -)}{1 - \tilde{a}_1(+, -)\tilde{a}_2(+, -)},$$

$$a(+, -) = \tilde{a}_1(+, -) + \frac{\tilde{a}_2(+, -)[1 + \tilde{a}_1(+, +)]^2}{1 - \tilde{a}_1(+, -)\tilde{a}_2(+, -)}.$$

Следствие 2. Пусть, в условиях следствия 1, $V_2(n) = V_1(n - d)$, где $d \in \mathbb{N}$. Тогда

$$a(+, +) = -1 + \frac{[1 - \tilde{a}_1(+, +)]^2}{1 - (e^{i\theta d}\tilde{a}_1(+, -))^2},$$

$$a(+, -) = \tilde{a}_1(+, -) + \frac{e^{2i\theta d}\tilde{a}_1(+, -)[1 + \tilde{a}_1(+, +)]^2}{1 - (e^{i\theta d}\tilde{a}_1(+, -))^2}.$$

Доказательство следствия 2. Имеем

$$\psi_2(n) = e^{i\theta n} - \frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \Omega_2} e^{i\theta|n-n'|} V_2(n') \psi_2(n') = e^{i\theta n} - \frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \Omega_1} e^{i\theta|n-d-n'|} V_1(n') \psi_2(n' + d).$$

Следовательно,

$$\psi_2(n + d) = e^{i\theta d} e^{i\theta n} - \frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \Omega_1} e^{i\theta|n-n'|} V_1(n') \psi_2(n' + d),$$

так что $e^{-i\theta d} \psi_2(n + d) = \psi_1(n)$. Отсюда без труда получаем равенства

$$\tilde{a}_2(+, +) = \tilde{a}_1(+, +), \quad \tilde{a}_2(+, -) = e^{2i\theta d} \tilde{a}_1(+, -),$$

что и доказывает следствие 2. \square

Далее будем обозначать через $R_0(\theta)$ оператор с ядром (1) там, где данная функция Грина существует. В случае $\lambda = 2 \cos \theta \notin [-2, 2]$ оператор $R_0(\theta)$ совпадает с резольвентой. Введем T -оператор для потенциала V равенством [11]

$$T = V(I + R_0(\theta)V)^{-1} = \sqrt{|V|}(I + \sqrt{|V|}R_0(\theta)\sqrt{|V|})^{-1}\sqrt{|V|}. \quad (13)$$

Как следует из (13), оператор T действует из пространства H_{-1} в пространство H_1 , где H_{-1} состоит из функций ψ таких, что $\sqrt{|V|}\psi \in l^2(\mathbb{Z})$, а H_1 — из функций ψ таких, что $\psi = \sqrt{|V|}\varphi$, где $\varphi \in l^2(\mathbb{Z})$.

Пусть $V(n) = V_1(n) + V_2(n)$. Обозначим через T_j оператор для потенциала V_j , $j = 1, 2$. Легко видеть, что имеет место разложение в формальный ряд вида

$$T = V(I + R_0V)^{-1} = (V_1 + V_2)(I - R_0(V_1 + V_2) + R_0(V_1 + V_2)R_0(V_1 + V_2) - \dots) =$$

$$= T_1 + T_2 - T_1R_0T_2 - T_2R_0T_1 + T_1R_0T_2R_0T_1 + T_2R_0T_1R_0T_2 - \dots \quad (14)$$

(В правой части (14) индексы у соседних T_j в произведениях различны.) При замене V на εV ряд (8) сходится по крайней мере при малых ε (в силу (13) нетрудно перейти к операторам в $l^2(\mathbb{Z})$). В дальнейшем предполагаем сходимость всех рядов.

Определим T -матрицу равенством [11]

$$T(\theta, \theta') = (Te^{i\theta n}, e^{i\theta' n}) = ((I + \sqrt{|V|}R_0(\theta)\sqrt{|V|})^{-1}(\sqrt{|V|}e^{i\theta n}), \sqrt{|V|}e^{i\theta' n}).$$

В случае $\theta, \theta' \in (-\pi, \pi) \setminus \{0\}$ очевидно, что (в прежних обозначениях)

$$a(\pm, \pm) = \frac{1}{2i \sin \theta} T(\pm, \pm). \quad (15)$$

Пользуясь (13) и расположением носителей V_j , получаем

$$T_2 R_0(\theta) T_1 e^{i\theta' n} = T_2 \left(\frac{1}{2i \sin \theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{i\theta|n-n'|} T_1 e^{i\theta' n'} \right) = \frac{1}{2i \sin \theta} (T_1 e^{i\theta' n}, e^{i\theta n}) T_2 e^{i\theta n}.$$

Из этой и аналогичных выкладок получаем равенства

$$\begin{aligned} (T_1 R_0 T_2 e^{i\theta n}, e^{-i\theta n}) &= \frac{1}{2i \sin \theta} T_2(\theta, -\theta) T_1(-\theta, -\theta), \\ (T_2 R_0 T_1 e^{i\theta n}, e^{-i\theta n}) &= \frac{1}{2i \sin \theta} T_1(\theta, \theta) T_2(\theta, -\theta), \\ (T_1 R_0 T_2 R_0 T_1 e^{i\theta n}, e^{-i\theta n}) &= \left(\frac{1}{2i \sin \theta} \right)^2 T_1(\theta, \theta) T_2(\theta, -\theta) T_1(-\theta, -\theta) \end{aligned} \quad (16)$$

и так далее. Из (14)–(16) с помощью суммирования рядов нетрудно получить формулы теоремы 2. В частности, выражение $1/(1 - \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -))$ получается суммированием степеней $\tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -)$, то есть порождается многократными последовательными отражениями от потенциалов V_1 и V_2 . Для аналитически продолженных по λ величин $\tilde{a}_1(-, +)$, $\tilde{a}_2(+, -)$ получаем следующее условие резонанса:

$$1 - \tilde{a}_1(-, +)\tilde{a}_2(+, -) = 0.$$

Данный подход распространяется и на случай нескольких потенциалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lousse V., Vigneron J.P. Use of Fano resonances for bistable optical transfer through photonic crystal films // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. 155106 (11 p).
2. Broer W., Hoenders B.J. Natural modes and resonances in a dispersive stratified N-layer medium // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. Vol. 42. 245207 (18 p).
3. Gain J., Sarkar M.D., Kundu S. Energy and effective mass dependence of electron tunnelling through multiple quantum barriers in different heterostructures, 2010, 8 p., arXiv: 1002.1931. <http://arxiv.org/abs/1002.1931>
4. Pendry J.B. Low energy electron diffraction. London: Academic Press, 1974.
5. Датта С. Квантовый транспорт: от атома к транзистору. М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2009. 532 с.
6. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ. М.: Мир, 1977. 360 с.
7. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. Vol. 41. 435205 (11 p).
8. Фадеев Л.Д., Якубовский О.А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. Л.: Изд-во Ленинградского университета, 1980. 200 с.
9. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 3. Теория рассеяния. М.: Мир, 1982. 446 с.
10. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982. 428 с.
11. Тейлор Дж. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М.: Мир, 1975. 567 с.
12. Тинюкова Т.С. Уравнение Липпмана–Швингера для квантовых проволок // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2011. Вып. 1. С. 99–104.

Морозова Людмила Евгеньевна, к. ф.-м. н., доцент, Ижевский государственный технический университет имени М.Т. Калашникова, 426069, Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7.
E-mail: luvial@mail.ru

Чубурин Юрий Павлович, д. ф.-м. н., ведущий научный сотрудник, отдел теоретической физики, Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.
E-mail: chuburin@pti.udm.ru

L. E. Morozova, Yu. P. Chuburin
“Layerwise” scattering for a difference Schrödinger operator

Keywords: difference Schrödinger operator, Lippmann–Schwinger equation, reflection and transmission coefficients.

Mathematical Subject Classifications: 81Q10, 81Q15

In modern physics literature, the need for formulas that permit, in a quantum one-dimensional problem, to reduce a calculation of the reflection (transmission) probability for the potential consisting of some “barriers” to the reflection and transmission probabilities over these “barriers” repeatedly occurred. In this paper, we study the scattering problem for the difference Schrödinger operator with the potential which is the sum of N functions (describing the “barriers” or “layers”) with pairwise disjoint supports. With the help of the Lippmann–Schwinger equation, we proved the theorem which reduces the calculation of the reflection and transmission amplitudes for this potential, to the calculation of the ones for these barriers. For $N = 2$ simple explicit formulas which realized this reduction were obtained. The particular cases for the even first barrier and two identical even (after appropriate shifts) barriers were studied. Of course, the similar results hold for the reflection (transmission) probabilities. We obtained the simple equation for the double-barrier structure resonances in terms of the amplitudes of each of the two barriers.

In the paper, we also present the alternative scheme of the proof of the obtained results which are based on the series expansion of the T-operator. This approach substantiates the physical understanding of the scattering by a multilayer structure as multiple scattering on separate layers. To proof the theorems, the known method of reduction of the Lippmann–Schwinger equation to the “modified” equation in a Hilbert space is used. Of course, all the results remain valid for the “continuous” Schrödinger operator, and the choice of the discrete approach is due to its growing popularity in the quantum theory of solids.

REFERENCES

1. Lousse V., Vigneron J.P. Use of Fano resonances for bistable optical transfer through photonic crystal films, *Phys. Rev. B.*, 2004, vol. 69, 155106 (11 p).
2. Broer W., Hoenders B.J. Natural modes and resonances in a dispersive stratified N-layer medium, *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2009, vol. 42, 245207 (18 p).
3. Gain J., Sarkar M.D., Kundu S. Energy and effective mass dependence of electron tunnelling through multiple quantum barriers in different heterostructures, 2010, 8 p., arXiv: 1002.1931.
<http://arxiv.org/abs/1002.1931>
4. Pendry J.B. *Low energy electron diffraction*, London: Academic Press, 1974.
5. Datta S. *Kvantovyi transport: ot atoma k tranzistoru* (Quantum transport: from the atom to the transistor), Moscow–Izhevsk: Regular and Chaotic Dynamics, Institute of Computer Science, 2009, 532 p.
6. Reed M., Simon B. *Metody sovremennoi matematicheskoi fiziki. I. Funktsionalnyi analiz* (Methods of modern mathematical physics, I. Functional analysis), Moscow: Mir, 1977, 360 p.
7. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential, *J. Phys. A.: Math. Theor.* 2008, vol. 41, 435205 (11 p).
8. Fadeev L.D., Yakubovskii O.A. *Lektsii po kvantovoi mekhanike dlya studentov-matematikov* (Lectures on quantum mechanics for students of mathematics), Leningrad: Leningrad State University, 1980, 200 p.
9. Reed M., Simon B. *Metody sovremennoi matematicheskoi fiziki. III. Teoriya rasseyaniya* (Methods of modern mathematical physics, III. Scattering theory), Moscow: Mir, 1982, 446 p.
10. Reed M., Simon B. *Metody sovremennoi matematicheskoi fiziki. IV. Analiz operatorov* (Methods of modern mathematical physics, IV. Analysis of operators), Moscow: Mir, 1982, 428 p.
11. Taylor J. *Teoriya rasseyaniya. Kvantovaya teoriya nerelativistskikh stolknovenii* (Scattering theory: the quantum theory of non-relativistic collisions), Moscow: Mir, 1975, 567 p.

12. Tinyukova T.S. The Lippmann–Schwinger equation for quantum wires, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2011, no. 1, pp. 99–104 (in Russian).

Received 14.01.2014

Morozova Lyudmila Evgen'evna, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Izhevsk State Technical University, ul. Stencheskaya, 7, Izhevsk, 426069, Russia.

E-mail: luvial@mail.ru

Chuburin Yurii Pavlovich, Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher, Physical Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Kirova, 132, Izhevsk, 426000, Russia.

E-mail: chuburin@ftiudm.ru