УДК 539.3

О НАНОМАТЕРИАЛАХ С ЗАДАННЫМИ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ[1]

Бабешко В. А.[2] ***Евдокимова О. В.***[3] ***Бабешко О. М.***[4]***, Горшкова Е. М.***[5]

NANOMATERIALS WITH SET QUANTUM-MECHANICAL QUALITIES

Babeshko V. A., Evdokimova O. V., Babeshko O. M., Gorshkova E. M.

It is proved that application of pseudodifferential equations certain proprieties emerging in the process of blocked structures building allows development of nanomaterials with set quantum-mechanical qualities. Particularly, the article shows that they can be used as operators in the element's energy quantization or conjugation of state functions in over or under barrier motion depending on the element's potential and kinetic energies relation.

Keywords: boundary problem, block element, differential method of factorization, nanomaterials, quantum-mechanical qualities, pseudodifferential equations

В работе установлена возможность проектирования наноматериалов, обладающих заданными квантово-механическими свойствами. Этого удается достигнуть благодаря особой роли псевдодифференциальных уравнений, возникающих при построении блочных элементов для уравнения Шредингера. В частности, установлено, что построенные для уравнения Шредингера в работах [1–5] блочные элементы и описывающие их выражения имеют определенные свойства соотношений квантовой механики [6, 7]. В частности, сама функция, описывающая блочный элемент, должным образом нормированная, является функцией состояния частицы, находящейся в стационарном состоянии [6, 7]. Псевдодифференциальные уравнения несут в себе свойства соотношений квантования энергии частицы в потенциальной яме или соотношений, обеспечивающих сшивание функций состояния на границах разных энергетических зон. Сочетая различные блочные элементы, можно регулировать квантовомеханические параметры изучаемой структуры. Эти особенности могут оказаться полезными при проектировании наноматериалов с заданными квантовомеханическими свойствами. В частности, с их помощью оказывается возможным, наряду с общепринятыми объектами, описывающими наноматериалы как квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки, создавать более сложные конструкции таких объектов.

1. В работе [5] для уравнения Гельмгольца

$$\mathbf{Q}(\partial r, \partial\theta, \partial\varphi)\psi = (\Delta + k^2)\psi(r, \theta, \varphi) = 0,$$

[1]Отдельные фрагменты работы выполнены при поддержке грантов РФФИ (09-08-00170, 08-08-00468, 09-08-00171, 08-08-00669), программы Юг России, проекты (09-01-96500, 09-01-96503, 09-08-96522, 09-08-96527, 09-08-00294), проекта НШ-3765.2010.1, проекта ФЦП 2009-1.5-503-004-006, Гранта Президента МД-1554.2009.1, программ отделения ЭММПУ и Президиума РАН, выполняемых Южным научным центром РАН.

[2]Бабешко Владимир Андреевич, академик РАН, д-р физ.-мат. наук, директор Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета; e-mail: babeshko@kubsu.ru

[3]Евдокимова Ольга Владимировна, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета; e-mail: infocenter@kubsu.ru

[4]Бабешко Ольга Мефодьевна, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета; e-mail: infocenter@kubsu.ru

[5]Горшкова Елена Михайловна, старший научный сотрудник НИИ предупреждения геоэкологических катастроф Кубанского государственного университета; e-mail: gem@kubsu.ru

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+ + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}, \quad (1)$$

$$r,\theta,\varphi\in\Omega,$$

совпадающего со стационарным уравнением Шредингера, построен блочный элемент в форме шара радиуса b. Ниже это уравнение рассматривается в сферической системе координат с позиции квантовой механики в предположении, что частица, имеющая полную E и потенциальную U энергии, находится в стационарном состоянии в потенциальной яме $0 < r < b$. Предполагается, что стенка $r = b$ является барьером $b \leqslant r < \infty$ высоты U_0, а стенка $r = 0$ — непроницаема, бесконечно высокая и является источником частиц, летящих к барьеру. В этом случае функция $\psi(r,\theta,\varphi)$ является функцией состояния. Параметр k^2 имеет вид

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U_0). \quad (2)$$

Здесь E — полная энергия частицы, m_0 — ее масса, $\hbar$ — постоянная Планка.

Рассмотрим различные случаи энергетического состояния частицы в разных потенциальных ямах. К ним относятся следующие случаи:

1. Барьер бесконечной высоты, т.е. $U_0 = \infty$.

2. $U_0 < \infty$, надбарьерное движение частицы.

3. $U_0 < \infty$, подбарьерное движение частицы.

Введем следующие обозначения:

$$\mathbf{B}_2(l,m) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} g(\theta,\varphi)Y_l^{m-}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi = G(l,m),$$

$$\mathbf{B}_2^{-1}(\theta,\varphi)G = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} G(l,m)Y_l^{m+}(\theta,\varphi) = g(\theta,\varphi),$$

$$\mathbf{B}_3(\lambda,l,m)g = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} g(r,\theta,\varphi)J_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r)Y_l^{m-}(\theta,\varphi)\times \times\sin\theta d\theta d\varphi r dr = G(\lambda,l,m), \quad (3)$$

$$\mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\varphi)G = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\int_0^{\infty} G(\lambda,l,m)J_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r)\times \times Y_l^{m+}(\theta,\varphi)\lambda d\lambda = g(r,\theta,\varphi).$$

В первом случае функция состояния представляется блочным элементом [5]

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\varphi)\frac{L_{lm}(\lambda,b)}{(\lambda^2-k^2)},$$

$$L_{lm}(\lambda,b) = b^2\psi'_{lm}(b)T_{lm}(\lambda,b) - b^2\psi_{lm}(b)T'_{lm}(\lambda,b), \quad (4)$$

$$T_{lm}(\lambda,r) = \frac{1}{\sqrt{r}}J_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r).$$

Параметр k^2 принимает вид

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E. \quad (5)$$

Здесь $J_\nu(\lambda r)$ — функция Бесселя, $Y_l^m(\theta,\psi)$ — сферическая функция

$$Y_l^{m\pm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2l+1}{\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{\pm im\varphi}. \quad (6)$$

Псевдодифференциальные уравнения для этой граничной задачи вырождаются в алгебраические и представимы в виде

$$\psi'_{lm}(b)T_{lm}(k,b) - \psi_{lm}(b)T'_{lm}(k,b) = 0, \quad (7)$$

$$l,m = 1,2,\ldots,$$

$$\psi_{lm}(r) = \mathbf{B}_2(l,m)\psi(r,\theta,\varphi).$$

Принимая во внимание, что в потенциальной яме условия на ее границах имеют значения $\psi(0) = \psi(b) = 0$ [6, 7], псевдодифференциальные уравнения принимают вид

$$\psi'_{lm}(b)T_{lm}(k,b) = 0, \quad l,m = 1,2,\ldots.$$

Откуда при $\psi'_{lm}(b) \neq 0$ следует

$$T_{lm}(k,b) = 0, \quad l,m = 1,2,\ldots. \quad (8)$$

Нули этой функции обеспечивают квантование энергии частицы в бесконечно глубокой

яме. Таким образом, псевдодифференциальные уравнения блочного элемента для шара являются условиями квантования энергии частицы в такой яме.

Рассмотрим второй случай — надбарьерного движения частицы.

Тогда в области $0 \leqslant r \leqslant b$ функция состояния дается уравнениями (7), а в области $b \leqslant r \leqslant \infty$ она имеет представление вида [5]

$$w(r,\theta,\varphi) = \mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\varphi)\frac{N_{lm}(\lambda,b)}{(\lambda^2-k_1^2)}, \qquad (9)$$

$$k_1^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}(E-U_0), \quad E > U_0, \quad k_1 > 0,$$

$$(\lambda^2-k_1^2)W(l,m,\lambda) = N_{lm}(\lambda,b), \qquad (10)$$

$$l,m = 1,2,\ldots,$$

$$N_{lm}(\lambda,b) =$$

$$= b^2 w'_{lm}(b)P_{lm}(\lambda,b) - b^2 w_{lm}(b)P'_{lm}(\lambda,b),$$

$$w_{lm}(r) = \mathbf{B}_2(l,m)w(r,\theta,\varphi),$$

$$P_{lm}(\lambda,r) = \frac{1}{\sqrt{r}}H^{(1)}_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r).$$

$H^{(1)}_\nu(\lambda r)$ — функция Ханкеля первого рода. Псевдодифференциальные уравнения принимают вид (7), кроме того

$$w'_{lm1}(b)P_{lm}(k_1,b) - \\ - w_{lm1}(b)P'_{lm}(k_1,b) = 0, \qquad (11)$$

$$l,m = 1,2,\ldots.$$

Граничные условия при $r = b$ представимы в форме [6, 7]

$$\begin{aligned} w_{lm}(b) &= w_{lm1}(b), \\ w'_{lm}(b) &= w'_{lm1}(b), \end{aligned} \qquad (12)$$

$$l,m = 1,2,\ldots.$$

Внося их в псевдодифференциальные уравнения, приходим к соотношениям вида

$$T_{lm}(k,b)P'_{lm}(k_1,b) - T'_{lm}(k,b)P_{lm}(k_1,b) = 0,$$

$$l,m = 1,2,\ldots.$$

В результате с учетом (7), (11), (12) получили уравнения, служащие для описания параметров функций состояния над ямой и барьером. Уравнения становятся комплексозначными и служат сшиванию функции состояния частицы в разных энергетических зонах.

Рассмотрим третий случай — подбарьерного движения частицы.

Тогда параметр k принимает значение

$$k_2 = i\sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U_0-E)}, \quad E < U_0.$$

Внося его в соотношение (11), приходим к выражениям вида

$$T_{lm}(k,b)P'_{lm}(k_2,b) - T'_{lm}(k,b)P_{lm}(k_2,b) = 0,$$

$$l,m = 1,2,\ldots.$$

Уравнение становится вещественным и служит условием квантования энергии при подбарьерным движением частицы в условиях туннелирования.

Таким образом, псевдодифференциальные уравнения в различных вариантах служат построению соотношений квантования энергии и описанию поведения функции состояния частицы при наличии потенциальных ям и барьеров.

Остановимся на оценке вероятности нахождения частицы в заданных областях при энергетическом состоянии E_s. Используя спектральное представление блочного элемента в первом случае, введем нормирование в формуле (4), взяв k_s для принятого значения квантованной энергии в виде $k_s = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0E_s}$. Вычислим нормирующий множитель, имеем

$$D = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\int_0^\infty \left|\frac{L_{lm}(\lambda,b)}{(\lambda^2-k_s^2)}\right|^2 \lambda d\lambda.$$

Заметим, что под интегралом стоит ограниченная функция, интегрируемая на полуоси. Тогда функция состояния $\psi_0(r,\theta,\varphi)$, взятая в виде

$$\psi_0(r,\theta,\varphi) = D^{-1}\mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\varphi)\frac{L_{lm}(\lambda,b)}{(\lambda^2-k_s^2)},$$

служит определению вероятности нахождения частицы в интересующей зоне. Например, вероятность $v(a_1,a_2)$ нахождения частица в сферическом поясе $[a_1,a_2]$, $0 < a_1 < a_2 < b$ определяется формулой

$$v(a_1,a_2) =$$

$$= D^{-1}\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\int_0^\infty \left\{\left|\frac{L_{lm}(\lambda,a_2)}{(\lambda^2-k^2)}\right|^2 - \right.$$

$$\left. - \left|\frac{L_{lm}(\lambda,a_1)}{(\lambda^2-k^2)}\right|^2\right\}\lambda d\lambda.$$

2. В предыдущем пункте на примере простой задачи показана связь блочных элементов с квантовой механикой. Подобная связь имеет место и в случае более сложных трехмерных блочных элементов, построенных в [1–4] для уравнения Шредингера (1) или для несколько более общего. Ниже приводятся отдельные формулы, описывающие ряд указанных блочных элементов и связанных с ними псевдодифференциальных уравнений. К их числу относятся приводимые в качестве примера функции, описывающие соответствующие псевдодифференциальные уравнения. Для прямоугольного параллелепипеда два псевдодифференциальных уравнения имеют вида

$$\mathbf{F}^{-1}(x_1^1,x_2^1)\Bigg\{\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c}A_{33}\left(\varphi'_{13}-i\alpha^1_{3-}\varphi_1\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^1\eta_1^1+\alpha_2^1\eta_2^1\right]d\eta_1^1d\eta_2^1+$$
$$+\int\limits_{-c}^{c}\int\limits_{-b}^{b}A_{11}\left(\varphi'_{22}+i\alpha_1^1\varphi_2\right)\times$$
$$\times\exp i\left[-\alpha_1^1a+\alpha_2^1x_2^2+\alpha^1_{3-}\left(x_1^2-b\right)\right]dx_1^2dx_2^2+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c}A_{33}\left(\varphi'_{33}+i\alpha^1_{3-}\varphi_3\right)\times$$
$$\times\exp i\left[-\alpha_1^1x_1^3+\alpha_2^1x_2^3-\alpha^1_{3-}2b\right]dx_1^3dx_2^3-$$
$$-\int\limits_{-c}^{c}\int\limits_{-b}^{b}A_{11}\left(\varphi'_{43}-i\alpha_1^1\varphi_4\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^1a+\alpha_2^1x_2^4-\alpha^1_{3-}\left(x_1^4+b\right)\right]dx_1^4dx_2^4+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b}A_{22}\left(\varphi'_{53}+i\alpha_2^1\varphi_5\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^1x_1^5-\alpha_2^1c+\alpha^1_{3-}\left(x_2^5-b\right)\right]dx_1^5dx_2^5+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b}A_{22}\left(\varphi'_{63}-i\alpha_2^1\varphi_6\right)\times$$
$$\times\exp i\left[-\alpha_1^1x_1^6+\alpha_2^1c+\alpha^1_{3-}\left(x_2^6-b\right)\right]dx_1^6dx_2^6\Bigg\}=$$
$$=0,$$

$$\left|x_1^1\right|\leqslant a,\quad \left|x_2^1\right|\leqslant c;$$

$$\mathbf{F}^{-1}(x_1^2,x_2^2)\Bigg\{\int\limits_{-b}^{b}\int\limits_{-c}^{c}A_{11}\left(\varphi'_{23}-i\alpha^2_{3-}\varphi_2\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^2\eta_1^2+\alpha_2^2\eta_2^2\right]d\eta_1^2d\eta_2^2+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c}A_{33}\left(\varphi'_{33}+i\alpha_1^2\varphi_3\right)\times$$
$$\times\exp i\left[-\alpha_1^2b+\alpha_2^2x_2^3+\alpha^2_{3-}\left(x_1^3-a\right)\right]dx_1^3dx_2^3+$$
$$+\int\limits_{-b}^{b}\int\limits_{-c}^{c}A_{11}\left(\varphi'_{43}+i\alpha^2_{3-}\varphi_4\right)\times$$
$$\times\exp i\left[-\alpha_1^2x_1^4+\alpha_2^2x_2^4-\alpha^2_{3-}2a\right]dx_1^4dx_2^4+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c}A_{33}\left(\varphi'_{13}+i\alpha_1^2\varphi_1\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^2b+\alpha_2^2x_2^1-\alpha^2_{3-}\left(x_1^1+a\right)\right]dx_1^1dx_2^1+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b}A_{22}\left(\varphi'_{53}+i\alpha_2^2\varphi_5\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^2x_2^5-\alpha_2^2c-\alpha^2_{3-}\left(x_1^5+a\right)\right]dx_1^5dx_2^5+$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b}A_{22}\left(\varphi'_{63}-i\alpha_2^2\varphi_6\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^2x_2^6+\alpha_2^2c+\alpha^2_{3-}\left(x_1^6-a\right)\right]dx_1^6dx_2^6\Bigg\}=0,$$

$$\left|x_1^2\right|\leqslant b,\quad \left|x_2^2\right|\leqslant c.$$

, Аналогично для прямоугольной треугольной пирамиды они представимы в форме

$$\mathbf{F}^{-1}(x_1^3,x_2^3)\Bigg\{\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c}A_{33}\left(\varphi'_{33}-i\alpha^3_{3-}\varphi_3\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^3\eta_1^3+\alpha_2^3\eta_2^3\right]d\eta_1^3d\eta_2^3-$$
$$-\int\limits_{-b}^{b}\int\limits_{-c}^{c}A_{11}\left(\varphi'_{23}-i\alpha_1^3\varphi_2\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^3\alpha+\alpha_2^3x_2^2-\alpha^3_{3-}\left(x_1^2+b\right)\right]dx_1^2dx_2^2-$$
$$-\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b}A_{22}\left(\varphi'_{63}-i\alpha_2^3\varphi_6\right)\times$$
$$\times\exp i\left[\alpha_1^3x_1^6+\alpha_2^3c-\alpha^3_{3-}\left(x_2^6+b\right)\right]dx_1^6dx_2^6+$$
$$+\iint\limits_{\partial\Omega_v}\Big[A^v_{33}\left(\varphi'_{v3}-i(c^3_{k3}\alpha^3_k)_-\varphi_v\right)-$$

$$- i(c^3_{k1}\alpha^3_k)_- A^\nu_{13}\varphi_v - i(c^3_{k3}\alpha^3_k)_- A^\nu_{23}\varphi_\nu\Big]\times$$
$$\times E_{3\nu}\left(\alpha^3_1, \alpha^3_2, \alpha^3_{3-}, x^\nu_1, x^\nu_2, 0\right) dx^\nu_1 dx^\nu_2\Bigg\} = 0,$$

$$x^3_1, x^3_2 \in \partial\Omega_3;$$

$$\mathbf{F}^{-1}(x^\nu_1, x^\nu_2)\Bigg\{\iint\limits_{\partial\Omega_\nu}\left[A^\nu_{33}\left(\varphi'_{\nu 3} - i\alpha^\nu_{3-}\varphi_\nu\right) - \right.$$
$$- i\alpha^\nu_1 A^\nu_{13}\varphi^-_\nu i\alpha^\nu_2 A^\nu_{23}\varphi_\nu\big]\times$$
$$\times \exp i\left[\alpha^\nu_1\eta^\nu_1 + \alpha^\nu_2\eta^\nu_2\right] d\eta^\nu_1 d\eta^\nu_2 +$$
$$+\int\limits_{-b}^{b}\int\limits_{-c}^{c} A_{11}\left(\varphi'_{23} - i(c^2_{3m}\alpha^\nu_m)_-\varphi_2\right)\times$$
$$\times E_{\nu 2}\left(\alpha^\nu_1, \alpha^\nu_2, \alpha^\nu_{3-}, x^2_1, x^2_2, 0\right) dx^2_1 dx^2_2 +$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-c}^{c} A_{33}\left(\varphi'_{23} - i(c^3_{3m}\alpha^\nu_m)_-\varphi_3\right)\times$$
$$\times E_{\nu 3}\left(\alpha^\nu_1, \alpha^\nu_2, \alpha^\nu_{3-}, x^3_1, x^3_2, 0\right) dx^3_1 dx^3_2 +$$
$$+\int\limits_{-a}^{a}\int\limits_{-b}^{b} A_{22}\left(\varphi'_{63} - i(c^6_{3m}\alpha^\nu_m)_-\varphi_6\right)\times$$
$$\left.\times E_{\nu 6}\left(\alpha^\nu_1, \alpha^\nu_2, \alpha^\nu_{3-}, x^6_1, x^6_2, 0\right) dx^6_1 dx^6_2\right\} = 0,$$

$$x^\nu_1, x^\nu_2 \in \partial\Omega_\nu.$$

Для произвольной треугольной пирамиды все псевдодифференциальные уравнения даются соотношением

$$\mathbf{F}^{-1}(x^\nu_1, x^\nu_2)\Bigg\{\iint\limits_{\partial\Omega_\nu}\left[A^\nu_{33}\left(\varphi_{v3} - i\alpha^\nu_{3-}\varphi_\nu\right) - \right.$$
$$- i\alpha^\nu_1 A^\nu_{13}\varphi_\nu - i\alpha^\nu_2 A^\nu_{23}\varphi_\nu\big]\times$$
$$\times \exp i\left[\alpha^\nu_1\eta^\nu_1 + \alpha^\nu_2\eta^\nu_2\right] d\eta^\nu_1 d\eta^\nu_2 +$$
$$+\sum_{\tau=1}^{4}{}' \iint\limits_{\partial\Omega_\tau}\left[A^\tau_{33}\left(\varphi_{\tau 3} - i(b^{\tau\nu}_{3m}\alpha^\nu_m)_-\varphi_\tau\right) - \right.$$
$$- i(b^{\tau\nu}_{1m}\alpha^\nu_m)_- A^\tau_{13}\varphi^-_\tau i(b^{\tau\nu}_{2m}\alpha^\nu_m)_- A^\tau_{23}\varphi_\tau\big]\times$$
$$\left.\times D_{\nu\tau}\left(\alpha^v_1, \alpha^v_2, \alpha^v_{3-}, x^\tau_1, x^\tau_2, 0\right) dx^\tau_1 dx^\tau_2\right\} = 0,$$

$$\nu = 1, 2, 3, 4.$$

Аналогично для многогранной пирамиды они имеют следующее представление

$$\mathbf{F}^{-1}(x^{\nu s}_1, x^{\nu s}_2)\Bigg\{\iint\limits_{\partial\Omega_{\nu s}}\left[A^{\nu s}_{33}\left(\varphi_{\nu s 3} - i\alpha^{\nu s}_{3-}\varphi_{\nu s}\right) - \right.$$
$$- i\alpha^{\nu s}_1 A^{\nu s}_{13}\varphi_{\nu s} - i\alpha^{\nu s}_2 A^{\nu s}_{23}\varphi_{\nu s}\big]\times$$
$$\times \exp i\left[\alpha^{\nu s}_1\eta^{\nu s}_1 + \alpha^{\nu s}_2\eta^{\nu s}_2\right] d\eta^{\nu s}_1 d\eta^{\nu s}_2 +$$
$$+\sum_{\tau,k=1}^{M_0,N_\tau}{}' \iint\limits_{\partial\Omega_{\tau k}}\left[A^{\tau k}_{33}\left(\varphi_{\tau k 3} - i(b^{\tau k}_{3m}\alpha^{\nu s}_m)_-\varphi_{\tau k}\right) - \right.$$
$$- i(b^{\tau k}_{2m}\alpha^{\nu s}_m)_- A^{\tau k}_{13}\varphi^-_{\tau k} i(b^{\tau k}_{2m}\alpha^{\nu s}_m)_- A^{\tau k}_{23}\varphi_{\tau k}\big]\times$$
$$\left.\times D_{\nu s\tau k}\left(\alpha^{\nu s}_1, \alpha^{\nu s}_2, \alpha^{\nu s}_{3-}, x^{\tau k}_1, x^{\tau k}_2, 0\right) dx^{\tau k}_1 dx^{\tau k}_2\right\} =$$
$$= 0, \quad (13)$$

$$\nu = 1, 2, \ldots, M_0, \quad s = 1, 2, \ldots, N_\nu.$$

Во всех приведенных выражениях приняты обозначения работ [1–4].

Не вызывает особых сложностей проведение аналогичного анализа по установлению связей этих блочных элементов с квантовой механикой, как это было сделано в п. 1. Этот анализ позволяет сформулировать следующие утверждения:

– каков бы ни был блочный элемент, построенный для стационарного уравнения Шредингера, для частицы найдется некоторая потенциальная яма с барьерами, в которой блочный элемент является функцией состояния этой частицы. Псевдодифференциальные уравнения блочного элемента являются либо условиями квантования энергии частицы, либо средством сшивания функций состояния из разных энергетических зон.

Принимая во внимание, что множество блочных элементов с использованием наноматериалов представляют алгебраическую группу, в которой в качестве групповой операции выступает операция сложения блоков, можно утверждать следующее:

– применением блочных элементов можно создавать структуры, обладающие заданными квантовомеханическими свойствами, более сложные, чем квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки.

Блочные элементы, первоначально построенные для исследования проблем сейсмологии, могут оказаться полезными в квантовой механике.

Литература

1. *Бабешко В. А., Бабешко О. М., Евдокимова О. В.* О проблеме блочных структур академика М. А. Садовского // ДАН. 2009. Т. 427. № 4. С. 480–485.
2. *Бабешко В. А., Бабешко О. М., Евдокимова О. В.* К теории блочного элемента // ДАН. 2009. Т. 427. № 2. С. 183–186.
3. *Бабешко В. А., Бабешко О. М., Евдокимова О. В.* О пирамидальном блочном элементе // ДАН. 2009. Т. 428. № 1. С. 30–34.
4. *Бабешко В. А., Бабешко О. М., Евдокимова О. В.* О блочном элементе в форме произвольной треугольной пирамиды // ДАН. 2009. Т. 429. № 6. С. 758–761.
5. *Бабешко В. А., Евдокимова О. В., Бабешко О. М.* Блочные элементы со сферической границей // ДАН. 2010. Т. 434. № 5. С. 616–619.
6. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001. 808 с.
7. *Карлов Н. В., Кириченко Н. А.* Начальные главы квантовой механики. М.: Физматлит, 2006. 360 с.

Ключевые слова: граничная задача, блочный элемент, дифференциальный метод факторизации, наноматериалы, квантово-механические свойства, псевдодифференциальные уравнения

Статья поступила 12 декабря 2010 г.
Кубанский государственный университет, г. Краснодар
© Бабешко В. А. Евдокимова О. В. Бабешко О. М., Горшкова Е. М., 2010