

О.В. ЗОЛОТАРЮК

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03143; e-mail: azolo@bitp.kiev.ua)**КОНТАКТНІ ВЗАЄМОДІЇ
В ОДНОВИМІРНІЙ КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ:
СІМ'Я УЗАГАЛЬНЕНИХ δ' -ПОТЕНЦІАЛІВ¹**

УДК 539

Для дослідження проходження електронів через надзвичайно тонкі гетероструктури, що складаються з двох паралельних плоских шарів, пропонується використовувати "одноточкове" наближення. Типовим прикладом такої структури є подвійний шар, що описується потенціалом, який у границі стиснення до нульової товщини має вигляд похідної дельта-функції Дірака. Рівняння Шредінґера з цим сингулярним одновимірним потенціальним профілем породжує сім'ю контактних (точкових) взаємодій, кожна з яких (названа "потенціалом δ' -розподілу") залежить від способу регуляризації. Використовуючи двомасштабну степенєво-пов'язану параметризацію потенціалу, що описує подвійний шар, усунуто всі розбіжності, які досі широко дискутувались у літературі стосовно взаємодії із потенціалом вигляду похідної дельта-функції Дірака. При застосуванні даної параметризації, стало можливим розширити сім'ю потенціалів δ' -розподілу до цілого класу "узагальнених" δ' -потенціалів. Показано, що в границі стиснення подвійного шару до нульової товщини резонансне тунелювання проявляється у вигляді гострих піків, які локалізуються на множинах нульової міри Лебеґа (названі резонансними множинами). Для представлення цих множин введено чотиривимірний простір параметрів. Показано, що проходження електронів на комплементарних множинах у цьому просторі є абсолютно відбиваючим.

Ключові слова: точкова взаємодія, проходження електронів, резонансне тунелювання.

1. Вступ

Починаючи з піонерської роботи Березіна та Фаддєєва [1], різноманітні точно розв'язані моделі, що описуються операторами Шредінґера із сингулярними потенціалами нульового радіусу, було вивчено на основі теорії самоспряжених розширень симетричних операторів. Ці моделі задаються потенціалами, які визначено на множинах ізольованих точок, а тому в літературі на них посилаються як на *контактні* або *точкові* взаємодії (див. монографії [2–4] для подробиць та посилань). У серії праць (див., наприклад, [5–11]) включно з останніми дослідженнями [12–19] із посиланнями було показано, коли одновимірні оператори Шредінґера визначені через розподіли та відповідні двосторонні граничні умови в точках сингулярності. Альтернативно, окрім цього точкового підходу можна реалізувати різноманітні сім'ї точкових взаємодій на основі рівняння Шредінґера з регуляр-

ними потенціалами у стисуючій границі [20–35]. Називатимемо цей "стисуючий" підхід точковою апроксимацією реалістичних систем із скінченними розмірами (наприклад, ультратонкі шароваті пластини). Перевагою обох підходів, що використовують як опис у термінах розподілів так і стисуючу апроксимацію, є можливість отримувати резольвенти операторів Шредінґера в явному вигляді, знаходити їх спектри, а також вираховувати коефіцієнти розсіяння.

У даній роботі розглядається одновимірне рівняння Шредінґера

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (1)$$

де $V(x)$ – дійснозначний потенціальний профіль, який задано на осі $-\infty < x < \infty$ у вигляді

¹ Ця робота базується на результатах, які доповідалися на міжнародній конференції "XI Bolyai–Gauss–Lobachevsky (BGL-2019): Non–Euclidean, Noncommutative Geometry and Quantum Physics."

регулярної функції або розподілу. Існує взаємно-однозначна відповідність між усією множиною самоспряжених розширень одновимірного оператора кінетичної енергії і двох сімейств граничних умов: нерозділені (*зв'язані*) та розділені (*незв'язані*). Зв'язані розширення описують нетривіальні чотирипараметричні точкові взаємодії, що задовольняють граничним умовам при $x = \pm 0$ для хвильової функції $\psi(x)$ та її похідної $\psi'(x)$ і задаються матрицею зв'язку Λ у вигляді [7]

$$\begin{pmatrix} \psi(+0) \\ \psi'(+0) \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \psi(-0) \\ \psi'(-0) \end{pmatrix}, \quad \Lambda = e^{i\chi} \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Тут $\chi \in [0, \pi)$ і λ -елементи – скінченні дійсні параметри, що задовольняють умову $\lambda_{11}\lambda_{22} - \lambda_{12}\lambda_{21} = 1$. У випадку, коли деякі з λ -елементів нескінченні, відповідна точкова взаємодія є незв'язаною і діє як повністю відбиваючий бар'єр для падаючої частинки. Наприклад, якщо діагональні елементи λ_{11} та λ_{22} скінченні, а один із недіагональних елементів є нескінченним, тоді маємо або граничні умови Діріхле $\psi(\pm 0) = 0$ (якщо λ_{21} нескінченне, а $\lambda_{12} = 0$) або Неймана $\psi'(\pm 0) = 0$ (якщо λ_{12} нескінченне, а $\lambda_{21} = 0$).

Окремі випадки рівняння (1) і відповідно Λ -матриці (2) є важливими у застосуваннях. Одним із представлень цієї матриці, яка буде розглянута у даній статті, є

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \theta & 0 \\ \alpha & \theta^{-1} \end{pmatrix}, \quad \theta, \alpha \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Тут випадок $\theta = 1$ відповідає найбільш простій і поширеній точковій взаємодії, яка називається δ -потенціалом. Для цього випадку потенціал у рівнянні (1) визначається дельта-функцією Дірака $\delta(x)$, тобто $V(x) = \alpha\delta(x)$, де α – силова константа (або інтенсивність). Хвильова функція $\psi(x)$ для цієї взаємодії є неперервною при $x = 0$, в той час коли її похідна зазнає розрив α . Як установленно в працях [23–31], коли потенціальна частина в рівнянні (1) є похідною від дельта-функції, тобто $V(x) = \gamma\delta'(x)$, $\delta'(x) := d\delta(x)/dx$, де $\gamma \in \mathbb{R}$ – силова константа, маємо $\theta \neq 1$. Розширюючи класифікацію запропоновану Браше і Нижником [15], називатимемо будь-яку точкову взаємодію, що описується Λ -матрицею виду (3) з $\theta \neq 1$ (навіть, якщо $\alpha \neq 0$), “узагальненим δ' -потенціалом”. Стосовно окремого випадку з потенціалом $\gamma\delta'(x)$ у рівнянні

(1), будемо посилались на отриману точкову взаємодію як на “потенціал δ' -розподілу” (навіть, якщо $\alpha \neq 0$).

З іншого боку, як історично склалось у літературі (див., наприклад, [3]), точкова взаємодія, для якої похідна $\psi'(x)$ неперервна при $x = 0$, але $\psi(x)$ розривна, називається δ' -взаємодією. Її більш узагальнена (двопараметрична) версія [36] описується матрицею зв'язку виду

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \theta & \beta \\ 0 & \theta^{-1} \end{pmatrix}, \quad \theta, \beta \in \mathbb{R}. \quad (4)$$

Різноманітні аспекти δ' -взаємодії із $\theta = 1$ у матриці (4) було досліджено в ряді публікацій (див., наприклад, [9–11, 20–22, 37–39]). Відзначимо, що термін “ δ' -взаємодія” є дещо оманливим, тому що вигляд Λ -матриці (4) відрізняється від представлення (3), що дійсно відповідає потенціалу з похідною дельта-функції в рівнянні (1). Через це терміни “ δ' -потенціал” і “ δ' -взаємодія” описують дві кардинально відмінні ситуації (для подробиць див. [15]).

2. Резонансне тунелювання крізь потенціал δ' -розподілу

Розглянемо рівняння (1), де потенціал із похідною дельта-функції $V(x) = \gamma\delta'(x)$ трактується через регуляризацію $\Delta'_\varepsilon(x) \rightarrow \delta'(x)$ в сенсі розподілів. Згідно теореми Шеби [20], для будь-якої регулярної функції $\mathcal{V}(\xi)$ такої, що

$$\Delta'_\varepsilon(x) = \varepsilon^{-2}\mathcal{V}(x/\varepsilon) \rightarrow \delta'(x) \quad (5)$$

при $\varepsilon \rightarrow 0$, відповідна точкова взаємодія є незв'язаною і задовольняє граничні умови $\psi(\pm 0) = 0$. Цей результат означає, що *нульове* проходження має місце для *всіх* $\gamma \in \mathbb{R}$, підтверджуючи той факт, що потенціал у вигляді похідної дельта-функції діє як абсолютно відбиваюча стінка.

Пізніше, Патіл [40] обчислив коефіцієнти розсіювання для рівняння (1), використовуючи границі

$$\frac{\delta(x + \varepsilon) - \delta(x - \varepsilon)}{2\varepsilon} \rightarrow \delta'(x) \quad (6)$$

для потенціалу $V(x) = \gamma\delta'(x)$, $\gamma \in \mathbb{R}$, та

$$\frac{\delta(x + \varepsilon) - 2\delta(x) + \delta(x - \varepsilon)}{\varepsilon^2} \rightarrow \delta''(x) \quad (7)$$

для потенціалу $V(x) = g\delta''(x)$, $g \in \mathbb{R}$. В результаті він знайшов, що обидва ці потенціали є абсолютно непроникними, фактично підтверджуючи теорему Шеби у випадку потенціалу з похідною дельта-функції.

Проте, використовуючи іншу апроксимацію розподілу $\delta'(x)$, а саме кусково-сталу функцію

$$\Delta'_\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon^{-2} & \text{для } -\varepsilon < x < 0, \\ -\varepsilon^{-2} & \text{для } 0 < x < \varepsilon, \\ 0 & \text{для } \varepsilon < |x| < \infty, \end{cases} \quad (8)$$

як найбільш просту регуляризацію, яка є частковим прикладом (5), Крістіансен та ін. [23] виявили, що потенціал δ' -розподілу не є абсолютно відбиваючою взаємодією. Було знайдено дискретну множину значень $\gamma \in \mathbb{R}$, при яких проходження є *ненульовим*. Матриця зв'язку у цьому випадку має вигляд (3), де елемент θ є скінченним, в той час як елемент α взагалі розбігається при $\varepsilon \rightarrow 0$, за винятком дискретних значень γ , коли $\alpha = 0$. Ці значення утворюють одну із резонансних множин Γ_0 для сім'ї потенціалів δ' -розподілу:

$$\Gamma_0 = \{\gamma \mid \tan\sqrt{\gamma} = \tanh\sqrt{\gamma}\}. \quad (9)$$

На цій множині матриця зв'язку (3) приймає дискретні значення з елементами

$$\alpha = 0, \quad \theta = \cosh\sqrt{\gamma} / \cos\sqrt{\gamma}, \quad \gamma \in \Gamma_0. \quad (10)$$

Поза множиною Γ_0 ($\gamma \notin \Gamma_0$) проходження є нульовим із граничними умовами типу Діріхле: $\psi(\pm 0) = 0$. Оскільки потенціал (8) – кусково-стала функція, то ймовірність проникнення \mathcal{T}_ε можна вираховувати в явному вигляді як функцію γ . У границі, коли $\varepsilon \rightarrow 0$, вона має вигляд зліченої множини гострих піків, які поточно збігаються до дискретної (резонансної) множини на γ -осі (див. рис. 1 як результат комп'ютерного моделювання в [32]).

Існування резонансної множини було строго доведено Головатим і Манько [26] для цілого класу регулярних функцій $\Delta'_\varepsilon(x)$, визначених регуляризацією (5). Окрім цього, для знаходження цієї множини було сформульовано задачу на власні значення і описано алгоритм для обчислення елемента θ . Помилку в доведенні теореми Шеби знайдено Головатим і Гринівим [27]. Було показано, що резонансна множина Γ_0 залежить від регуляризаційної послідовності $\Delta'_\varepsilon(x)$. Подібну зале-

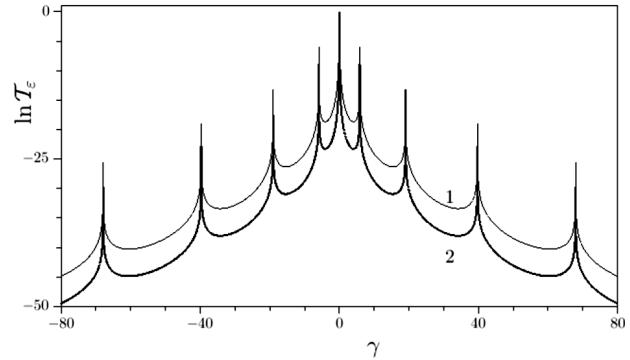


Рис. 1. Ймовірність проникнення \mathcal{T}_ε як функція силової константи γ , що обчислена для двох значень: $\varepsilon = 0,01$ (1), $\varepsilon = 0,001$ (2). Обчислення зроблено при $E = 0,01$ eV та $m^* = 0,1m_e$ (m_e – маса електрона) у системі, де $\hbar^2/2m^* = 1$

жність було також встановлено у випадку потенціалу $V(x) = g\delta''(x)$ [41]. Таким чином, сім'я регуляризаційних послідовностей править за *прихований* параметр у рівнянні (1) з похідними $\delta(x)$. Отже, на протипагу потенціалу $V(x) = \alpha\delta(x)$, диференціальні рівняння з коефіцієнтами у вигляді похідних $\delta(x)$ не мають фізичного змісту, якщо не використовується додаткова інформація.

Існування непорожніх резонансних множин із ненульовим проникненням протирічить результату Патіла [40], який виявився правильним. Використовуючи апроксимацію (6), він отримав нульове проходження для *всіх* $\gamma \in \mathbb{R}$. Це протиріччя можна пояснити, якщо застосувати регуляризацію $\delta'(x)$ у вигляді того ж бар'єру і ями, визначеними рівняннями (8), але розділеними на певну відстань r . Тоді можна вираховувати ймовірність проникнення $\mathcal{T}_\varepsilon(r)$ як функцію ε та r і порівняти повторні границі, які виявляються неоднаковими. Дійсно, $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{r \rightarrow 0} \mathcal{T}_\varepsilon(r) \rightarrow 0$ *майже скрізь*, в той час як $\lim_{r \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{T}_\varepsilon(r) \rightarrow 0$ *скрізь*. Це означає, що відносна швидкість стиснення товщини бар'єра та ями ε і інтервалу r грає ключову роль у реалізації точкових взаємодій.

Таким чином, при відштовхуванні від одного й того ж регулярного потенціалу $V(x) = \gamma\Delta'_\varepsilon(x)$ можуть реалізуватися дві сімі: (i) нерезонансні точкові взаємодії із $\Gamma_0 = \emptyset$ та (ii) резонансно-тунелюючі точкові взаємодії із непорожніми множинами $\Gamma_0 = \{\gamma_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$, на яких гранична ймовірність проникнення \mathcal{T} відмінна від нуля [31]. Цей важливий результат стверджує, що *різні* регуляризації по-

тенціалів δ' -розподілу породжують різні розв'язки рівняння (1) із потенціалами $V(x) = \gamma\delta'(x)$ або $V(x) = g\delta''(x)$, на противагу дельта-потенціалу $V(x) = \alpha\delta(x)$.

3. Резонансне тунелювання проти теорії Курасова

Інше протиріччя виникає, якщо зважити на те, що хвильова функція $\psi(x)$ у рівнянні (1) із потенціалом $V(x) = \gamma\delta'(x)$ повинна бути розривною при $x = 0$. У цьому випадку добуток $\delta'(x)\psi(x)$ є невизначеним і тому він повинен бути коректно трактований. З цією метою Гріффітс [5] і Курасов [6] запропонували узагальнити рівність $\delta'(x)\psi(x) = \psi(0)\delta'(x) - \psi'(0)\delta(x)$, яка є справедливою для будь-якої неперервної функції $\psi(x)$ і її неперервної похідної, використовуючи наступне "симетрично усереднене" представлення:

$$\delta'(x)\psi(x) = \frac{\psi(-0) + \psi(+0)}{2}\delta'(x) - \frac{\psi'(-0) + \psi'(0)}{2}\delta(x). \quad (11)$$

Це представлення можна узагальнити до "асиметричного" однопараметричного виду як запропоновано в [28].

Диференціюючи двічі хвильову функцію, записану у вигляді $\psi(x) = \psi(-0)\exp(-ikx)\Theta(-x) + \psi(+0)\exp(ikx)\Theta(x)$, $k = \sqrt{E}$, де $\Theta(x)$ – ступінчата функція і враховуючи вираз $\exp(\pm ikx)\delta'(x) = \delta'(x) \mp ik\delta(x)$, знаходимо [12, 28]

$$\psi''(x) = -k^2\psi(x) + [\psi'(+0) - \psi'(-0)]\delta(x) + [\psi(+0) - \psi(-0)]\delta'(x). \quad (12)$$

Використовуючи далі обидва вирази (11) і (12) у рівнянні (1), знаходимо, що матриця зв'язку для цього рівняння з потенціалом $V(x) = \gamma\delta'(x)$ приймає вигляд (3) із

$$\alpha = 0, \quad \theta = \frac{2 + \gamma}{2 - \gamma}, \quad \gamma \neq \pm 2. \quad (13)$$

Це – частковий результат загальної теорії розподілів, що була розвинута Курасовим [6] на основних функціях, які розривні в точці $x = 0$.

Отже, Λ -матриця, яку встановлено на основі представлення (11), неперервно залежить від силової константи γ , що показано в (13), в той час як

"резонансно-тунелююча" Λ -матриця з елементами (10) приймає дискретні значення на γ -осі. Обидва ці представлення трактуватимемо далі в рамках єдиної схеми, використовуючи двомасштабну процедуру для двошарової структури.

4. Границя стиснення для двошарової структури

Як не дивно, обидва контрверсійні представлення (10) та (13) можна отримати в межах єдиної процедури, експлуатуючи просту фізичну модель планарної гетероструктури, що складається з двох шарів, які розділені скінченим інтервалом, де товщина шарів і цей інтервал прямують одночасно до нуля. Рух електронів у таких системах зазвичай є обмеженим у повздовжньому напрямку (скажімо, вздовж x -осі); цей напрямок є перпендикулярним до поперечних площин, де електрони рухаються вільно. Тривимірне рівняння Шредінгера такої структури може бути розділено на повздовжню та поперечну частини і приведено до одновимірного вигляду (1).

4.1. Двошаровий потенціал та його двомасштабна степеневно-пов'язана параметризація

Розглянемо потенціал у рівнянні (1) виду

$$\bar{V}(x) = \begin{cases} V_1 & \text{для } 0 < x < l_1, \\ 0 & \text{для } l_1 < x < l_1 + r, \\ V_2 & \text{для } l_1 + r < x < l_1 + r + l_2, \end{cases} \quad (14)$$

де $V_j \in \mathbb{R}$, $j = 1, 2$, і $r > 0$. Цей потенціал є кусково-сталою функцією і тому рівняння (1) допускає явний розв'язок, який може бути представлений через матрицю переходу $\bar{\Lambda}$ у вигляді

$$\begin{pmatrix} \psi(x_2) \\ \psi'(x_2) \end{pmatrix} = \bar{\Lambda} \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi'(x_1) \end{pmatrix}, \quad \bar{\Lambda} = \begin{pmatrix} \bar{\lambda}_{11} & \bar{\lambda}_{12} \\ \bar{\lambda}_{21} & \bar{\lambda}_{22} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

де $x_1 = 0$ і $x_2 = l_1 + r + l_2$. Елементами цієї матриці є вирази

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_{11} &= [\cos(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) - \\ &- (k_1/k_2) \sin(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \cos(kr) - \\ &- (k_1/k) \sin(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) + \\ &+ (k/k_2) \cos(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \sin(kr), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_{12} = & [(1/k_1) \sin(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) + \\ & + (1/k_2) \cos(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \cos(kr) + \\ & + [(1/k) \cos(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) - \\ & - (k/k_1 k_2) \sin(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \sin(kr), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_{21} = & -[k_1 \sin(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) + \\ & + k_2 \cos(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \cos(kr) - \\ & - [k \cos(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) - \\ & - (k_1 k_2 / k) \sin(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \sin(kr), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_{22} = & [\cos(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) - \\ & - (k_2 / k_1) \sin(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \cos(kr) - \\ & - [(k / k_1) \sin(k_1 l_1) \cos(k_2 l_2) + \\ & + (k_2 / k) \cos(k_1 l_1) \sin(k_2 l_2)] \sin(kr), \end{aligned} \quad (19)$$

де $k = \sqrt{E}$ і $k_j = \sqrt{E - V_j}$, $j = 1, 2$. Тут маємо $\det \bar{\Lambda} = 1$, а k_j можуть бути дійсними або уявними. Позначення з рисками над символами було введено для опису скінченнорозмірних величин.

Для того, щоб явно реалізувати границю нульової товщини для двошарової структури, яка задана елементами (16)–(19), введемо параметр стиснення $\varepsilon \rightarrow 0$ та степеневу параметризацію, що пов'язана через цей параметр за допомогою співвідношень

$$V_j = a_j \varepsilon^{-\nu}, \quad l_1 = l_2 = l = \varepsilon, \quad r = c \varepsilon^\tau, \quad (20)$$

де $a_j \in \mathbb{R}$, $c, \nu, \tau > 0$ ($j = 1, 2$). Тоді шари описуються параметрами в чотиривимірному просторі $\mathcal{M} := \{\nu, \tau\} \times \{a_1, a_2\}$. Надалі замість рисок над символами ми приписуємо відповідним величинам індекс ε , замінюючи $\bar{V}(x) \rightarrow V_\varepsilon(x)$, $\bar{\Lambda} \rightarrow \Lambda_\varepsilon$ і $\bar{\lambda}_{ij} \rightarrow \lambda_{ij, \varepsilon}$, $i, j = 1, 2$.

4.2. Множини існування точкових взаємодій

Із явного виду матричних елементів (16)–(19), де параметри визначені рівняннями (20), випливає, що в границі при $\varepsilon \rightarrow 0$ маємо $\lambda_{12, \varepsilon} \rightarrow 0$, коли інші елементи можуть бути скінченними або навіть розбіжними. Зауважимо, що степеневу пов'язану параметризацію (20) відрізняється від тієї, яку було застосовано в багатьох працях (див., наприклад, [9–11, 21, 22, 36–39]), де границя $\lambda_{12, \varepsilon}$ є скінченною і ненульовою, реалізуючи при цьому δ' -взаємодію.

Наступна наша задача – знайти ті множини в квадранті $Q_{++} := \{0 < \nu < \infty, 0 < \tau < \infty\}$, де діагональні елементи $\lambda_{11, \varepsilon}$ та $\lambda_{22, \varepsilon}$ є скінченними і ненульовими при $\varepsilon \rightarrow 0$. Позначимо їхні граничні значення відповідно через θ та θ^{-1} . Існування скінченних θ та θ^{-1} є необхідною умовою для реалізації точкових взаємодій, навіть коли елемент $\lambda_{21, \varepsilon}$ розбігається. Якщо цей недиагональний елемент є скінченним і ненульовим (при скінченних θ та θ^{-1}), граничні точкові взаємодії – зв'язані розширення з Λ -матрицею виду (3). Інакше, у випадку розбіжності, точкові взаємодії є незв'язаними, що задовольняють граничні умови $\psi(\pm 0) = 0$ і діють як абсолютно відбиваючі стінки.

Виявляється, що обидва граничні матричні елементи θ і α , знайдені в границі при $\varepsilon \rightarrow 0$ із матричних елементів (16) та (18), які параметризовані рівняннями (20), – функції множин у просторі \mathcal{M} . Виконуючи спершу граничну процедуру в кожній $\{\nu, \tau\}$ -точці, стикаємося з наступними характеристичними множинами в Q_{++} -квадранті:

$$\begin{aligned} Q_I & := \{a_1, a_2 \mid 0 < \nu < 1, 0 < \tau < \infty\}, \\ L_\delta & := \{a_1, a_2 \mid \nu = 1, 0 < \tau < \infty\}, \\ L_K & := \{a_1, a_2 \mid 1 < \nu < 2, \tau = \nu - 1\}, \\ P_1 & := \{a_1, a_2 \mid \nu = 2, \tau = 1\}, \\ L_1 & := \{a_1, a_2 \mid \nu = 2, 1 < \tau < \infty\}, \\ L_2 & := \{a_1, a_2 \mid \nu = 2, 2 < \tau < \infty\}, \\ L_S & := \{a_1, a_2 \mid 1 < \nu < 2, \tau = 2(\nu - 1)\}, \\ P_2 & := \{a_1, a_2 \mid \nu = \tau = 2\}, \\ Q_S & := \{a_1, a_2 \mid 1 < \nu < 2, \nu - 1 < \tau < \infty\}, \\ Q_1 & := \{a_1, a_2 \mid 1 < \nu < 2, \nu - 1 < \tau < 2(\nu - 1)\}, \\ Q_2 & := \{a_1, a_2 \mid 1 < \nu < 2, 2(\nu - 1) < \tau < \infty\}, \end{aligned} \quad (21)$$

(див. рис. 2). Отже, “рухаючись” на Q_{++} -квадранті зліва направо, знаходимо, що на смугі Q_I точкові взаємодії є тривіальними, описуючи абсолютно повне проходження (Λ -матриця є одиничною I). Далі, на прямій L_δ проникнення стає частковим і точкові взаємодії є δ -типу. Повна силова константа цього δ -потенціалу – алгебраїчна сума констант окремих шарів. На множині $Q_I \cup L_\delta$ немає жодних обмежень на константи a_1 та a_2 (див. таблицю). На Q_{++} -множинах, що знаходяться справа від прямої L_δ , елемент $\lambda_{21, \varepsilon}$ взагалі розбігається при $\varepsilon \rightarrow 0$. Проте, на деяких підмножинах $\{a_1, a_2\}$ -площини (нульової міри Лебега) може ста-

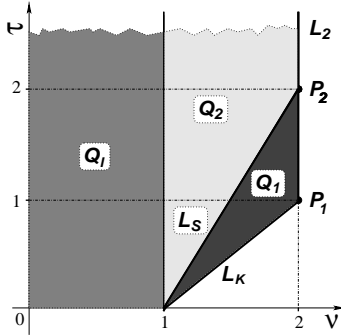


Рис. 2. Розбиття на множини, яке визначено рівняннями (21)

тися знищення розбіжностей, приводячи до скінченної границі елемента $\lambda_{21,\epsilon}$. Ефект знищення має місце на відкритій множині Q_S включно з її границею $L_{\delta'} := L_K \cup P_1 \cup L_1$, де потенціал $V_\epsilon(x)$ при умові $a_1 + a_2 = 0$ збігається до $\gamma\delta'(x)$ в сенсі розподілів. Таким чином, областю існування розподілу $\gamma\delta'(x)$ стає множина $L_{\delta'} \times \Sigma_0 \in \mathcal{M}$, де

$$\Sigma_0 := \{a_1, a_2 \mid a_1 + a_2 = 0\}. \tag{22}$$

Тут силова константа $\gamma := a_1 = -a_2$ – функція множин

$$\gamma = a_1 \begin{cases} c & \text{для } L_K, \\ 1 + c & \text{для } P_1, \\ 1 & \text{для } L_1. \end{cases} \tag{23}$$

Отже, в області $Q_S \cup L_{\delta'}$ проходження може бути нульовим або ненульовим залежно від обмежень,

Елементи Λ -матриці (3) як функції \mathcal{M} -множин

\mathcal{M} -множини	θ	α
$Q_0 \times \{a_1, a_2\}$	1	0
$L_\delta \times \{a_1, a_2\}$	1	$a_1 + a_2$
$L_K \times \Sigma_c$	$-a_1/a_2$	0
$P_1 \times \Sigma'_c$	$-\frac{\sqrt{-a_1} \sin\sqrt{-a_1}}{\sqrt{-a_2} \sin\sqrt{-a_2}}$	0
$P_2 \times \Sigma'_0$	$\cos\sqrt{-a_1}/\cos\sqrt{-a_2}$	$c\sqrt{-a_1} \sin\sqrt{-a_1} \times \sqrt{-a_2} \sin\sqrt{-a_2}$
$L_S \times \Sigma_0$	1	$-ca_1^2$
$L_2 \times \Sigma'_0$	$\cos\sqrt{-a_1}/\cos\sqrt{-a_2}$	0
$Q_2 \times \Sigma_0$	1	0
$P_1 \times \Gamma_c$	$\sinh\sqrt{\gamma}/\sin\sqrt{\gamma}$	0
$P_2 \times \Gamma_0$	$\cosh\sqrt{\gamma}/\cos\sqrt{\gamma}$	$-c\gamma \sinh\sqrt{\gamma} \sin\sqrt{\gamma}$
$L_2 \times \Gamma_0$	$\cosh\sqrt{\gamma}/\cos\sqrt{\gamma}$	0

які накладаються на a_1 та a_2 . Пряма L_δ – перехідна множина, яка розділяє області “регулярних” і “сингулярних” точкових взаємодій. У свою чергу, лінія $L_{\delta'}$ – перехідна множина, що розділяє області існування та неіснування точкових взаємодій.

5. Λ -матриця для зв’язаних точкових взаємодій

Існують два шляхи знищення розбіжностей при $\epsilon \rightarrow 0$ у сингулярному елементі $\lambda_{21,\epsilon}$, що заданий рівнянням (18) і параметризований рівностями (20). Перший шлях полягає в тому, що *увесь* вираз (18) прирівнюється до нуля, в результаті чого $\alpha = 0$ у Λ -матриці (3). Другий шлях реалізується, коли тільки член, що знаходиться спереду $\cos(kr)$ в (18), прирівнюється нулю, зберігаючи при цьому “вільним” член спереду $\sin(kr)$.

5.1. Реалізація точкових взаємодій, коли $\lambda_{21,\epsilon} \rightarrow 0$

Накладаючи обмеження $\lambda_{21,\epsilon} \rightarrow 0$ у рівнянні (18), знаходимо, що зв’язані точкові взаємодії можуть реалізуватися тільки на прямій L_K включно з її граничною точкою P_1 . На площині $\{a_1, a_2\}$ ця реалізація виникає на деяких множинах, які утворюють сім’ю кривих. Таким чином, на прямій L_K множина існування складається з двох кривих, що задаються рівністю

$$\Sigma_c := \{a_1, a_2 \mid a_1 + a_2 + ca_1a_2 = 0\}. \tag{24}$$

Використовуючи це співвідношення між a_1 і a_2 у рівняннях (16) та (19), які параметризовані рівностями (20), отримуємо $\theta = -a_1/a_2$. Прирівнюючи це значення до виразу (13), отримуємо $\{a_1, a_2\}$ -представлення силової константи γ для курасовського δ'_K -потенціалу: $\gamma = 2(a_1 + a_2)/(a_1 - a_2)$. Це представлення не співпадає з першою формулою в рівняннях (23) пов’язаною з розподілом $\gamma\delta'(x)$, окрім тривіального випадку: $\Sigma_c \cap \Sigma_0 = \{0\}$. Отже, на прямій L_K не можуть існувати потенціали δ' -розподілу.

Проте, з наближенням до граничної точки P_1 ситуація критично змінюється у зв’язку з появою зліченого числа кривих

$$\Sigma'_c := \{a_1, a_2 \mid A_1 + A_2 = cA_1A_2\}, \tag{25}$$

де

$$A_j := \sqrt{-a_j} \tan\sqrt{-a_j}, \quad j = 1, 2. \tag{26}$$

На цих кривих $\lambda_{21,\varepsilon} \rightarrow 0$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Як і в [34], називатимемо цей ефект *розщепленням* δ'_K -потенціалу, який визначено на резонансній множині $L_K \times \Sigma_c$, у злічену сім'ю узагальнених δ' -потенціалів, визначених на резонансній множині $P_1 \times \Sigma'_c$. Поза цими резонансними множинами точкові взаємодії є незв'язаними, що задовольняють граничні умови $\psi(\pm 0) = 0$. Використовуючи далі вирази для цих резонансних множин у рівняннях (16) та (19), отримуємо при $\varepsilon \rightarrow 0$ явні вирази для елемента θ в Λ -матриці (3), які виписані в таблиці. Зокрема, як встановлено в [28], перетин $\Gamma_c := \Sigma'_c \cap \Sigma_0$ [де покладено $a_1 = -a_2 = \gamma$, $\nu = 2$, $\tau \in (2, \infty)$] утворює дискретну множину

$$\Gamma_c = \{\gamma \mid \tan\sqrt{\gamma} = \tanh\sqrt{\gamma}/(1 + c\sqrt{\gamma}\tanh\sqrt{\gamma})\} \quad (27)$$

на γ -осі. В результаті елементи Λ -матриці (3) також приймають дискретні значення:

$$\alpha = 0, \quad \theta = \sinh\sqrt{\gamma}/\sin\sqrt{\gamma}, \quad \gamma \in \Gamma_c. \quad (28)$$

Таким чином, чотиривимірне \mathcal{M} -представлення резонансних множин дозволяє “покривати” як “неперервне” так і “дискретне” представлення з єдиної точки зору.

5.2. Реалізація точкових взаємодій, коли $\lambda_{21,\varepsilon} \rightarrow \alpha \in \mathbb{R}$

Інший шлях для знищення розбіжностей виникає на кутовій області $L_S \cup P_2 \cup L_2 \cup Q_2$, приводячи до появи резонансних множин, де Σ_0 , що визначена рівнянням (22), є складовою. Таким чином, на прямій L_S граничний елемент α взагалі є ненульовим, а $\theta = 1$, так що відповідна точкова взаємодія – δ -потенціал. Пряма L_S є перехідною множиною (з частковим проникненням), яка розділяє області Q_1 (повного відбиття) та Q_2 (повного проходження). В одновимірному випадку існування точки $\vartheta = 1/2$, яка розділяє повну вісь $-\infty < \vartheta < \infty$ на подібні півосі (повного відбиття та повного проходження), було відкрито Шебою в [20]. Тому називатимемо цю взаємодію, яка реалізується завдяки знищенню розбіжностей на резонансній множині $L_S \times \Sigma_0$, δ_S -потенціалом.

При наближенні до границі $P_2 \cup L_2$ множина Σ_0 розщеплюється в злічену множину

$$\Sigma'_0 := \{a_1, a_2 \mid A_1 + A_2 = 0\}, \quad (29)$$

де A_1 і A_2 визначені рівняннями (26). На резонансних множинах $P_2 \times \Sigma'_0$ і $L_2 \times \Sigma'_0$ елементи Λ -матриці θ та α можна обчислити в явному вигляді. Відповідні вирази занесено в таблицю. По аналогії із множиною Γ_c резонансною множиною для потенціалу δ' -розподілу буде перетин $\Gamma_0 := \Sigma'_0 \cap \Sigma_0$. Покладаючи $a_1 = -a_2 = \gamma$, $\nu = 2$ та $\tau \rightarrow \infty$, отримуємо вирази (9) та (10).

6. Підсумкові зауваження

Таким чином, цілу сім'ю сингулярних точкових взаємодій, що реалізуються на множині $Q_S \cup L_{\delta'}$ можна трактувати як об'єкти із *резонансним тунелюванням* скрізь одноточковий потенціал. Цей феномен впливає завдяки знищенню розбіжностей у найбільш сингулярному елементі $\lambda_{21,\varepsilon}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$. Двомасштабна параметризація (20) дозволяє розв'язати протиріччя (що досі існує в літературі) між дискретними [див. рівняння (9), (10), (27), (28)] та неперевними [див. рівняння (13)] представленнями Λ -матриці (3). Резонансні множини зручно представляти в чотиривимірному просторі \mathcal{M} . Вони перелічені в таблиці разом із елементами θ і α Λ -матриці як функції резонансних множин. Гранична ймовірність проходження \mathcal{T} задається в термінах цих елементів згідно формули: $4\mathcal{T}^{-1} = (\theta + \theta^{-1})^2 + (\alpha/k)^2$ (для подробиць див., наприклад, [31]).

Іншим ключовим моментом є існування граничних множин, на яких виникає два типи розщеплення резонансних множин: $\Sigma_0 \implies \Sigma'_0$ та $\Sigma_c \implies \Sigma'_c$. На цих множинах виділено три типи розщеплення точкових взаємодій: $\delta'_K(L_K \times \Sigma_c) \implies \delta'(P_1 \times \Sigma'_c)$, $\delta_S(L_S \times \Sigma_0) \implies \delta'(P_2 \times \Sigma'_0)$ та $I_P(Q_2 \times \Sigma_0) \implies \delta'(L_2 \times \Sigma'_0)$, де I_P означає сім'ю точкових взаємодій із повним проходженням. В області $[Q_1 \cup (L_1 \setminus L_2)] \times \{a_1, a_2\}$ та поза резонансними множинами, що виписані в таблиці починаючи з третього рядка по шостий, точкові взаємодії є абсолютно непрозорими, задовольняючи граничні умови Діріхле $\psi(\pm 0) = 0$.

Автор вдячний Відділенню фізики та астрономії Національної академії наук України за фінансову підтримку по темі No. 0117U000240. Автор висловлює також щире подяку Організаторам Конференції BGL-2019, котрі зробили цю подію можливою.

1. F.A. Berezin, L.D. Faddeev. *Sov. Math. Dokl.* **2**, 372 (1961); *Math. USSR Dokl.* **137**, 1011 (1961) (Engl. transl.).
2. Y.N. Demkov, V.N. Ostrovskii. *Zero-Range Potentials and Their Applications in Atomic Physics* (Leningrad University Press, 1975); (Plenum Press, New York, 1988) (Engl. transl.).
3. S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Høegh-Krohn *et al.* *Solvable Models in Quantum Mechanics, second ed. with appendix by P. Exner* (AMS Chelsea, Providence, RI, 2005).
4. S. Albeverio, P. Kurasov. *Singular Perturbations of Differential Operators: Solvable Schrödinger-Type Operators* (Cambridge University Press, 1999).
5. D.J. Griffiths. Boundary conditions at the derivative of a delta function. *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 2265 (1993).
6. P. Kurasov. Distribution theory for discontinuous test functions and differential operators with generalized coefficients. *J. Math. Anal. Appl.* **201**, 297 (1996).
7. S. Albeverio, L. Dabrowski, P. Kurasov. Symmetries of Schrödinger operators with point interactions. *Lett. Math. Phys.* **45**, 33 (1998).
8. F.A.B. Coutinho, Y. Nogami, L. Tomio. Many-body system with a four-parameter family of point interactions in one dimension. *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 4931 (1999).
9. S. Albeverio, L. Nizhnik. On the number of negative eigenvalues of a one-dimensional Schrödinger operator with point interactions. *Lett. Math. Phys.* **65**, 27 (2003).
10. L.P. Nizhnik. A Schrödinger operator with δ' -interaction. *Funct. Anal. Appl.* **37**, 72 (2003).
11. S. Albeverio, L. Nizhnik. Schrödinger operators with nonlocal point interactions. *J. Math. Anal. Appl.* **332**, 884 (2007).
12. M. Gadella, J. Negro, L.M. Nieto. Bound states and scattering coefficients of the $-a\delta(x) + b\delta'(x)$ potential. *Phys. Lett. A* **373**, 1310 (2009).
13. M. Gadella, M.L. Glasser, L.M. Nieto. One dimensional models with a singular potential of the type $-a\delta(x) + b\delta'(x)$. *Int. J. Theor. Phys.* **50**, 2144 (2011).
14. R.-J. Lange. Potential theory, path integrals and the Laplacian of the indicator. *J. High Energy Phys.* **11**, 1 (2012).
15. J.F. Brasche, L.P. Nizhnik. One-dimensional Schrödinger operators with general point interactions. *Methods Funct. Anal. Topology* **19**, 4 (2013).
16. J.T. Lunardi, L.A. Manzoni, W. Monteiro. Remarks on point interactions in quantum mechanics. *J. Phys. Conf. Series* **410**, 012072 (2013).
17. M. Calcada M, J.T. Lunardi, L.A. Manzoni *et al.* Distributional approach to point interactions in one-dimensional quantum mechanics. *Front. Phys.* **2**, 23 (2014).
18. R.-J. Lange. Distribution theory for Schrödinger's integral equation. *J. Math. Phys.* **56**, 122105 (2015).
19. V.L. Kulinskii, D.Y. Panchenko. Physical structure of point-like interactions for one-dimensional Schrödinger operator and the gauge symmetry. *Physica B* **472**, 78 (2015).
20. P. Seba. Some remarks on the δ' -interaction in one dimension. *Rep. Math. Phys.* **24**, 111 (1986).
21. T. Cheon, T. Shigehara. Realizing discontinuous wave functions with renormalized short-range potentials. *Phys. Lett. A* **243**, 111 (1998).
22. P. Exner, H. Neidhardt, V.A. Zagrebnov. Potential Approximations to δ' : An inverse Klaunder phenomenon with norm-resolvent convergence. *Commun. Math. Phys.* **224**, 593 (2001).
23. P.L. Christiansen, N.C. Arnbak, A.V. Zolotaryuk *et al.* On the existence of resonances in the transmission probability for interactions arising from derivatives of Dirac's delta function. *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 7589 (2003).
24. A.V. Zolotaryuk, P.L. Christiansen, S.V. Iermakova. Scattering properties of point dipole interactions. *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 9329 (2006).
25. F.M. Toyama, Y. Nogami. Transmission-reflection problem with a potential of the form of the derivative of the delta function. *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, F685 (2007).
26. Ю.Д. Головатий, С.С. Манько. Точні моделі для операторів Шредінгера з δ' -подібними потенціалами. *Укр. Мат. Вісник* **6**, 169 (2009).
27. Y.D. Golovaty, R.O. Hryniv. On norm resolvent convergence of Schrödinger operators with δ' -like potentials. *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 155204 (2010); **44**, 049802 (2011).
28. A.V. Zolotaryuk. Boundary conditions for the states with resonant tunnelling across the δ' -potential. *Phys. Lett. A* **374**, 1636 (2010).
29. Y.D. Golovaty, R.O. Hryniv. Norm resolvent convergence of singularly scaled Schrödinger operators and δ' -potentials. *Proc. Royal Soc. Edinb.* **143A**, 791 (2013).
30. Y. Golovaty. 1D Schrödinger operators with short range interactions: two-scale regularization of distributional potentials. *Integr. Equ. Oper. Theory* **75**, 341 (2013).
31. A.V. Zolotaryuk, Y. Zolotaryuk. Intrinsic resonant tunneling properties of the one-dimensional Schrödinger operator with a delta derivative potential. *Int. J. Mod. Phys. B* **28**, 1350203 (2014).
32. A.V. Zolotaryuk, Y. Zolotaryuk. A zero-thickness limit of multilayer structures: a resonant-tunnelling δ' -potential. *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 035302 (2015).
33. A.V. Zolotaryuk. Families of one-point interactions resulting from the squeezing limit of the sum of two- and three-delta-like potentials. *J. Phys. A: Math. Theor.* **50**, 225303 (2017).
34. A.V. Zolotaryuk. A phenomenon of splitting resonant-tunneling one-point interactions. *Ann. Phys. (NY)* **396**, 479 (2018).
35. A.V. Zolotaryuk, G.P. Tsironis, Y. Zolotaryuk. Point interactions with bias potentials. *Front. Phys.* **7**, 1 (2019).

36. Y. Golovaty. Two-parametric δ' -interactions: approximation by Schrödinger operators with localized rank-two perturbations. *J. Phys. A: Math. Theor.* **51**, 255202 (2018).
37. S. Albeverio, L. Nizhnik. Schrödinger operators with nonlocal potentials. *Methods Funct. Anal. Topology* **19**, 199 (2013).
38. S. Albeverio, S. Fassari, F. Rinaldi. A remarkable spectral feature of the Schrödinger Hamiltonian of the harmonic oscillator perturbed by an attractive δ' -interaction centred at the origin: double degeneracy and level crossing. *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 385305 (2013).
39. S. Albeverio, F. Fassari, F. Rinaldi. The Hamiltonian of the harmonic oscillator with an attractive δ' -interaction centred at the origin as approximated by the one with a triple of attractive δ -interactions. *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 025302 (2016).
40. S.H. Patil. Schrödinger equation with δ' and δ'' potentials. *Phys. Scripta* **49**, 645 (1994).
41. A.V. Zolotaryuk. An explicit realization of resonant-tunnelling δ'' -potentials. *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 255304 (2015).

Отримано 29.08.19

A. V. Zolotaryuk

CONTACT INTERACTIONS
IN ONE-DIMENSIONAL QUANTUM MECHANICS:
A FAMILY OF GENERALIZED δ' -POTENTIALS

S u m m a r y

A “one-point” approximation is proposed to investigate the transmission of electrons through the extra thin heterostructures composed of two parallel plane layers. The typical example is the bilayer for which the squeezed potential profile is the derivative of Dirac’s delta function. The Schrödinger equation with this singular one-dimensional profile produces a family of contact (point) interactions each of which (called a “distributional” δ' -potential) depends on the way of regularization. The discrepancies widely discussed so far in the literature regarding the family of delta derivative potentials are eliminated using a two-scale power-connecting parametrization of the bilayer potential that enables one to extend the family of distributional δ' -potentials to a whole class of “generalized” δ' -potentials. In a squeezed limit of the bilayer structure to zero thickness, the resonant tunneling through this structure is shown to occur in the form of sharp peaks located on the sets of Lebesgue’s measure zero (called resonance sets). A four-dimensional parameter space is introduced for the representation of these sets. The transmission on the complement sets in the parameter space is shown to be completely opaque.