

МАТЕМАТИКА

УДК 517.9

DOI 10.17223/19988621/67/1

MSC 45H05

М.А. Бубенчиков, А.М. Бубенчиков, С. Жамбаа, А.В. Лун-Фу, А.С. Челнокова

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ
ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА¹

Построено аналитическое решение задачи о волновом транспорте вещества через составные сверхтонкие барьеры. Показано, что для составной мембраны, состоящей из двух одинаковых сверхтонких слоев, всегда существуют расстояния между слоями, при которых реализуется резонансное прохождение одной из компонент. Резонанс позволяет разделять дебройлевские волны частиц, одинаковых по свойствам и различающихся лишь массами. При температуре 25 К найдена широкая полоса гиперселективного разделения гелион-гелиевой смеси.

Ключевые слова: *интегральное уравнение, вырожденное ядро, оператор сдвига, экспоненциальные функции, тождество Фурье.*

В качестве элементов составной мембраны наилучшим образом подходит пористый графен или пористый нитрид бора. Такие материалы могут быть получены методом эпитаксии [1, 2] или способом осаждения из паровой фазы на подложку, содержащую бездефектный графен или пористый нитрид бора [3, 4]. Однако существует еще целая группа стабильных листов толщиной в один атом, которые на этапе синтеза или после механического отслоения могут быть превращены в пористый 2D-материал. Так, в работе [5] сообщается о листах GeH, которые являются термически стабильными до 75 °С. Известен также силицен – графеновый эквивалент кремния [6], имеющий большие перспективы для новых применений. В работе [7] авторы указывают на черный фосфор как на слоистый материал из которого может быть получен фосфорен – одноатомный слой, физические свойства которого значительно отличаются от его объемного аналога. В работе [8] сообщается об успешном изготовлении двумерного станена на основе Sc методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В [9] отмечается, что функционализация гексагонального нитрида бора молекулами амина вызвала расслоение слоистой структуры, что привело к образованию листов нитрида бора. В работе [10] говорится, что «разработка новых слоистых материалов претерпела эволюцию от графена к металлическим оксидам и металлическим халькогенидным наноллистам». В [11] также упоминаются металлдихалькогениды как новейшие 2D-материалы и приводится пример материала, созданного на основе MoS₂. В [12] изучаются электронные свойства следующих металлдихалькогенидов, имеющих двумерную структуру: MoS₂, WS₂, WTe₂, TiSe₂, NbS₂, VSe₂, NbSe₂, TaS₂. Все ма-

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Министерством культуры, образования, науки и спорта Монголии в рамках научного проекта № 19-51-44002.

териалы при соответствующем способе их синтеза или последующей обработке, приводящей к образованию пор, могут быть приспособлены для разделения газов. В [13] сообщается о слоистой двумерной сетчатой структуре, которая содержит равномерно распределенные дырки и имеет в своей основе стехиометрию C_2N .

Таким образом, уже синтезировано достаточно много двумерных материалов, которые могут быть применены в работах по квантовому просеиванию изотопов.

Цель настоящей работы состоит в нахождении условий, обеспечивающих резонансное прохождение компонент газовой смеси через составные барьеры.

Дифференциальное уравнение Шредингера

Дифференциальное уравнение волновой динамики имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi + \frac{\hbar^2}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0. \quad (1)$$

Здесь Ψ – волновая функция, \hbar – постоянная Планка, U – энергия взаимодействия частицы с окружением, m – масса частицы, Δ – оператор Лапласа, i – мнимая единица.

В частном случае, когда потенциальная энергия U явно не зависит от времени, решение уравнения (1) ищется в виде

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}. \quad (2)$$

где E – энергия частицы.

Тогда для нахождения амплитуды волны Ψ будем иметь стационарное уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (3)$$

В задачах низкотемпературного мембранного разделения газовых смесей определяющее значение имеет направление переноса, перпендикулярное поверхности мембраны. Ввиду малых размеров нанопор любой макроскопический фрагмент мембраны можно считать бесконечно протяженным в направлениях, параллельных мембране. Определяя по некоторому представительному фрагменту поверхности мембраны среднее значение энергии взаимодействия и используя одномерное волновое уравнение переноса вещества, мы можем говорить о барьерной теории проницаемости мембраны.

Таким образом, при получении результата по проницаемости отдельных компонент смеси или по селективности ее разделения можно исходить из уравнения (3).

Ниже будут представлены некоторые аналитические построения, которые оказались весьма эффективными при анализе задач прохождения изотопов через составные мембраны. В связи с этим удобнее будет иметь безразмерную форму уравнения переноса вещества.

Если массу частицы отнести к m_0 – массе атома водорода, за масштаб энергии взять U_0 – глубину потенциальной ямы в распределении энергии парных взаимодействий вещества мембраны и подвижных частиц, а в качестве масштаба длины принять величину

$$L = \hbar/\sqrt{m_0 U_0}, \quad (4)$$

то безразмерное уравнение волновой динамики не будет содержать постоянной Планка \hbar :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2m(E - U(x))\psi = 0. \quad (5)$$

В записи (5) все величины безразмерные, включая координату x .

Таким образом, мы уменьшили количество констант задачи на единицу. Это является существенным при проведении дальнейших аналитических выкладок.

Интегральное уравнение Шредингера и его преобразования

Реализация численных методов решения дифференциального уравнения Шредингера ориентирована на конечную область изменения независимой переменной, а также на применение «сшивки» полученных численных данных с асимптотическими распределениями вычисляемой величины. Обычно под условиями «сшивки» понимаются равенства самой волновой функции и ее производной. Однако отсутствуют какие-либо обоснования в отношении использования этой формы условий. Также требует обоснования и сам размер конечной области интегрирования. В связи с этим важными являются попытки проведения интегрирования по всей действительной оси. По-видимому, это возможно сделать аналитическим методами. Вполне подходящим для этого является интегральное уравнение Шредингера:

$$\psi(x) - \frac{2m}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-\zeta|} U(\zeta) \psi(\zeta) d\zeta = e^{ikx}. \quad (6)$$

Здесь m – безразмерная масса частицы, $k = \sqrt{2mE}$ – параметр волны, E – безразмерная энергия частицы.

В книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказываются эквивалентность дифференциального и интегрального подходов в описании процессов распространения волн материи.

Уравнение (6) есть интегральное уравнение с вырожденным ядром. Для проведения дальнейших его преобразований воспользуемся дифференциальным оператором сдвига:

$$e^{-h\frac{d}{dx}} f(x) = f(x-h). \quad (7)$$

Доказательство последнего равенства можно провести с помощью разложения экспоненты в ряд Тейлора, а также посредством применения уже линейных операторов к функции $f(x)$ и нахождения новой суммы ряда. Применяя равенство (7) к $e^{ik|x-\zeta|}$, исходное уравнение можем переписать в виде

$$\psi(x) - \lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta \right) \cdot e^{ik|x|} = e^{ikx}, \quad \lambda = \frac{m}{ik} = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2m}{E}}. \quad (8)$$

Обратим внимание на выражение в скобках. Это выражение можно рассматривать как дифференциальный оператор или аналитическую функцию параметра $p = d/dx$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta p} d\zeta = L(p), \quad p = \frac{d}{dx}. \quad (9)$$

С учетом введенного обозначения уравнение (9) можно переписать в следующем виде:

$$\psi(x) - \lambda \cdot L(p) \cdot e^{-ik|x|} = e^{ikx}. \quad (10)$$

Вид дифференциального оператора, действующего на стоящую от него справа экспоненциальную функцию, пока что нам неизвестен. Однако его можно найти. Умножая (10) на $U(x)\exp(-xp)$ и интегрируя в бесконечных пределах найдем

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} U(x) \psi(x) e^{-xp} dx \right) - \lambda L(p) \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx \right) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx \right). \quad (11)$$

Здесь появляются еще два дифференциальных оператора, для которых введем следующие обозначения:

$$B(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx, \quad Q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx. \quad (12)$$

С учетом этих обозначений операторное равенство (11) примет вид:

$$L(p) \cdot [1 - \lambda Q(p)] = B(p). \quad (13)$$

Отсюда получаем

$$L(p) = \frac{B(p)}{1 - \lambda Q(p)}. \quad (14)$$

Иногда интегралы (12) могут быть вычислены аналитическим способом. В общем случае нужно проводить численное интегрирование. В любом случае эти интегралы зависят только от формы потенциального барьера. Подставляя (14) в выражение (10), получаем решение интегрального уравнения в виде

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{\lambda B(p)}{1 - \lambda Q(p)} \cdot e^{ik|x|}, \quad p = \frac{d}{dx}, \quad k = \sqrt{2mE}, \quad \lambda = \frac{m}{ik}. \quad (15)$$

Если бы дифференциальный оператор $L(p)$ действовал на показательную функцию обычного вида, то результат был бы следующим:

$$L\left(\frac{d}{dx}\right) \cdot e^{\mu x} = L(\mu) \cdot e^{\mu x}. \quad (16)$$

Однако в формуле (10) этот оператор действует на экспоненту от модуля аргумента. Поэтому непосредственное применение (16) невозможно. Но экспоненту от модуля аргумента можно привести к обычной экспоненте, если воспользоваться тождеством Фурье:

$$e^{ik|x|} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} e^{i\omega\alpha} e^{ik|\alpha|} d\alpha d\omega. \quad (17)$$

Применяя правила (16) и (17) к формуле (15), получим

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L(-i\omega) e^{-i\omega x} e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\omega. \quad (18)$$

Выражение (18) и представляет собой решение интегрального уравнения Шредингера, записанное в виде двойного интеграла по спектральной оси. Как видим, в отличие от (6), в его правой части находятся все известные величины, поскольку

функции $B(\omega)$ и $Q(\omega)$, называемые спектрами барьера, определяются лишь его формой, т.е. являются известными функциями постановки задачи. Кроме формы барьера, до получения решения нам известен характер асимптотического поведения решения по оси физической переменной x .

На этом этапе интегрирования мы уже освободились от дифференциального оператора $L(p)$, заменив его с использованием правила (16) функцией $L(\omega)$. Функцию $L(-i\omega)$ обозначим через $G(\omega)$. Тогда с учетом (14) получим

$$G(\omega) = \frac{\lambda B(-i\omega)}{1 - \lambda Q(-i\omega)} = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx}. \quad (19)$$

В результате будем иметь

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} G(\omega) e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\omega. \quad (20)$$

Если функция $G(\omega)$ является спектром некоторой функции $K(x)$, то

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x) \cdot e^{i\omega x} dx, \quad K(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega x} d\omega. \quad (21)$$

Тогда решение (20) запишется в виде последовательности трех интегралов:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) e^{i\omega\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\beta d\omega = \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(-x+\beta+\alpha)} d\omega \right) d\alpha d\beta. \end{aligned} \quad (22)$$

Интеграл, стоящий в скобках последнего выражения, представляет собой дельта-функцию Дирака. Поэтому далее можем записать:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \delta(\alpha - (x - \beta)) d\alpha = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \cdot e^{ik|x-\beta|} d\beta. \quad (23)$$

Таким образом, наиболее компактная запись решения, в котором интеграл берется по направлению изменения физической переменной, выглядит следующим образом:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) \cdot e^{ik|x-\zeta|} d\zeta. \quad (24)$$

При решении уравнения Шредингера методом интегрального уравнения не предусмотрено выполнение условий «сшивки». Поэтому необходимо проверить выполнение условий при $x = \pm\infty$. Для этого перепишем решение (24) в следующем виде:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right] + e^{-ikx} \left[\int_x^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta \right]. \quad (25)$$

Опираясь на последнюю форму решения, можно сделать заключение об асимптотическом поведении волновой функции следующим образом:

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right], & x \rightarrow \infty; \\ \psi(x) &\approx e^{ikx} + e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta, & x \rightarrow -\infty.\end{aligned}\quad (26)$$

Как видим из этих соотношений, после барьера мы имеем проходящую волну, а до барьера имеются и падающая, и отраженная волны. Таким образом, решение (24) верно отражает асимптотическое поведение искомой функции.

Одиночный барьер в виде импульса Гаусса

Пусть барьер определяется простейшей формулой:

$$U(x) = e^{-x^2}. \quad (27)$$

Вычислим графики спектральных функций:

$$\begin{aligned}B_1(\omega+k) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx, \\ B_2(\omega-k) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega-k)} dx, \\ Q(\omega) = B_3(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx.\end{aligned}\quad (28)$$

Графики этих трех функций, рассчитанные численным методом, показаны на рис. 1.

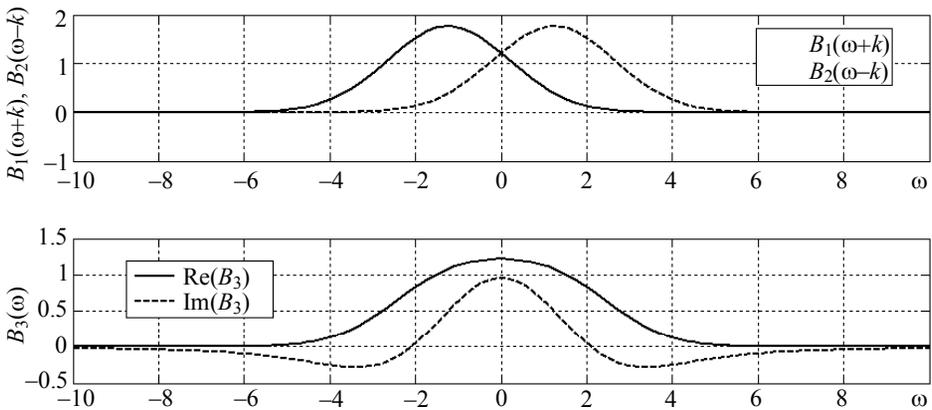


Рис. 1. Графики $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ и $B_3(\omega)$
Fig. 1. Graphs $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ and $B_3(\omega)$

Функции $B_1(\omega+k)$ и $B_2(\omega-k)$ являются вещественными функциями частоты ω и соответствуют сдвигу спектра барьера на величину $\pm k$. Что касается функции

$B_3(\omega)$, то она является комплексной. Легко заметить, что вещественная часть функции $B_3(\omega)$ равна полусумме величин B_1 и B_2 . При этом вся комплексная функция $B_3(\omega)$ является четной функцией относительно частоты ω . Кроме того, видно, что все три функции достаточно быстро убывают с увеличением модуля ω . Последнее обстоятельство позволяет после вычисления спектра $G(\omega)$ легко восстановить и функцию $K(x)$ по формуле (21). Графики функций $G(\omega)$ и $K(x)$ приведены на рис. 2.

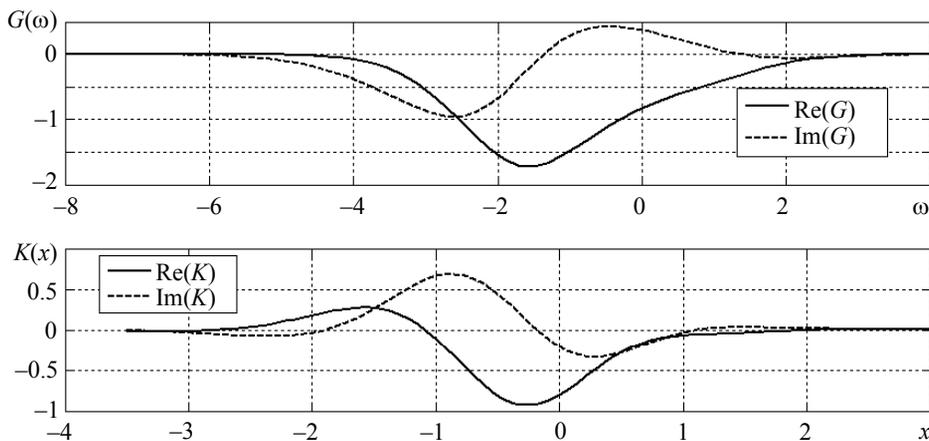


Рис. 2. Графики вещественных и мнимых частей функций $G(\omega)$ и $K(x)$, вычисленные для значений: $m = 3$ и $E = 0.5$

Fig. 2. Graphs of the real and imaginary parts of the functions $G(\omega)$ and $K(x)$, calculated for the values: $m = 3$ and $E = 0.5$

Видно, что обе функции $G(\omega)$ и $K(x)$ отличны от нуля только на ограниченных участках, как по переменной ω , так и по расстоянию x .

Коэффициент отражения

Очень важным преимуществом точного решения, по сравнению с решениями, получаемыми с помощью численных методов «сшивки», является то, что точное решение позволяет вычислять полный коэффициент прохождения S или отражения R для потенциального барьера $U(x)$ заданной формы. Из распределения (25) сразу же находим коэффициент отражения:

$$R = \left| \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{i k \zeta} d\zeta \right|^2. \tag{29}$$

Коэффициент прохождения будет равен

$$S = \left| 1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-i k \zeta} d\zeta \right|^2. \tag{30}$$

Эти интегралы записаны с бесконечными пределами и, по крайней мере, один из них можно выразить через спектральную функцию $G(\omega)$. Действительно, формулы (21) и (19) дают

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x)e^{ikx} dx = G(k) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx}. \quad (31)$$

Интеграл, входящий в формулу (30), не выражается подобным же простым образом через спектр $G(\omega)$, однако в книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказывается, что между коэффициентами S и R выполняется равенство

$$S + R = 1. \quad (32)$$

Поскольку справедливо соотношение (29), то имеем следующие формулы для коэффициентов прохождения и отражения, выраженные в явном виде через интегралы от потенциального барьера:

$$R = |G(k)|^2 = \frac{\left| \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \right|^2}{\left| 1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx \right|^2}. \quad (33)$$

Формулы (33) удобны для случаев, когда спектральная функция потенциального барьера находится аналитическим путем.

Нахождение нулевой спектральной функции

Для барьера в виде импульса Гаусса нулевая спектральная функция имеет вид

$$U_0(x) = e^{-\beta x^2}, \quad B_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \cdot e^{-\frac{\omega^2}{4\beta}}. \quad (34)$$

Для прямоугольного импульса с шириной h , основной спектр определяется следующим образом:

$$U_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -\frac{h}{2} \\ 1, & -\frac{h}{2} \leq x \leq \frac{h}{2} \\ 0, & x > \frac{h}{2} \end{cases}, \quad B_0(\omega) = \int_{-h/2}^{h/2} e^{i\omega x} dx = h \cdot \left(\frac{\sin \frac{\omega h}{2}}{\frac{\omega h}{2}} \right). \quad (35)$$

Для барьера, обратного квадрату гиперболического косинуса, имеем

$$U_0(x) = \frac{1}{ch^2(\sigma x)}, \quad B_0(\omega) = \frac{2}{\sigma} \left(\frac{\frac{\omega \pi}{\sigma}}{sh \frac{\omega \pi}{\sigma}} \right). \quad (36)$$

Можно найти и другие примеры спектра $B_0(\omega)$ в справочнике Градштейна и Рыжика [15]. Все они являются четными вещественными функциями ω и быстро убывают, когда ω стремится к бесконечности.

Свойства составных потенциальных барьеров

В известных литературных источниках никогда не заострялось внимание на особом поведении составных потенциальных барьеров, т.е. таких, когда два или несколько барьеров находятся на некотором расстоянии друг от друга и между ними образуется потенциальная яма. Между тем, при численных решениях, использующих метод «сшивки», для составных барьеров часто наблюдались значительные колебания коэффициента отражения R и коэффициента прохождения S с изменением энергии частицы E . Метод «сшивки» носит сугубо численный характер и при его применении трудно понять причину того, почему частица легче проходит через двойной барьер, чем через барьер одиночный, поэтому чаще всего относили такой эффект к ошибкам счета.

Сначала заметим, что если одиночный барьер сдвинуть на расстояние d от начала координат, то получим, что его спектр нужно просто умножить на множитель $e^{i\omega d}$, т.е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x-d) e^{i\omega x} dx = e^{i\omega d} \cdot B_0(\omega). \quad (37)$$

Спектр двойного барьера тогда будет равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{i\omega x} dx = (1 + e^{i\omega d}) \cdot B_0(\omega). \quad (38)$$

Функция $G(\omega)$, определяемая формулой (21), изменится при этом следующим образом:

$$G(\omega) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx \cdot (1 + e^{i(\omega+k)d})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx}. \quad (39)$$

Естественно, что и функция $K(x)$, входящая в решение (24), также поменяется с изменением функции $G(\omega)$.

Подставляя в (39) $\omega = k$, получаем следующее выражение для коэффициента отражения:

$$R = |G(k)|^2 = \left| \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \cdot (1 + e^{2ikd})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{ikx} dx} \right|^2, \quad S = 1 - R. \quad (40)$$

Формула (40), представляющая коэффициент отражения составной мембраны, определяет основной математический результат работы, поскольку позволяет выявить резонансные режимы прохождения компонентов газовой смеси. Наличие множителя $(1 + e^{2ikd})$ существенно усложняет спектр двойного барьера по сравнению со спектром одиночного барьера, и этим объясняется чувствительность коэффициента отражения к параметрам формы потенциального барьера.

Присутствие множителя $(1 + e^{2ikd})$ в числителе формулы (40) означает, что коэффициент отражения R должен обращаться в ноль при определенных значениях

расстояния d между барьерами. Приравнивая этот множитель нулю, находим

$$e^{2i k d} = -1 = e^{i \pi (2n+1)}, \quad d = \frac{\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)}{k} = \frac{\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)}{\sqrt{2mE}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (41)$$

Отсюда видно, что коэффициент отражения обращается в ноль не при одном, а при многих значениях расстояния d между одиночными барьерами.

Выбирая таким способом расстояние d в формуле (40), мы достигаем эффекта избирательности, т.е. того, что частица с массой m и с энергией E будет свободно проходить, без всякого отражения, через потенциальный барьер, состоящий из двух одинаковых частей.

Если имеется возможность изменять расстояние d между двумя потенциальными барьерами, то представляет интерес проследить зависимость коэффициента прохождения $S(d)$, вычисленного с использованием формулы (40), при частных значениях массы и энергии. На рис. 3 показан результат такого расчета, выполненного для случая, когда: $E = 0.5$ и $m_1 = 3, m_2 = 4$.

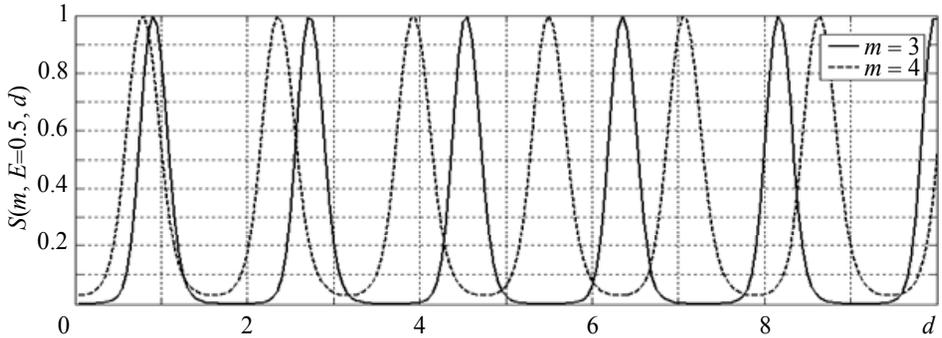


Рис. 3. Графики коэффициента прохождения $S(m, E, d)$, при значении энергии $E = 0.5$ для двух значений масс: $m = 3$ и $m = 4$

Fig. 3. Graphs of the transmission coefficient $S(m, E, d)$, at an energy value of $E = 0.5$ for two mass values: $m = 3$ and $m = 4$

Из этого расчета видно, что существует эффект сепарации частиц, различающихся по массе. Регулируя расстояние d между барьерами, можно добиться прохождения одной из частиц и при этом прохождение другой будет полностью заблокировано.

Блокирование гелиона определяется участками сплошной кривой, лежащими на горизонтальной оси. При этом если $d \in [5, 6]$, то волны коэффициента прохождения идут в противофазе. Это означает, что на большей части отмеченного интервала мы имеем сверхвысокие значения коэффициента разделения гелий-гелионовой смеси. В том, что изотоп ${}^4\text{He}$ проходит через составные барьеры лучше, чем ${}^3\text{He}$, нет ничего удивительного. Поскольку даже по меркам классической механики частица, имеющая тот же эффективный размер, но большую массу, должна проходить лучше.

Заключение

Получено аналитическое решение интегрального уравнения Шредингера, из которого сразу следуют выражения для коэффициентов отражения и прохождения. Благодаря наличию второго барьера, коэффициент отражения обращается в ноль в последовательности значений по расстояниям между моноатомными слоями мембраны. Это означает, что на этих дистанциях коэффициент прохождения гелия будет равен единице. В то же время гелион, имеющий другую массу, не будет иметь резонансного прохождения на указанных дистанциях между слоями мембраны.

Таким образом, одна из компонент будет проходить через систему барьеров, другая же не будет проходить вовсе. В результате мы получаем эффективную систему для просеивания изотопов. Эту систему можно настраивать на разделение газов, меняя расстояние между барьерами. При этом выводы оказываются справедливыми для сверхтонких одинаковых барьеров различной формы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene // *Science*. 2006. No. 5777. P. 1191–1196.
2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. Epitaxial graphene on ruthenium // *Nature Materials*. 2008. V. 5. No. 7. P. 406–411. DOI: 10.1038/nmat2166.
3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2010. V. 1. No. 20. P. 3101–3107. DOI: 10.1021/jz1011466.
4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity // *ACS Nano*. 2010. V. 4. No. 1. P. 414–422. DOI: 10.1021/nn901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphene analogue // *ACS Nano*. 2013. V. 7. No. 5. P. 4414–4421. DOI: 10.1021/nn4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon // *Physical Review Letters*. 2012. V. 108. No. 15. Article number 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications // *Chemical Society Reviews*. 2015. V. 44. No. 9. P. 2732–2743. DOI: 10.1039/c4cs00257a.
8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. Epitaxial growth of two-dimensional stanene // *Nature Materials*. 2015. V. 14. No. 10. P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V., Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2009. V. 1. No. 1. P. 277–283. DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications // *Energy and Environmental Science*. 2015. V. 8. No. 11. P. 3092–3108. DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications // *Chemical Society Reviews*. 2013. V. 42. No. 5. P. 1934–1946. DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-

- layer nanosheets // Accounts of Chemical Research. 2015. V. 48. No. 1. P. 56–64. DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. Nitrogenated holey two-dimensional structures // Nature Communications. 2015. V. 6. No. 1. Article number 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486.
 14. Морс Ф.М., Феибах Г. Методы теоретической физики: в 2 т. Т. 1. М.: Книга по Требованию, 2012. 894 с.
 15. Градштейн И.С., Рыжик Н.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматлит, 1963. 1100 с.

Статья поступила 21.02.2020 г.

Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S. (2020) ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 67. pp. 5–17

DOI 10.17223/19988621/67/1

Keywords: integral equation, degenerate kernel, shift operator, exponential functions, Fourier identity.

In this paper, the question about the use of wave dynamics for solving problems of membrane separation of helium isotopes in the gas state at cryogenic temperatures is considered. The dimensionless form of the stationary Schrödinger differential equation is obtained. Following that, the integral representation form of the wave function is written. This form, which is equivalent to the classical equation, is similar to the integral equation with a degenerate core; however, it contains a modulus of the argument with a shift along the real axis. Using the shift operator, the existing exponential function in the Schrödinger integral equation can be split into a differential operator and an exponential function of the argument module which does not contain a shift. The Fourier identity allows reducing the exponent of the modulus of the argument to a regular exponent. Next, based on the general property of a differential operator acting on an exponent, it is possible to calculate the spectral functions of the problem and write down the distribution for the wave function. This distribution is ultimately expressed through the spectra of the potential barrier. Thereafter, the structure and the spectrum of the composite barrier are considered. With the expression determining the reflection coefficient, it is found that the double-barrier system can have a resonant passage of one of the components in the sequence of distances between the layers of the membrane.

AMS 2020 Mathematical Subject Classification: 45H05

Financial support. The reported study was funded by RFBR and MCESSM according to the research project no. 19-51-44002.

Mikhail A. BUBENCHIKOV (Candidate of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Aleksey M. BUBENCHIKOV (Doctor of Physics and Mathematics, Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Soninbayar JAMBAA (Candidate of Physics and Mathematics, Director Centre for Fundamental Research of Mongolian University of Science and Technology, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia). E-mail: jsoninbayar@yahoo.com

Alexander V. LUN-FU (Chief Engineer, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: a.lunfu@gtt.gazprom.ru

Anna S. CHELNOKOVA (Assistant, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation) E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

REFERENCES

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. (2006) Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science*. 5777. pp. 1191–1196.
2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. (2008) Epitaxial graphene on ruthenium. *Nature Materials*. 5(7). pp. 406–411. DOI: 10.1038/nmat2166.
3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. (2010) Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(20). pp. 3101–3107. DOI: 10.1021/jz1011466.
4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. (2010) Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity. *ACS Nano*. 4(1). pp. 414–422. DOI: 10.1021/nn901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. (2013) Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphane analogue. *ACS Nano*. 7(5). pp. 4414–4421. DOI: 10.1021/nn4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. (2012) Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*. 108(15). 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. (2015) Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications. *Chemical Society Reviews*. 44(9). pp. 2732–2743. DOI: 10.1039/c4cs00257a.
8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. (2015) Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*. 14(10). P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V. (2009) Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(1). pp. 277–283. DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. (2015) Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications. *Energy and Environmental Science*. 8(11). pp. 3092–3108. DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. (2013) Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications. *Chemical Society Reviews*. 42(5). pp. 1934–1946. DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. (2015) Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-layer nanosheets. *Accounts of Chemical Research*. 48(1). pp. 56–64. DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. (2015) Nitrogenated holey two-dimensional structures. *Nature Communications*. 6(1). 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486.
14. Morse P.M., Feshbach H. (1953) *Methods of Theoretical Physics. Vol. 1*. New York: McGraw-Hill.
15. Gradshteyn I.S., Ryzhik N.M. (2007) *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier.

Received: February 21, 2020