

Міністерство освіти і науки України
Львівський національний університет імені Івана Франка

Возняк
Олекса Орестович

УДК 538.94

**СУПЕРСИМЕТРІЯ ТА КВАЗІТОЧНО РОЗВ'ЯЗУВАНІ
ПОТЕНЦІАЛИ ДЛЯ ЧАСТИНКИ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД
КООРДИНАТ**

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Ткачук Володимир Михайлович,
професор кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Ткач Микола Васильович,
завідувач кафедри теоретичної фізики та
комп'ютерного моделювання
Чернівецького національного університету
імені Юрія Федьковича

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Швайка Андрій Михайлович
провідний науковий співробітник відділу квантової
статистики Інституту фізики конденсованих систем
НАН України, м. Львів

Захист відбудеться “16” листопада 2016 р. о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої Вченої ради Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8, фізичний факультет, аудиторія Велика Фізична.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Драгоманова, 5.

Автореферат розіслано “ ” жовтня 2016 р.

Вчений секретар
спеціалізованої Вченої ради
доктор фіз.-мат. наук, професор

 Павлик Б. В.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Відшукування точних розв'язків фізичних задач, зокрема, задач квантової механіки, є актуальним напрямом сучасних досліджень, оскільки саме точні розв'язки дають змогу проаналізувати частинні випадки задачі, асимптотичну поведінку, стійкість та характер зміни отриманих розв'язків у разі зміни параметрів задачі. Вони часто слугують базисом для побудови теорії збурень. Важливими є також випадки, коли досліджувана складна система за певних припущень та наближень стає еквівалентною простішій системі з відомими точними розв'язками.

Однак лише для незначної кількості фізичних задач можна знайти їхні точні розв'язки, тобто виразити в аналітичній формі за допомогою наявних математичних методів через елементарні чи спеціальні функції. Зазвичай точні розв'язки вдається віднайти лише для найпростіших ідеалізованих систем.

Тому виділяють декілька класів задач, для яких можна знайти розв'язки в аналітичній формі. До класу точно розв'язуваних належать задачі, для яких у явному вигляді можна знайти всі власні стани і відповідні власні значення. Інший клас становлять так звані умовно-точно розв'язувані задачі, для яких рівняння на власні значення можна розв'язати у випадку, коли на потенціал накладено певні додаткові умови. Для квазіточно розв'язуваних (КТР) задач можна знайти явно тільки декілька енергетичних рівнів та відповідних хвильових функцій.

Останніми роками для відшукування точних розв'язків рівняння Шредінгера широко використовують суперсиметричний метод. Зокрема, запропоновано новий метод конструювання КТР потенціалів, який використовує математичний апарат суперсиметричної квантової механіки та дає змогу знаходити нові КТР потенціали з одним, двома та трьома відомими розв'язками. Розширення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів на випадок періодичних та випадкових потенціалів є важливим кроком у його вдосконаленні, оскільки саме періодичні та випадкові потенціали найчастіше використовують у квантовомеханічних задачах фізики твердого тіла.

Іншим актуальним науковим напрямом сучасних досліджень є задачі квантової механіки, пов'язані з описом руху частинки в полі дії деякого потенціалу для випадку, коли маса частинки є функцією від координат. Квантові системи з координатно залежною ефективною масою активно вивчають протягом останніх років через можливість застосування отриманих результатів під час пояснення явищ в неоднорідно легованих напівпровідниках, напівпровідникових гетероструктурах, квантових ямах та надґратках. Застосування суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів для частинки з масою, яка залежить від координат, дасть змогу значно збільшити перелік систем із координатно залежною масою, для яких відомі декілька точних розв'язків.

Важливою загальнофізичною проблемою, яка виникає у разі дослідження систем з масою, залежною від координат, є вибір впорядкування некомутативних операторів координати та імпульсу в операторі кінетичної енергії під час побудови квантовомеханічного аналога класичного гамільтоніана зі змінною масою. Залежно від виду системи, яку досліджують, науковці використовують різні упорядкування

зазначених операторів, що може призводити до отримання неоднакових результатів. Тому розв'язання проблеми упорядкування операторів в кінетичній енергії з урахуванням перших принципів квантової механіки є актуальною задачею сучасних фізичних досліджень.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана у Львівському національному університеті імені Івана Франка в рамках держбюджетних тем Фф-38Б «Квантова теорія конденсованих систем із різними типами неупорядкованості» (2000–2001 рр., номер держреєстрації 0100U001446), Фф-150Ф «Розробка нових математичних методів дослідження квантових систем» (2003–2005 рр., номер держреєстрації 0103U001935), Фф-14Ф «Нові методи дослідження квантових систем декількох і багатьох частинок» (2009–2011 рр., номер держреєстрації 0109U002096), Фф-110Ф «Нові ефекти у квантових рідинах і газах та системах з деформованою алгеброю Гайзенберга» (2012–2014 рр., номер держреєстрації 0112U001275) та Фф-30Ф «Класичні і квантові системи з нестандартними комутаційними співвідношеннями і статистиками» (2016 р., номер держреєстрації 0116U001539).

Мета і задачі дослідження. Метою дисертації є розширення суперсиметричного методу генерування КТР потенціалів для квантової частинки зі сталою масою в полі дії періодичного чи випадкового потенціалу та із залежною від координат масою, а також вивчення проблеми впорядкування залежної від координат маси в операторі кінетичної енергії.

Для досягнення цієї мети сформульовано задачі узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів для випадку частинки зі сталою масою в полі дії періодичного та випадкового потенціалу та відшукування нових КТР потенціалів для таких систем; отримання з перших принципів гамільтоніана частинки з масою, залежною від координат, для неоднорідної моделі сильного зв'язку; узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів для випадку частинки з масою, залежною від координат, та відшукування нових КТР потенціалів для таких систем; дослідження умов існування локалізованих та нелокалізованих станів для частинки в полі дії отриманих КТР потенціалів.

Об'єктом дослідження є квантова частинка зі сталою масою чи з масою, залежною від координат, що перебуває в полі дії потенціалу.

Предметом дослідження є квантові стани частинки зі сталою масою чи з масою, залежною від координат, що перебуває в полі дії потенціалу.

Методом дослідження є суперсиметричний метод конструювання квазіточно розв'язуваних потенціалів.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше узагальнено суперсиметричний метод конструювання квазіточно розв'язуваних потенціалів для випадку періодичних потенціалів з двома та трьома точними розв'язками, що дало змогу отримати нові періодичні квазіточно розв'язувані потенціали.

Вперше суперсиметричний метод застосовано до конструювання квазіточно розв'язуваних випадкових потенціалів з одним та двома відомими розв'язками.

Вперше отримано квазіточно розв'язувану випадкову модель Кроніга-Пенні й випадкові тригонометричні потенціали з одним та двома відомими розв'язками.

Вперше отримано в довгохвильовій границі гамільтоніан неоднорідної моделі сильного зв'язку, який описує частинку з масою, залежною від координат та, як наслідок, вперше розв'язано в цьому випадку проблему впорядкування імпульсу та маси в операторі кінетичної енергії.

Вперше запропоновано новий, загальніший вигляд оператора кінетичної енергії для частинки з масою, залежною від координат, який параметризується трьома функціями, добуток яких пов'язаний з масою частинки.

Вперше узагальнено суперсиметричний метод конструювання квазіточно розв'язуваних потенціалів для випадку систем із масою, залежною від координат, та вперше отримано квазіточно розв'язувані потенціали з одним та двома рівнями для частинки з координатно залежною масою.

Вперше в рамках суперсиметричного методу показано можливість існування локалізованих станів у постійному потенціалі для частинки з масою, залежною від координат.

Практичне значення отриманих результатів. Отримані в дисертації результати досліджень мають самостійне значення, пов'язане з розширенням кола задач, для яких вдається знайти точні розв'язки.

Отримані результати можна використати для побудови ефективних алгоритмів чисельного розв'язку конкретних фізичних задач, а також залучити для пояснення експериментальних результатів у фізиці періодичних систем, а саме: твердого тіла, надіраток, неоднорідно легованих напівпровідників та різних наногетеросистем, які ґрунтуються на одночастинкових розв'язках рівняння Шредінґера з періодичними та випадковими потенціалами.

Особистий внесок здобувача. Задачу дослідження сформулював науковий керівник професор В. М. Ткачук. Усі викладені у дисертаційній роботі результати одержано автором самостійно або за його безпосередньої участі. У працях, виконаних спільно з науковим керівником, здобувачу належить:

- узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів для випадку періодичних потенціалів з двома та трьома відомими розв'язками; дослідження умов, які повинна задовольняти генеруюча функція для того, щоб отримані розв'язки рівняння Шредінґера мали фізичний зміст, та для отримання нових періодичних КТР потенціалів [1];
- узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів у разі випадкових потенціалів з одним та двома відомими розв'язками та дослідження умов, які повинна задовольняти генеруюча функція для того, щоб отримані розв'язки рівняння Шредінґера мали фізичний зміст [2];
- знаходження КТР випадкових потенціалів моделі Кроніга-Пенні та випадкових тригонометричних потенціалів з одним та двома точними розв'язками [3];
- узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів з відомими основним та першим збудженим станами для випадку систем з масою, залежною від координат, та отримання нових КТР потенціалів [4];
- узагальнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів з

двома відомими довільними станами для випадку систем з масою, залежною від координат, та отримання нових КТР потенціалів [7];

- дослідження умов наявності локалізованих станів у постійному потенціалі для частинки з масою, залежною від координат [4,7];
- дослідження довгохвильової границі неоднорідної моделі сильного зв'язку та розв'язання в цьому випадку проблеми впорядкування імпульсу та залежної від координат маси в операторі кінетичної енергії, а також отримання нового загального вигляду оператора кінетичної енергії [6].

Результати статей, їхню інтерпретацію та застосовність використаних підходів співавтори обговорювали на паритетних засадах.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, які містяться у дисертаційній роботі, були репрезентовані на IX Міжнародному семінарі з фізики і хімії твердих тіл (Золотий потік / Ченстохова, 2003р.); II Міжнародній науковій конференції "Фізика неупорядкованих систем" (Львів, 2003 р.); IV Міжнародній науковій конференції "Фізика неупорядкованих систем"(Львів, 2008р.); XIII Міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівок та наносистем (Івано-Франківськ, 2011); Міжнародній конференції з поточних проблем у фізиці (Львів, 2012); V Міжнародній науковій конференції "Фізика неупорядкованих систем"(Львів, 2013 р.); XIV Міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівок та наносистем (Івано-Франківськ, 2013 р.); Міжнародній конференції з поточних проблем у фізиці (Львів, 2014).

Подані в роботі результати неодноразово обговорювались на наукових семінарах кафедри теоретичної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Публікації. Результати дисертаційної роботи опубліковано в семи статтях у фахових виданнях [1–7], одному препринті [8] та восьми тезах доповідей на конференціях [9–16].

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел. Обсяг дисертації становить 135 сторінок включно зі списком використаних джерел, що містить 139 найменувань. Результати роботи подано на п'яти рисунках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність досліджень, які становлять зміст дисертації, висвітлено новизну одержаних результатів, подано зв'язок досліджень із науковими темами, у виконанні яких брав участь автор, та окреслено мету і задачі дослідження.

У **першому розділі** коротко подано історію досліджень точно розв'язуваних задач квантової механіки, роль та місце суперсиметричної механіки в пошуку точних розв'язків рівняння Шредінгера, передумови виникнення суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів та результати останніх досліджень систем з масою, залежною від координат.

У **другому розділі** розглянуто суперсиметричну квантову механіку, основні аспекти суперсиметричного методу та його застосування до знаходження основного

та збуджених станів частинки в полі дії періодичного потенціалу.

Суперсиметричний підхід до розв'язку квантовомеханічних задач ґрунтується на зображенні гамільтоніана у вигляді матриці

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}, \quad (1)$$

яка містить суперсиметричні партнери H_+ та H_- . У системі одиниць $\hbar = m = 1$

$$H_{\pm} = B^{\mp} B^{\pm} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\pm}(x), \quad (2)$$

де

$$B^{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\pm \frac{d}{dx} + W(x) \right), \quad (3)$$

$$V_{\pm}(x) = \frac{1}{2} (W^2(x) \pm W'(x)), \quad W'(x) = dW(x)/dx \quad (4)$$

а $W(x)$ – так званий суперпотенціал.

Одним із наслідків суперсиметрії є той факт, що ненульові енергетичні рівні гамільтоніана H є двократно виродженими, тобто всі енергетичні рівні H_+ та H_- ідентичні, за винятком основного стану, а основний стан з $E = 0$ існує тільки для одного з гамільтоніанів $H_{\pm}$, нехай для H_- .

Власні функції операторів H_+ та H_- пов'язані між собою перетворенням

$$B^- \psi_E^-(x) = \sqrt{E} \psi_E^+(x), \quad (5)$$

$$B^+ \psi_E^+(x) = \sqrt{E} \psi_E^-(x). \quad (6)$$

Суперсиметричний метод знаходження розв'язків рівняння Шредінгера дає змогу розв'язати задачу на власні значення гамільтоніана H_-

$$B^+ B^- \psi_E^-(x) = E \psi_E^-(x). \quad (7)$$

Унаслідок того, що суперсиметричні партнери подані у факторизованому вигляді (2), нескладно знайти розв'язок для стану з нульовою енергією гамільтоніана H_-

$$\psi_0^-(x) = C_0^- \exp(-\int W(x) dx), \quad E_0^- = 0 \quad (8)$$

де C_0^- константа нормування.

Для знаходження збудженого стану H_- використано співвідношення

$$H_+ = H_-^{(1)} + \varepsilon = B_1^+ B_1^- + \varepsilon, \quad \varepsilon > 0, \quad (9)$$

тоді

$$V_+(x) = V_-^{(1)}(x) + \varepsilon, \quad (10)$$

$$W^2(x) + W'(x) = W_1^2(x) - W_1'(x) + 2\varepsilon. \quad (11)$$

Хвильова функція гамільтоніана H_+ з енергією $E = \varepsilon$ також є хвильовою функцією стану з нульовою енергією оператора $H_-^{(1)}$ і задовольняє рівняння

$$B_1^- \psi_{\varepsilon}^+(x) = 0. \quad (12)$$

Розв'язком цього рівняння є

$$\psi_{\varepsilon}^+(x) = C^+ \exp(-\int W_1(x) dx), \quad (13)$$

звідки за допомогою (6) отримано

$$\psi_{\varepsilon}^-(x) = C^- W_+(x) \exp(-\int W_1(x) dx), \quad (14)$$

де

$$W_+(x) = W_1(x) + W(x). \quad (15)$$

Щоб одержати явний вигляд хвильових функцій $\psi_0^-(x)$ та $\psi_\varepsilon^-(x)$, потрібно мати суперпотенціали $W(x)$ та $W_1(x)$ у явному вигляді. На жаль, вираз (11) є диференціальним рівнянням Рікатті, для якого неможливо отримати загальний розв'язок для $W(x)$ у разі заданого $W_1(x)$, і навпаки.

У роботі [Tkachuk V.M. // Phys. Lett. A. – 1998. – V.245, Iss.3–4. – P.177–182] запропоновано спосіб підбору пар суперпотенціалів $W(x)$ та $W_1(x)$ так, щоб задовольнити умову (11). Згідно з цим способом після введення нових величин

$$W_+(x) = W_1(x) + W(x), \quad (16)$$

$$W_-(x) = W_1(x) - W(x), \quad (17)$$

рівняння (11) записано у вигляді

$$W'_+(x) = W_-(x)W_+(x) + 2\varepsilon. \quad (18)$$

Його можна розв'язати відносно $W_-(x)$ у разі заданого $W_+(x)$, і навпаки. У дисертації використано розв'язок

$$W_-(x) = \frac{W'_+(x) - 2\varepsilon}{W_+(x)}, \quad (19)$$

тоді

$$W(x) = \frac{1}{2} \left(W_+(x) - \frac{W'_+(x) - 2\varepsilon}{W_+(x)} \right), \quad (20)$$

$$W_1(x) = \frac{1}{2} \left(W_+(x) + \frac{W'_+(x) - 2\varepsilon}{W_+(x)} \right), \quad (21)$$

де $W_+(x)$ є генеруючою функцією для суперпотенціалів.

Сингулярності суперпотенціалів $W(x)$ та $W_1(x)$ в точках x_0 , де значення генеруючої функції перетворюється в нуль, усунуто вибором параметра ε у вигляді:

$$W'_+(x_0) = \pm 2\varepsilon. \quad (22)$$

Отож, вибираючи різні генеруючі функції $W_+(x)$, за допомогою (4) ми отримуємо КТР потенціали $V_\pm(x)$, для яких відомі в аналітичному вигляді хвильові функції $\psi_0^-(x)$ та $\psi_\varepsilon^-(x)$ двох рівнів з енергіями $E = 0$ та $E = \varepsilon$, відповідно, де ε визначаємо (22). Такий спосіб отримав назву суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів.

У цьому розділі суперсиметричний метод також узагальнено на випадок систем із періодичним суперпотенціалом $W(x+L) = W(x)$, який дає періодичний потенціал $V_\pm(x+L) = V_\pm(x)$ для $-\infty < x < +\infty$.

Для періодичних систем хвильові функції мають блохівський вигляд

$$\psi(x+L) = e^{ikL}\psi(x), \quad (23)$$

де L – період потенціалу, у якому рухається електрон, k – квазіімпульс, який змінюється в інтервалі $kL = 0, \pi$.

Згідно з осциляційною теоремою енергетичний спектр періодичних систем має зонний характер, тобто власні значення утворюють смуги (зони) дозволених значень енергії $[E_0, E_1], [E_1', E_2], \dots$, відокремлених зонами заборонених значень енергії. Осциляційна теорема також стверджує, що для періодичного потенціалу власні функції, які відповідають границям зон на інтервалі $[0, L]$, не мають вузлів для основного стану, мають один вузол для першого збудженого стану тощо.

Суперпотенціал у цьому випадку також є періодичною функцією і повинен задовольняти співвідношення

$$\int_0^L W(x) dx = 0, \quad (24)$$

яке призводить до обмеженості хвильових функцій.

Виконаний у роботі аналіз дав змогу визначити умови, які повинна задовольняти періодична генеруюча функція $W_+(x)$ для того, щоб отриманий потенціал $V_-(x)$ був несингулярним, а розв'язки рівняння Шредінгера мали фізичний зміст, а також отримати нові КТР періодичні потенціали, для яких в аналітичному вигляді відомі два власні стани. Зокрема, для того щоб отримані хвильові функції були обмеженими, генеруюча функція $W_+(x)$ повинна бути непарною. Для того щоб отриманий потенціал був несингулярним, у точках x_0 , де функція $W_+(x)$ має прості нулі, повинна виконуватись умова $W'_+(x_0) = \pm 2\varepsilon$, а в точках x_p , де функція $W_+(x)$ має прості полюси, функція $W_+(x)$ повинна мати поведінку $-1/(x - x_p)$ чи $-3/(x - x_p)$.

У цьому розділі також наведено в явному вигляді отримані в рамках суперсиметричного методу КТР періодичні потенціали з двома відомими станами та відповідні до них розв'язки рівняння Шредінгера, один з яких був раніше отриманий А.Турбінером, а два інших знайдені вперше.

У роботі [Т.В. Kuliу, V.M. Tkachuk // J. Phys. A. – 1999. – V.32, No.11. – P.2157 – 2169] було запропоновано розширення суперсиметричного способу конструювання КТР потенціалів для отримання потенціалів з трьома відомими станами.

У загальному випадку система рівнянь Рікатті, які пов'язують між собою суперпотенціали суперсиметричних партнерів, має вигляд

$$W_n^2(x) + W_n'(x) = W_{n+1}^2(x) + W_{n+1}'(x) + 2\varepsilon_n. \quad (25)$$

Для випадку $n = 2$

$$\begin{aligned} W_0^2(x) + W_0'(x) &= W_1^2(x) + W_1'(x) + 2\varepsilon_0, \\ W_1^2(x) + W_1'(x) &= W_2^2(x) + W_2'(x) + 2\varepsilon_1, \end{aligned} \quad (26)$$

зручно ввести нові функції

$$\begin{aligned} W_+(x) &= W_1(x) + W_0(x), & W_-(x) &= W_1(x) - W_0(x), \\ \tilde{W}_+(x) &= W_2(x) + W_1(x), & \tilde{W}_-(x) &= W_2(x) - W_1(x), \end{aligned} \quad (27)$$

через які суперпотенціали виражають як

$$\begin{aligned} 2W_0(x) &= W_+(x) - W_-(x), & 2W_1(x) &= W_+(x) + W_-(x), \\ 2W_1(x) &= \tilde{W}_+(x) - \tilde{W}_-(x), & 2W_2(x) &= \tilde{W}_+(x) + \tilde{W}_-(x). \end{aligned} \quad (28)$$

Через нові функції рівняння (26) переписано у вигляді

$$W_+'(x) = W_-(x)W_+(x) + 2\varepsilon_0, \quad \tilde{W}_+'(x) = \tilde{W}_-(x)\tilde{W}_+(x) + 2\varepsilon_1 \quad (29)$$

У системі (26) можна виразити $W_1(x)$ через $W_-(x)\tilde{W}_+(x)$ двома способами, що дало змогу отримати співвідношення

$$W_+(x) + W_+'(x) - 2\varepsilon_0/W_+(x) = \tilde{W}_+(x) + \tilde{W}_+'(x) - 2\varepsilon_1/\tilde{W}_+(x), \quad (30)$$

звідки

$$U(x)(U(x)/W_+(x) - W_+(x)) - U'(x) + 2(\varepsilon_1 W_+(x) + \varepsilon_0 U(x)/W_+(x)) = 0, \quad (31)$$

де введено нову функцію

$$U(x) = W_+(x)\tilde{W}_+(x). \quad (32)$$

Отримане алгебричне рівняння відносно $W_+(x)$ можна розв'язати

$$W_+(x) = \frac{2U(x)(U(x)+2\varepsilon_0)}{U'(x)(1+R(x))}, \quad \tilde{W}_+(x) = \frac{U'(x)(1+R(x))}{2(U(x)+2\varepsilon_0)} \quad (33)$$

де

$$\mathcal{R}(x) = 1 + 4U(x)(U(x) + 2\varepsilon_0)(U(x) - 2\varepsilon_1)/U'(x)^2, \quad R(x) = \pm\sqrt{\mathcal{R}(x)} \quad (34)$$

Тут корінь квадратний із $\mathcal{R}(x)$ є позитивно визначеним в той час, як функцію $R(x)$ можна вибрати у формі $\sqrt{\mathcal{R}(x)}$ чи $-\sqrt{\mathcal{R}(x)}$ у різних інтервалах, відокремлених нулями функції $\mathcal{R}(x)$.

Тоді, починаючи з генеруючої функції $U(x)$, за допомогою (33) отримано функції $W_+(x)$, $\tilde{W}_+(x)$ та суперпотенціали

$$\begin{aligned} W_0(x) &= \frac{1}{2}\left(W_+(x) - \frac{W'_+(x)-2\varepsilon_0}{W_+(x)}\right) \\ W_1(x) &= \frac{1}{2}\left(W_+(x) + \frac{W'_+(x)-2\varepsilon_0}{W_+(x)}\right) \\ W_2(x) &= \frac{1}{2}\left(\tilde{W}_+(x) + \frac{\tilde{W}'_+(x)-2\varepsilon_1}{\tilde{W}_+(x)}\right) \end{aligned} \quad (35)$$

та хвильові функції

$$\begin{aligned} \psi_0^-(x) &= C_0^- \exp(-\int W(x)dx) \\ \psi_1^-(x) &= C_1^- W_+(x) \exp(-\int W_1(x)dx) \\ \psi_2^-(x) &= C_2^- \left((W_0(x) + W_2(x))\tilde{W}_+(x) - \tilde{W}'_+(x)\right) \exp(-\int W_2(x)dx) \end{aligned} \quad (36)$$

для потенціалу

$$V_-(x) = \frac{1}{2}(W_0^2(x) - W_0'(x)), \quad (37)$$

де значення енергій $E_0^- = 0$, $E_1^- = \varepsilon_0$, $E_2^- = \varepsilon_0 + \varepsilon_1$.

Знайдено явний вираз для хвильових функцій двох відомих власних станів гамільтоніана H_+

$$\psi_1^+(x) = B_0^- \psi_1^-(x), \quad \psi_2^+(x) = B_0^- \psi_2^-(x) \quad (38)$$

для енергій $E_1^+ = \varepsilon_0$ і $E_2^+ = \varepsilon_0 + \varepsilon_1$ та потенціалу

$$V_+(x) = \frac{1}{2}(W_0^2(x) + W_0'(x)). \quad (39)$$

У дисертації узагальнено розглянутий вище спосіб конструювання КТР потенціалів з трьома відомими станами на випадок періодичних потенціалів та визначено умови, які потрібно накласти на генеруючу функцію $U(x)$, щоб потенціал був несингулярною функцією. Зокрема, $U(x)$ повинна бути парною функцією відносно середини інтервалу періодичності x_m та мати у цій точці нуль другого порядку; $U(x)$ може мати нулі першого порядку в інших точках інтервалу періодичності, але не повинна мати нулів вищих порядків. Похідна $U'''(x)$ в точці x_m повинна задовольняти умову $U'''(x) = 8\varepsilon_0\varepsilon_1$. Також варто використовувати розв'язки протилежних знаків справа та зліва від точки x_m .

Для відображення узагальненого методу в роботі розглянуто приклад генеруючої функції

$$U(x) = 4\varepsilon_0\varepsilon_1 \sin^2 x, \quad (40)$$

що є тригонометричним розширенням відомого КТР потенціалу Разаві, який отримуємо з подібної генеруючої функції $U(x) = 4\varepsilon_0\varepsilon_1 sh^2 x$ при $\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 1/2$. Для часткового набору параметрів $\varepsilon_0 = \varepsilon_1 - 1/2$ квадратний корінь в (34) можна переписати у вигляді $R(x) = 2\sqrt{\varepsilon_0\varepsilon_1} \sin x \tan x$ й отримати в явному вигляді три власні стани потенціалу

$$V_-(x) = \varepsilon_0 - 1/2 + 1/4(\varepsilon_0\varepsilon_1 - 6\sqrt{\varepsilon_0\varepsilon_1} \cos x - \varepsilon_0\varepsilon_1 \cos 2x). \quad (41)$$

Отриманий потенціал $V_-(x)$ та хвильові функції $\psi_0^-(x)$, $\psi_1^-(x)$ та $\psi_2^-(x)$ зображено на рис.1. Цей КТР потенціал належить до класу КТР потенціалів, поданих у роботі [А.Турбинер // ЖЭТФ. – 1988. – Т.94, в.2. – С.33–44] у вигляді

$$V(x) = \frac{1}{2}(-a^2 \cos^2(2\alpha x) - 2\alpha a(2n+1) \cos(2\alpha x)) \quad (42)$$

у випадку $n = 1$, $\alpha = 1/2$.

Суперсиметричний партнер потенціалу $V_-(x)$ є новим КТР потенціалом $V_+(x)$ з двома відомими власними станами, які відповідають границям другої забороненої енергетичної зони, і зображений на рис.2. У роботі наведено вирази для потенціалу, суперпотенціалів та хвильових функцій цього потенціалу в явному вигляді.

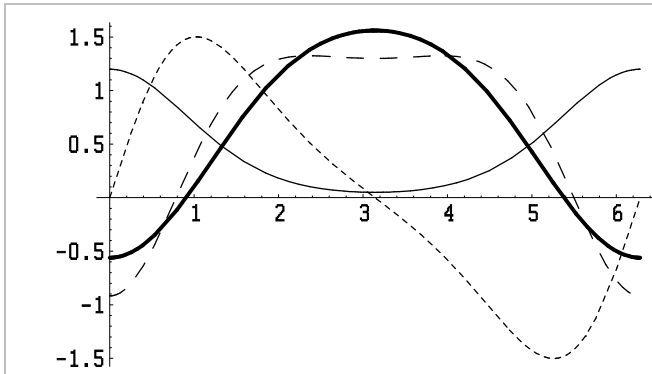


Рис.1. Квазіточно розв'язуваний потенціал Турбінера $V_-(x)$ (товста лінія) та хвильові функції $\psi_0^-(x)$, $\psi_1^-(x)$ та $\psi_2^-(x)$, які відповідають відомим розв'язкам (суцільна та штрихові лінії) для $\varepsilon_0 = 1$

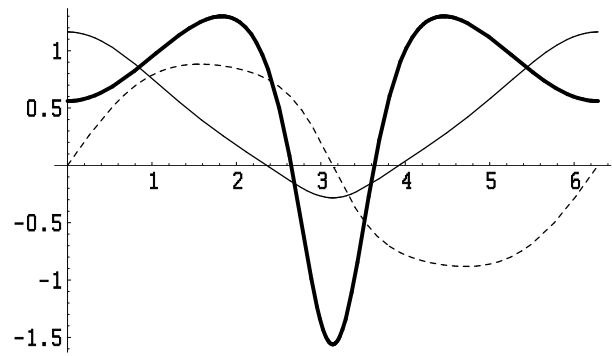


Рис.2. Новий квазіточно розв'язуваний потенціал $V_+(x)$ (товста лінія) та хвильові функції $\psi_1^+(x)$ та $\psi_2^+(x)$, які відповідають відомим розв'язкам (суцільна та штрихова лінії) для $\varepsilon_0 = 1$

У **третьому розділі** за допомогою суперсиметричного методу досліджено КТР випадкові потенціали з одним та двома точно відомими станами. Для визначення випадкового потенціалу дійсну вісь поділено на інтервали

$$l < x < l_{i+1}, \quad -\infty < x < +\infty \quad (43)$$

і задано потенціал на кожному з таких інтервалів

$$V(x) = V^i(x) = V(\alpha_i, x), \quad (44)$$

як функцію випадкової величини α_i , відомої для кожного інтервалу (43). Набір параметрів $\{\alpha_i\}$ є випадковим і відповідає конкретній реалізації неупорядкованого потенціалу.

Для кожного з інтервалів (43) визначені також суперпотенціали

$$W(x) = W^i(x). \quad (45)$$

Розв'язками задачі про рух електрона у випадковому потенціалі є функції, обмежені на всій дійсній осі. У дисертації використано найпростішу достатню умову

$$\int_{l_i}^{l_{i+1}} W(x) dx = 0, \quad (46)$$

яка є природним узагальненням відповідної умови для періодичного випадку.

Вибираючи різні випадкові суперпотенціали $W^i(x)$, можна отримати нові КТР потенціали з одним відомим власним станом, які задовольняє (4). У найпростіший спосіб несингулярний потенціал $V_-^i(x)$ можна одержати у випадку використання несингулярного суперпотенціалу $W^i(x)$. У роботі також отримано умови, які повинен задовольняти сингулярний суперпотенціал для того, щоби отриманий потенціал був несингулярною функцією.

Зокрема, з'ясовано, що в околі точок x_p , де суперпотенціал має прості полюси, потенціальна енергія буде регулярною функцією, а хвильова функція стану з нульовою енергією буде неперервною функцією виду

$$\psi_0^-(x) \sim |x - x_p| \left(1 - A \frac{(x - x_p)^2}{2}\right). \quad (47)$$

Оскільки розв'язки рівняння Шредингера визначені з точністю до сталого множника, неперервність похідної хвильової функції (47) в точках x_p забезпечено вибором знаку.

У рамках запропонованого підходу моделі розглянуто суперпотенціал

$$W(x) = \alpha_i \tan(\alpha_i(x - l_i)), \quad (48)$$

для якого $\alpha_i > 0$, а змінна x належить відповідному інтервалові $l_i < x < l_{i+1}$, де $l_{i+1} = l_i + \pi/\alpha_i$ і $l_0 = 0$. Цей суперпотенціал у точках $l_i + \pi/\alpha_i$ має сингулярності і на кожному з інтервалів приводить до потенціалу

$$V_-^i(x) = -\frac{3\alpha_i}{2}, \quad (49)$$

який відповідає невпорядкованій моделі Кроніна–Пенні.

Хвильові функції стану з нульовою енергією для цього потенціалу мають вигляд

$$\begin{aligned} \psi_0^-(x) &= C_0^- (-1)^i \cos(\alpha_i(x - l_i)), \\ \tilde{\psi}_0^-(x) &= \tilde{C}_0^- (-1)^i \frac{1}{\alpha_i} \sin(\alpha_i(x - l_i)), \end{aligned} \quad (50)$$

де множник $(-1)^i$ забезпечує неперервність як самої функції, так і її похідної, а хвильова функція $\tilde{\psi}_0^-(x)$ отримана з $\psi_0^-(x)$ як інший лінійно-незалежний розв'язок рівняння Шредингера $\tilde{\psi}(x) = \psi(x)(\int dx/\psi^2(x) + C)$.

Важливо, що в разі зміни випадкової величини α_i змінюється як глибина потенціальної ями $V_-^i = -\alpha_i/2$, так і її ширина $\Delta l_i = \pi/\alpha_i$, при цьому добуток $V_-^i \Delta l_i^2$ залишається сталим. Така кореляція між параметрами задачі є наслідком

умови (46), яка забезпечує наявність делокалізованих станів.

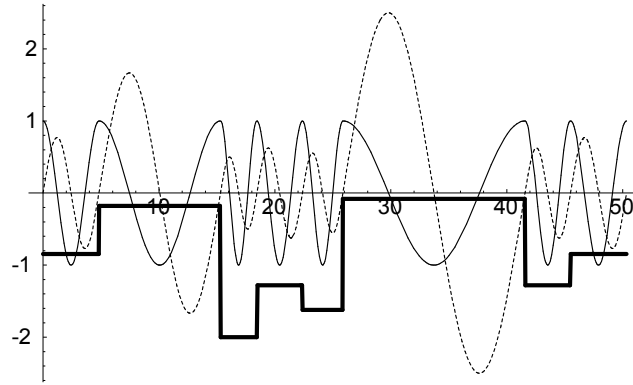


Рис.3. Квазіточно розв'язуваний неупорядкований потенціал моделі Кроніґа-Пенні $V_-(x)$ (товста лінія) та хвильові функції $\psi_0^-(x)$ та $\tilde{\psi}_0^-(x)$, які відповідають відомим розв'язкам, $\varepsilon_0 = 1$

Для випадку КТР випадкових потенціалів з двома відомими станами в третьому розділі роботи визначено умови, які повинні задовольняти випадкова генеруюча функція $W_+(x)$, щоби отриманий потенціал $V_-(x)$ був несингулярною функцією, а отримані розв'язки мали фізичний зміст. Зокрема, подібно до періодичних потенціалів у точках x_0 , де функція $W_+(x)$ має прості нулі, повинна виконуватись умова $W'_+(x_0) = \pm 2\varepsilon$, а в точках x_p , де функція $W_+(x)$ має прості полюси, функція $W_+(x)$ повинна мати поведінку $-1/(x - x_p)$ чи $-3/(x - x_p)$. Вибравши генеруючу функцію непарною відносно центру інтервалу

$$W_+^i\left(\frac{l_i+l_{i+1}}{2} - x\right) = -W_+^i\left(\frac{l_i+l_{i+1}}{2} + x\right), \quad (51)$$

ми отримаємо суперпотенціали $W(x)$ і $W_1(x)$, які мають таку ж властивість, і тому задовольняють умову (46) і забезпечують обмеженість отриманих хвильових функцій на всій дійсній осі.

У цьому розділі також розглянуто також фізично важливий випадок сингулярної генеруючої функції

$$W_+(x) = \frac{1}{\beta_i} \tan(\beta_i(x - l_i)), \quad (52)$$

де β_i – випадкові параметри, а межі інтервалу (43) задаються у вигляді $l_{i+1} = l_i + 2\pi/\beta_i$ та $l_0 = 0$.

Для обмеженості хвильової функції на усій дійсній осі параметри β_i можуть набувати тільки значення 1 та $1/\sqrt{3}$, тоді $\beta_i = 1 - n_i + n_i/\sqrt{3}$, тому отриманий потенціал можна подати у вигляді

$$V_-(x) = -\frac{n_i}{6}, \quad (53)$$

який відповідає потенціалу відомої моделі Кроніґа-Пенні.

Тут n_i – випадкові параметри, які можуть набувати значень 0 або 1, а енергія збудженого стану $\varepsilon = 1/2$ отримана з умови несингулярності потенціалу (22).

Хвильові функції, які відповідають нульовій енергії та енергії $\varepsilon = 1/2$, мають вигляд

$$\begin{aligned}\psi_0^-(x) &= C_0^-(x)(-1)^{\sum_{j=0}^{i-1} n_j} \left((1 - n_i) + n_i \cos \frac{x-l_i}{\sqrt{3}} \right) \\ \psi_\varepsilon^+(x) &= C_\varepsilon^-(x)(-1)^{\sum_{j=0}^{i-1} (1-n_j)} \left((1 - n_i) \sin(x - l_i) + n_i \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \frac{2(x-l_i)}{\sqrt{3}} \right)\end{aligned}\quad (54)$$

і зображені на рис.4. та рис.5, відповідно.

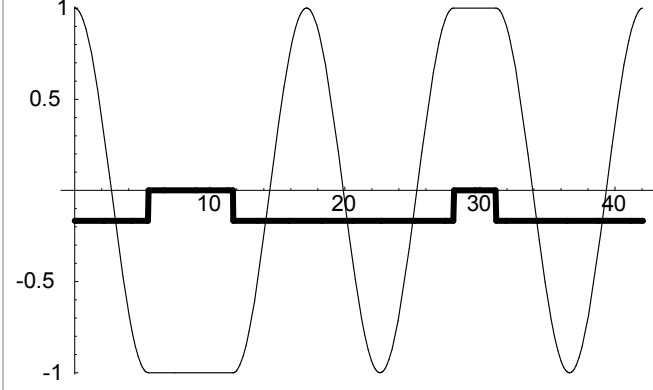


Рис.4. Невпорядкований потенціал моделі Кроніга-Пенні $V_-(x)$ (товста лінія) та відома хвильова функція стану з нульовою енергією (тонка лінія), $n_i = \{1,0,0,1,1,1,0,1,1\}$

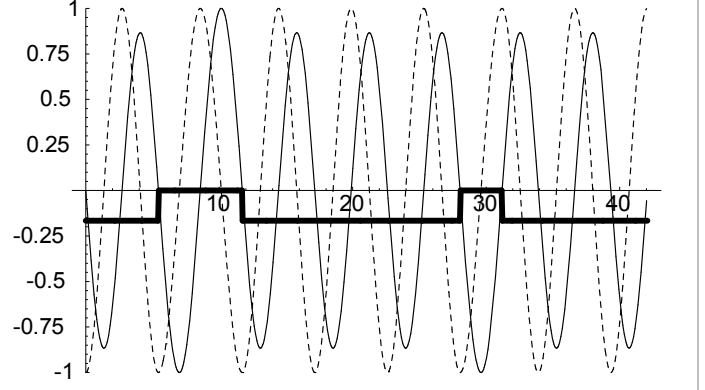


Рис.5. Невпорядкований потенціал моделі Кроніга-Пенні $V_-(x)$ (товста лінія) та відомі хвильові функції власного стану з енергією ε (тонка та пунктирна лінії), $n_i = \{1,0,0,1,1,1,0,1,1\}$

У четвертому розділі дисертації розглянуто КТР потенціали з відомими основним та першим збудженим станами для систем, маса яких залежить від координат, гамільтоніан яких у зображенні фон Росса [von Roos O. // Phys. Rev.B. – 1983. – V.27, No.12. – P.7547–7552] має вигляд

$$H = -\frac{\hbar^2}{4} [m^{\delta'}(x) \nabla m^{\kappa'}(x) \nabla m^{\lambda'}(x) + m^{\lambda'}(x) \nabla m^{\kappa'}(x) \nabla m^{\delta'}(x)] + V(x), \quad (55)$$

де $V(x)$ – потенціал, а δ' , κ' та λ' – параметри, які для забезпечення ермітовості гамільтоніана повинні задовольняти умову $\delta' + \kappa' + \lambda' = -1$.

Записавши масу як функцію від координат у вигляді

$$m(x) = m_0 M(x), \quad M(x) = \frac{1}{f^2(x)}, \quad (56)$$

гамільтоніан (55) набуває такого вигляду

$$H = -\frac{\hbar^2}{4m_0} [f^\delta(x) \nabla f^\kappa(x) \nabla f^\lambda(x) + f^\lambda(x) \nabla f^\kappa(x) \nabla f^\delta(x)] + V(x), \quad (57)$$

де $\delta + \kappa + \lambda = 2$. У частковому випадку, коли $\delta = \lambda = 0$, $\kappa = 2$

$$H = -\frac{\hbar^2}{4m_0} \sqrt{f(x)} \nabla f(x) \nabla \sqrt{f(x)} + V_{eff}(x), \quad (58)$$

де $V_{eff}(x)$ – деякий ефективний потенціал.

Увівши деформований оператор імпульсу

$$P = -i\hbar \sqrt{f(x)} \nabla \sqrt{f(x)} = \sqrt{f(x)} p \sqrt{f(x)}, \quad (59)$$

гамільтоніан (58) можна записати як

$$H = -\frac{p^2}{2m_0} + V(x) \quad (60)$$

Зазначимо, що оператор P повинен бути ермітовим, тобто забезпечувати виконання умови

$$\int \psi^* P \varphi dx = (\int \varphi^* P \psi dx)^*, \quad (61)$$

яка приводить до

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\psi(x)|^2 f(x) \rightarrow 0 \quad (62)$$

В четвертому розділі роботи також детально проаналізовано проблему упорядкування операторів імпульсу та маси як функції від координат, яка виникає у разі розгляду систем з масою, залежною від координат.

Зокрема, розглянуто гамільтоніан моделі сильного зв'язку у вузловому зображенні

$$H = \sum_i J_i (|i+1\rangle\langle i| + |i\rangle\langle i+1|) + \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i|, \quad (63)$$

де $|i\rangle$ – вектор стану частинки на вузлі i , вектори стану на різних вузлах – ортогональні, J_i – так званий інтеграл переходу між сусідніми вузлами i та $i+1$, а ε_i – енергія на вузлі i .

Шукаючи розв'язки рівняння Шредінгера $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ у вигляді $|\psi\rangle = \sum c_i |i\rangle$, отримано рівняння на коефіцієнти розкладу c_i

$$J_i c_{i+1} + J_{i-1} c_{i-1} + \varepsilon_i c_i = E c_i. \quad (64)$$

Означивши залежність коефіцієнта розкладу c_i від координати i -го вузла у вигляді $c_i = \psi(x_i)$, де x_i – координата i -го вузла, а відстань між найближчими сусідами a у довгохвильовому наближенні, коли ψ мало змінюється на відстанях, що мають порядок міжвузлової відстані a , у другому порядку по a для (64) отримаємо

$$a^2 \left(J(x) \psi''(x) + J'(x) \psi'(x) + \frac{1}{2} J''(x) \psi(x) \right) - a J'(x) \psi(x) + 2J(x) \psi(x) + \varepsilon(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (65)$$

де замість x_i записано x , вважаючи її неперервною змінною.

Це рівняння можна розглядати як рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

$$H = a^2 \frac{d}{dx} J(x) \frac{d}{dx} + \frac{a^2}{2} J''(x) - a J'(x) + 2J(x) + \varepsilon(x). \quad (66)$$

Перший доданок можна розглядати як кінетичну, а наступні – як потенціальну енергію. Використовуючи тотожність

$$\frac{1}{2} \left(J^\alpha(x) \frac{d}{dx} J^\beta(x) \frac{d}{dx} J^\gamma(x) + J^\gamma(x) \frac{d}{dx} J^\beta(x) \frac{d}{dx} J^\alpha(x) \right) = J(x) \frac{d^2}{dx^2} + J'(x) \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} (\alpha + \gamma) J''(x) - \alpha \gamma \frac{J'(x)^2}{J(x)}, \quad (67)$$

де $\alpha + \beta + \gamma = 1$, гамільтоніан (66) можна переписати у вигляді суми кінетичної та потенціальної енергій $H = T + U$. Тут

$$T = \frac{a^2}{2} \left(J^\alpha(x) \frac{d}{dx} J^\beta(x) \frac{d}{dx} J^\gamma(x) + J^\gamma(x) \frac{d}{dx} J^\beta(x) \frac{d}{dx} J^\alpha(x) \right), \quad (68)$$

$$U = \frac{a^2}{2}(1 - \alpha - \gamma)J''(x) + a^2\alpha\gamma\frac{J'(x)^2}{J(x)} - aJ'(x) + 2J(x) + \varepsilon(x). \quad (69)$$

Показано, що той самий гамільтоніан (66) можна записати у формі (68) з різним упорядкуванням в операторі кінетичної енергії, а отже, зміна упорядкування у (68) призводить до зміни потенціальної енергії (69) так, що сума кінетичної та потенціальної енергій не залежить від вибору способу впорядкування.

Зазначимо, що (68) не є найзагальнішою формою кінетичної енергії. У роботі запропоновано загальнішу форму у вигляді

$$T = \frac{a^2}{2} \left(J_1(x) \frac{d}{dx} J_2(x) \frac{d}{dx} J_3(x) + J_3(x) \frac{d}{dx} J_2(x) \frac{d}{dx} J_1(x) \right), \quad (70)$$

де три функції $J_1(x)$, $J_2(x)$ та $J_3(x)$ задовольняють співвідношення $J_1(x)J_2(x)J_3(x) = J(x)$.

Наголосимо, що (70) можна записати у формі

$$T = \frac{a^2}{2} \left(J(x) \frac{d^2}{dx^2} + J'(x) \frac{d}{dx} \right) + \frac{a^2}{2} \left(J_1(x)(J_2(x)J_3'(x))' + J_3(x)(J_2(x)J_1'(x))' \right). \quad (71)$$

Порівнюючи отриманий вираз з (70) бачимо, що гамільтоніан (70) можна записати у вигляді суми кінетичної (71) та потенціальної енергії

$$U = \frac{1}{2} a^2 J''(x) - aJ'(x) + 2J(x) + \varepsilon(x) - \frac{a^2}{2} \left(J_1(x)(J_2(x)J_3'(x))' + J_3(x)(J_2(x)J_1'(x))' \right) \quad (72)$$

Тому немає сенсу зазначати упорядкування операторів у кінетичній енергії з масою, залежною від координат, без розгляду потенціальної енергії, бо для розглянутої моделі гамільтоніан (66) можна переписати у загальній формі (68) із довільним упорядкуванням у кінетичній енергії.

Також у цьому розділі розглянуто суперсиметричне зображення Віттена для гамільтоніана (58) системи з масою, залежною від координат. Через оператори

$$B^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mp iP + W(x)), \quad (73)$$

де імпульс P задано (59), гамільтоніани $H_\pm$ записано у вигляді

$$H_\pm = B^\mp B^\pm = \frac{1}{2} (P^2 + V_\pm(x)), \quad (74)$$

де

$$V_\pm(x) = W^2(x) \pm fW'(x). \quad (75)$$

Факторизоване представлення гамільтоніана (73) подібно до стандартної процедури знаходження розв'язків рівняння Шредінгера в суперсиметричній механіці дало змогу знайти хвильову функцію стану з нульовою енергією

$$\psi_0^-(x) = \frac{c_0^-}{\sqrt{f(x)}} \exp \left(- \int \frac{W(x)}{f(x)} dx \right). \quad (76)$$

Для забезпечення квадратичної інтегрованості хвильових функцій суперпотенціал повинен задовольняти умову $\text{sign}(W(\pm\infty)) = \pm 1$.

Отже, вибираючи різні суперпотенціали $W(x)$ та функції $f(x)$ за допомогою суперсиметричного методу та (75), можна знайти КТР потенціали $V_\pm(x)$, для яких відома хвильова функція стану з нульовою енергією (76). З використанням описаного розширення суперсиметричного методу в роботі знайдено декілька нових

КТР потенціалів з відомим станом, який відповідає нульовій енергії.

За допомогою міркувань, аналогічних (9) – (11), можна знайти КТР потенціали з двома відомими станами. Зокрема, зв'язок між суперпотенціалами для систем з масою, залежною від координат, має вигляд

$$W_0^2(x) + f(x)W_0'(x) = W_1^2(x) - f(x)W_1'(x) + 2\varepsilon, \quad (77)$$

а вираз для хвильової функції збудженого стану

$$\psi_1^-(x) = \frac{C_1^-}{\sqrt{f(x)}} \exp\left(-\int \frac{W_1(x)}{f(x)} dx\right), \quad (78)$$

де $W_+(x) = W(x) + W_1(x)$.

Як й у випадку періодичних КТР потенціалів, неможливо знайти всі розв'язки рівняння Рікатті (77), але його можна переписати через нові функції $W_+(x)$ та $W_-(x)$ у вигляді

$$f(x)W_+'(x) = W_+(x)W_-(x) + 2\varepsilon, \quad (79)$$

що дає змогу виразити $W_-(x)$ через $W_+(x)$, а значить отримати вирази для хвильової функції (78) стану з енергією $\varepsilon = f(x_0)W_+'(x_0)/2$ та потенціалу $V_-(x)$ (79) через генеруючу функцію $W_+(x)$. Тут x_0 – точки, де генеруюча функція $W_+(x)$ має прості нулі.

У роботі наведені численні приклади КТР потенціалів з двома відомими станами, які отримані за допомогою описаного вище узагальнення. З фізичного погляду цікавим є приклад, у якому генеруюча функція $W_+(x) = Ax$, $A > 0$ для функції $f(x) = a + bx^2$, $a, b > 0$ за умови $A = 3b$ приводить до постійного потенціалу $V_-(x) = -ba$, для якого отримані хвильові функції $\psi_0^-(x) = C_0/(a + bx^2)$ і $\psi_1^-(x) = C_1x/(a + bx^2)^{3/2}$ описують зв'язні стани у разі будь-яких додатних a та b ; при цьому маса $m(x) = m_0/f^2(x)$ досягає максимального значення при $x \rightarrow 0$.

У п'ятому розділі роботи узагальнено суперсиметричний метод конструювання КТР потенціалів для систем із масою, залежною від координат, на випадок двох довільних власних станів. Для цього розглянуто умови, які повинна задовольняти сингулярна генеруюча функція $W_+(x)$, щоб отриманий потенціал $V_-(x)$ був несингулярною функцією, а хвильові функції мали фізичний зміст. Знайдені у такий спосіб розв'язки будуть відповідати двом довільним станам на відміну від випадку несингулярних суперпотенціалів та генеруючих функцій, які дають розв'язки для основного та збудженого станів, як це показано в попередньому розділі роботи.

Зокрема, для того щоб отримані хвильові функції були обмеженими, генеруюча функція $W_+(x)$ повинна бути непарною. Для того, щоб отриманий потенціал був несингулярним, в точках x_0 , де функція $W_+(x)$ має прості нулі, повинна виконуватись умова $f(x_0)W_+'(x_0) = \pm 2\varepsilon$, а в точках x_p , де функція $W_+(x)$ має прості полюси, функція $W_+(x)$ повинна мати поведінку $-f(x_p)/(x - x_p) + \text{const} + o(x - x_p)$ або $-3f(x_p)/(x - x_p) - 3f'(x_p) + o(x - x_p)$. У роботі наведено приклади КТР потенціалів з двома відомими станами, які задовольняють описані вище вимоги, отримані за допомогою запропонованого узагальнення.

Важливим частковим випадком є застосування суперсиметричного методу конструювання КТР потенціалів для систем з масою, що є періодичною функцією

від координат у полі дії періодичного потенціалу. Для періодичних систем характерними є періодичність потенціальної енергії та блохівський вигляд хвильових функцій. У випадку постійної маси для таких систем справедлива осциляційна теорема. Можна показати, що для систем із координатно залежною масою основні висновки осциляційної теореми також мають місце.

Умова періодичності хвильової функції накладає на періодичний суперпотенціал умову (24) обмеженості хвильової функції на всій числовій осі, яка узагальнюється для випадку систем із масою, залежною від координат

$$\int_0^L \frac{W(x)}{f(x)} dx = 0, \quad (80)$$

де $f(x)$ є також періодичною функцією із періодом кратним L . У найпростіший спосіб задовольнити (80) можна, якщо $W(x)$ буде непарною функцією відносно середньої точки інтервалу періодичності, а $f(x)$ – парною.

У роботі наведені численні приклади КТР періодичних потенціалів для систем з масою, залежною від координат з двома відомими станами, які отримані за допомогою описаного вище узагальнення. Зокрема, детально розглянуті випадки, коли періодичні суперпотенціали є як функціями без особливостей, так і сингулярними функціями. Розглянуто також важливий приклад, коли сингулярний періодичний суперпотенціал $W(x) = A \tan x$ для системи масою $f(x) = a + b \sin^2 x$ приводить до сталого потенціалу $V_-(x) = -a(a + b)$, а стан з нульовою енергією є нелокалізованим винятково через залежність маси від координат.

Дисертаційна робота завершується **Висновками** та **Списком використаних джерел**.

Основні результати та висновки дисертації можна викласти у вигляді таких тверджень:

- У дисертаційній роботі розвинуто суперсиметричний метод конструювання КТР потенціалів для випадку періодичних та випадкових потенціалів, а також для систем з масою, залежною від координат.
- Суперсиметричний метод конструювання КТР потенціалів узагальнено для випадку періодичних потенціалів з двома і трьома точними розв'язками. Це дало змогу отримати вже наявні та нові періодичні КТР потенціали, для яких відомі два або три точних розв'язки. Один з отриманих потенціалів відтворює відомий раніше потенціал, запропонований Турбінером, а інший є узагальненням відомого потенціалу Разаві. Виконано аналіз одержаних результатів за допомогою осциляційної теореми.
- Суперсиметричний метод застосовано для конструювання КТР випадкових потенціалів з одним та двома відомими рівнями. Досліджено умови, за яких отриманий випадковий потенціал приводить до двох точних розв'язків, а стани, які описують ці розв'язки, належать до делокалізованих станів. Отримано КТР випадкову модель Кроніга-Пенні і випадкові тригонометричні потенціали з одним та двома точними розв'язками.
- Показано, що у довгохвильовій границі гамільтоніан неоднорідної моделі сильного зв'язку описує частинку з масою, залежною від координат. Розв'язано в цьому випадку проблему впорядкування імпульсу та маси в операторі кінетичної енергії.
- Запропоновано новий більш загальний вигляд оператора кінетичної енергії для

частинки з масою, залежною від координат, який параметризується трьома функціями, добуток яких пов'язаний з масою частинки.

- Суперсиметричний метод конструювання КТР потенціалів узагальнено для випадку частинок з масою, залежною від координат. Отримано нові КТР потенціали з одним та двома рівнями для частинки з масою, залежною від координат.
- У рамках суперсиметричного методу визначено умови наявності локалізованих станів у постійному потенціалі для частинки з масою, залежною від координат.

Основні результати дисертації опубліковано в таких роботах:

- [1] Tkachuk V. M. Supersymmetric approach for generating quasi-exactly solvable potentials / V. M. Tkachuk, O. Voznyak // Journal of Physical Studies (Lviv). – 2002. – V.6, No.1. – P.40–45.
- [2] Tkachuk V. M. Quasi-exactly solvable periodic and random potentials / V. M. Tkachuk, O. Voznyak // Phys. Lett. A. – 2002. – V.301, Iss.3–4. – P.177–183.
- [3] Возняк О. О. Квазіточно розв'язувана неупорядкована модель Кроніга-Пенні / О. Возняк, В. М. Ткачук // Журнал фізичних досліджень. – 2004. – Т.8, №1. – С.16–22.
- [4] Возняк О. О. Квазіточно розв'язувані потенціали для частинки з масою, залежною від координат / О. Возняк, В. М. Ткачук // Журн. фіз. дослідж. – 2012. Т.16, No.1/2. – С.1003 (10 с.).
- [5] Возняк О. О. Квазіточно розв'язувані періодичні потенціали для систем з масою, що є періодичною функцією від координат / О. Возняк // Журн. фіз. дослідж. – 2014. – Т.18, No.1 – С. 1002(10 с.).
- [6] Tkachuk V. M. Effective Hamiltonian with position-dependent mass and ordering problem / V. M. Tkachuk, O. Voznyak // Eur. Phys. J. Plus. – 2015. – V.130. – P.161 (4 p.)
- [7] Возняк О. О. Квазіточно розв'язувані потенціали з двома довільними власними станами для систем із координатно залежною масою / О. Возняк, В. М. Ткачук // Журн. фіз. дослідж. – 2015. – Т.19. №3. – С.3002 (8 с.)
- [8] Voznyak O. Quasi-exactly solvable periodic potentials with a three known eigenstates / O. Voznyak // Available from: <arXiv.org: quant-ph/0507199/20 Jul 2005/> – 23 p.
- [9] Tkachuk V. M. Quasi-exactly solvable periodic and random potentials / V. M. Tkachuk, O. Voznyak / IX International seminar on physics and chemistry of solids ICPS'03: [Book of abstracts]. Zloty potok / Czenstochowy, 28–31 maja 2003. – P.26.
- [10] Возняк О. О. Квазіточно розв'язувана неупорядкована модель Кроніга – Пенні / О. О. Возняк, В. М. Ткачук // Proceedings of II International Conference «Physics of Disordered Systems» Lviv, Ukraine, 14–16 October 2003 // Матеріали II Міжнародної наукової конференції «Фізика неупорядкованих систем». – Львів, Україна, 14–16 жовтня, 2003. – С.16–17.
- [11] Возняк О. О. Гамільтоніан газу невзаємодіючих електронів на неупорядкованій ґратці в представленні вторинного квантування / О. О. Возняк, В. М. Ткачук // Proceedings of IV International Conference «Physics of Disordered Systems» Lviv, Ukraine, 14–16 October 2008. // Матеріали IV міжнародної наукової конференції «Фізика неупорядкованих систем». Львів, Україна, 14–16 жовтня 2008. – С.39–40.
- [12] Voznyak O. O. Energy states of electrons with position-dependent effective mass in

- the quantum nanoheterosystems // O. O. Voznyak, O. M. Voznyak // XIII International conference physics and technology of thin films and nanosystems. Ivano-Frankivsk, Ukraine, 16–21 May 2011. – V.1. – P.294.
- [13] Voznyak O.O. Quasi-exactly solvable potentials for particle with position-dependent mass / O. Voznyak // Workshop on current problems in physics. Lviv, Ukraine, 10–11 July 2012. – P.9–10.
- [14] Voznyak O. O. Supersymmetric approach for quasi-exactly solvable systems with a position dependent mass / Voznyak O. O., Tkachuk V.M. // V International conference «Physics of disordered systems». Lviv, Ukraine, 14–16 October 2013. – P.151.
- [15] Voznyak O. O. Influence of Coordinate Dependent Effective Mass to the States of Inhomogeneous Semiconductors // O. O. Voznyak, O. M. Voznyak // XIV International conference «Physics and technology of thin films and nanosystems». Ivano-Frankivsk, Ukraine, 20–25 May 2013. – P.516.
- [16] Voznyak O.O. Quasi-exactly solvable potentials with two arbitrary known eigenstates for systems with a position-dependent mass / O. Voznyak // Workshop on current problems in physics. Lviv, Ukraine, 08–09 July 2014. – P.14.

Анотація

Возняк О.О. Суперсиметрія та квазіточно розв’язувані потенціали для частинки з масою, залежною від координат. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, – Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, 2016.

У дисертації узагальнено суперсиметричний метод конструювання квазіточно розв’язуваних потенціалів у разі періодичних та випадкових потенціалів і систем з масою, залежною від координат, та отримано умови, які має задовольняти генеруюча функція, щоб отримані потенціал та розв’язки рівняння Шредингера мали фізичний зміст.

У випадку, коли генеруюча функція є періодичною функцією координат, у роботі отримано відомі періодичні потенціали з двома і трьома відомими розв’язками та нові періодичні потенціали з двома відомими розв’язками.

Застосовуючи суперсиметричний метод для конструювання випадкових потенціалів, отримано квазіточно розв’язуваний потенціал неупорядкованої моделі Кроніга-Пенні з одним та з двома відомими розв’язками, а також новий випадковий тригонометричний потенціал з двома відомими розв’язками.

Для систем з координатно залежною масою за допомогою суперсиметричного методу отримано нові квазіточно розв’язувані потенціали з одним та двома відомими станами.

У межах довгохвильової границі неоднорідної моделі сильного зв’язку з перших принципів отримано гамільтоніан частинки з масою, залежною від координат. Розв’язано в цьому випадку проблему впорядкування імпульсу та маси в операторі кінетичної енергії. Запропоновано загальніший вигляд оператора кінетичної енергії, який параметризується трьома функціями, добуток яких пов’язаний з масою частинки.

Ключові слова: суперсиметрична квантова механіка; рівняння Шредингера;

квазіточно розв'язувані потенціали; частинка в періодичному потенціалі; частинка у випадковому потенціалі; маса, залежна від координат.

Аннотация

Возняк О. О. Суперсимметрия и квазиточно решаемые потенциалы для частицы с массой, зависящей от координат. – Рукопись.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика, Львовский национальный университет имени Ивана Франко, Львов, 2016.

В диссертации проанализированы существующие подходы к использованию суперсимметрического метода для конструирования одномерных квазиточно решаемых потенциалов, для которых известны в точном виде только несколько решений уравнения Шредингера, и проведено обобщение суперсимметрического метода на случай периодических и случайных потенциалов, а также для систем с массой, зависящей от координат.

Проведен анализ полученных решений для различных классов генерирующих функций и сформулированы необходимые условия на генерирующую функцию для получения таких потенциалов и решений уравнения Шредингера, которые имеют физический смысл.

В диссертации детально рассмотрены многочисленные примеры и иллюстрации использования суперсимметрического метода для конструирования квазиточно решаемых потенциалов. В частности, в случае, когда генерирующая функция является периодической функцией координат, при помощи суперсимметрического метода получены как ранее известные квазиточно решаемые периодические потенциалы с двумя и тремя известными решениями, так и совершенно новые квазиточно решаемые периодические потенциалы с двумя известными решениями.

Использование суперсимметрического метода для исследования периодических потенциалов дало возможность получить новые квазиточно решаемые потенциалы неупорядоченной модели Кронига-Пенни с одним и с двумя известными решениями, а также новый случайный квазиточно решаемый тригонометрический потенциал с двумя известными решениями.

Проведенный анализ показал, что в предложенной неупорядоченной модели Кронига-Пенни, несмотря на присутствие беспорядка, решения уравнения Шредингера имеют нелокализованный характер, что объясняется корреляцией между глубиной и шириной потенциальных ям.

В рамках неоднородной модели сильной связи из первых принципов в длинноволновой границе получен гамильтониан частицы с массой, зависящей от координат и решена в этом случае проблема упорядочения импульса и массы в операторе кинетической энергии.

Предложена новая форма оператора кинетической энергии для частицы с массой, зависящей от координат, которая параметризуется тремя функциями, произведение которых связано с массой частицы. Такая форма оператора кинетической энергии является более общей, чем предложенная фон Россом, и обеспечивает эрмитовость полученного гамильтониана.

Рассмотрены существующие подходы к обобщению суперсимметрической квантовой механики на случай массы, зависящей от координат, и предложено обобщение суперсимметрического метода конструирования квазиточно решаемых потенциалов для случая систем с массой, зависящей от координат. Получены условия, которым должна удовлетворять генерирующая функция и координатно зависящая масса частицы для того, чтобы полученные потенциал и решения уравнения Шредингера имели физический смысл.

При помощи суперсимметрического метода получены новые квазиточно решаемые потенциалы с одним и двумя известными состояниями для частицы с массой, зависящей от координат. Рассмотрен случай, когда генерирующая функция и масса являются периодическими функциями координат, а также специальный случай движения частицы с массой, зависящей от координат, в поле действия постоянного потенциала. Показано, что координатно зависящая масса в этом случае может привести к существованию локализованных состояний даже в случае нахождения частицы в постоянном потенциале.

Ключевые слова: суперсимметрическая квантовая механика; уравнение Шредингера; квазиточно решаемые потенциалы; частица в периодическом потенциале; частица в случайном потенциале; масса, зависящая от координат.

Abstract

Voznyak O. O. Supersymmetry and quasi-exactly solvable potentials for the particle with a position-dependent mass. – Manuscript.

A thesis for a Candidate of Sciences degree on the specialty 01.04.02 – theoretical physics. – Ivan Franko National University of Lviv, 2016.

In the thesis, the supersymmetric method of construction of quasi-exactly solvable potentials for the case of periodic and random potentials and systems with a position-dependent mass has been generalized and appropriate conditions were obtained for the generating function, which provides physical sense for potential and solutions of the Schrödinger equation.

In the case of a periodic generating function, the known periodic potentials with two and three known eigenstates and completely new periodic potentials with two known eigenstates have been found. Using supersymmetric method for construction of random potentials, the disordered Kronig–Penney potential with one and two known eigenstates and the random trigonometric potential with two known eigenstates have been obtained. For the systems with a position-dependent mass in the frames of supersymmetric method, new quasi-exactly solvable potentials with one and two known eigenstates have been found.

The effective low-energy Hamiltonian for the tight-binding model with the hopping integral slowly varying along the chain has been derived from the basic principles. In this case, the problem of ordering for mass and momentum in the kinetic energy has been solved. A general form of the kinetic energy has been proposed, which can be expressed via three functions associated with the particle mass.

Keywords: supersymmetric quantum mechanics; Schrödinger equation; quasi-exactly solvable potential; particle in a periodic potential; particle in a random potential; position-dependent mass.