

УДК 530.145

## МОДИФИЦИРОВАННОЕ ВКБ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ ЗАДАЧИ О ТУННЕЛИРОВАНИИ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

А.С. Бруев

*Рассмотрена модификация ВКБ приближения для задачи об одномерном туннелировании через потенциальный барьер, позволяющая увеличить точность расчета амплитуд прохождения и отражения.*

Задача о туннелировании частицы через одномерный потенциальный барьер имеет многочисленные физические приложения. Как правило, при расчете амплитуд прохождения и отражения используют приближенные методы и, в частности, ВКБ приближение [1]. В данной работе на примере одномерного туннелирования мы рассмотрим модифицированное ВКБ приближение, основанное на формулах связи для ВКБ решений уравнения Шредингера (УШ), найденных в работе [2].

Вначале используем формулы связи для ВКБ решений УШ на действительной оси. Если формулы связи применить в направлении, противоположном направлению распространения волны, то для расчета амплитуд прохождения ( $T$ ) и отражения ( $R$ ) получаем уравнения

$$T \exp \Delta = 1, \quad R = -iT \exp \Delta, \quad (1)$$

где  $\Delta = \int_{x_1}^{x_2} (-p^2)^{1/2} dx$ ,  $x_1$  и  $x_2$  - классические точки поворота,  $p = (E - U)^{1/2}$  - классический импульс частицы (используем систему единиц, в которой  $2m = \hbar = 1$ ). Из (1) следует известный результат [1]:  $R = -i$ ;  $T = \exp(-\Delta)$ . Однако, если формулы связи применить в противоположном направлении, то для расчета амплитуд  $T$  и  $R$  возникают другие уравнения

$$R + i = 0, \quad T = (1 - iR) \exp \Delta, \quad (2)$$

из которых следует более грубый результат:  $R = -i$  и  $T = 0$ .

Найденными соотношениями между  $T$  и  $R$  (вторые уравнения в (1) и (2)) можно воспользоваться для нахождения более точных выражений для  $T$  и  $R$ :

$$T = [\exp\Delta + \exp(-\Delta)]^{-1}; R = -i \exp\Delta [\exp\Delta + \exp(-\Delta)]^{-1}. \quad (3)$$

Эти формулы применяли ранее в теории распространения волн. В частности, их использовали в работах [3, 4], но рассматривали как эмпирические. Из формул (3) следует, что функции  $T(E)$  и  $R(E)$  имеют особенности, которые обусловлены квазистационарными состояниями, связанными с неустойчивыми замкнутыми траекториями, проходящими вблизи вершины потенциального барьера. Легко проверить, что условие квантования для таких состояний совпадает с аналогичным условием, найденным в работе [5].

Другим способом увеличения точности формул для величин  $T$  и  $R$  является использование формул связи для ВКБ решений УШ на линиях уровня [2], где эти решения имеют осциллирующий характер. Примерное положение линий уровня в рассматриваемой задаче имеет вид, приведенный на рис. 1. Линии уровня, выходящие из разных точек поворота не пересекаются и, следовательно, необходимо установить формулы связи между соответствующими ВКБ решениями УШ.

В общем случае имеем

$$\begin{aligned} & (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{z_1^{(+)}}^{z_1^{(+)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(+)}\right) \leftrightarrow \\ \Leftrightarrow & r_+ (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{z_2^{(+)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(+)}\right) + r_- (-p^2)^{-1/4} \exp\left(-\int_{z_2^{(+)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(+)}\right); \\ & (-p^2)^{-1/4} \exp\left(-\int_{x_1}^{z_1^{(+)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(+)}\right) \leftrightarrow \\ \Leftrightarrow & q_+ (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{z_2^{(+)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(+)}\right) + q_- (-p^2)^{-1/4} \exp\left(-\int_{z_2^{(+)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(+)}\right), \quad (4) \end{aligned}$$

где  $r_{\pm}$  и  $q_{\pm}$  - некоторые, подлежащие определению коэффициенты, а остальные обозначения такие же, как в работе [2]. Для определения неизвестных констант в (4) применим традиционный метод, основанный на обходе по замкнутому контуру.

Для первой формулы в (4), совершив обход против часовой стрелки по контуру, составленному из линий уровня  $C_{z_1^{(+)}}$ ,  $C_{z_2^{(+)}}$  и действительной оси, находим

$$r_+ = 0; r_- = \exp\Delta. \quad (5)$$

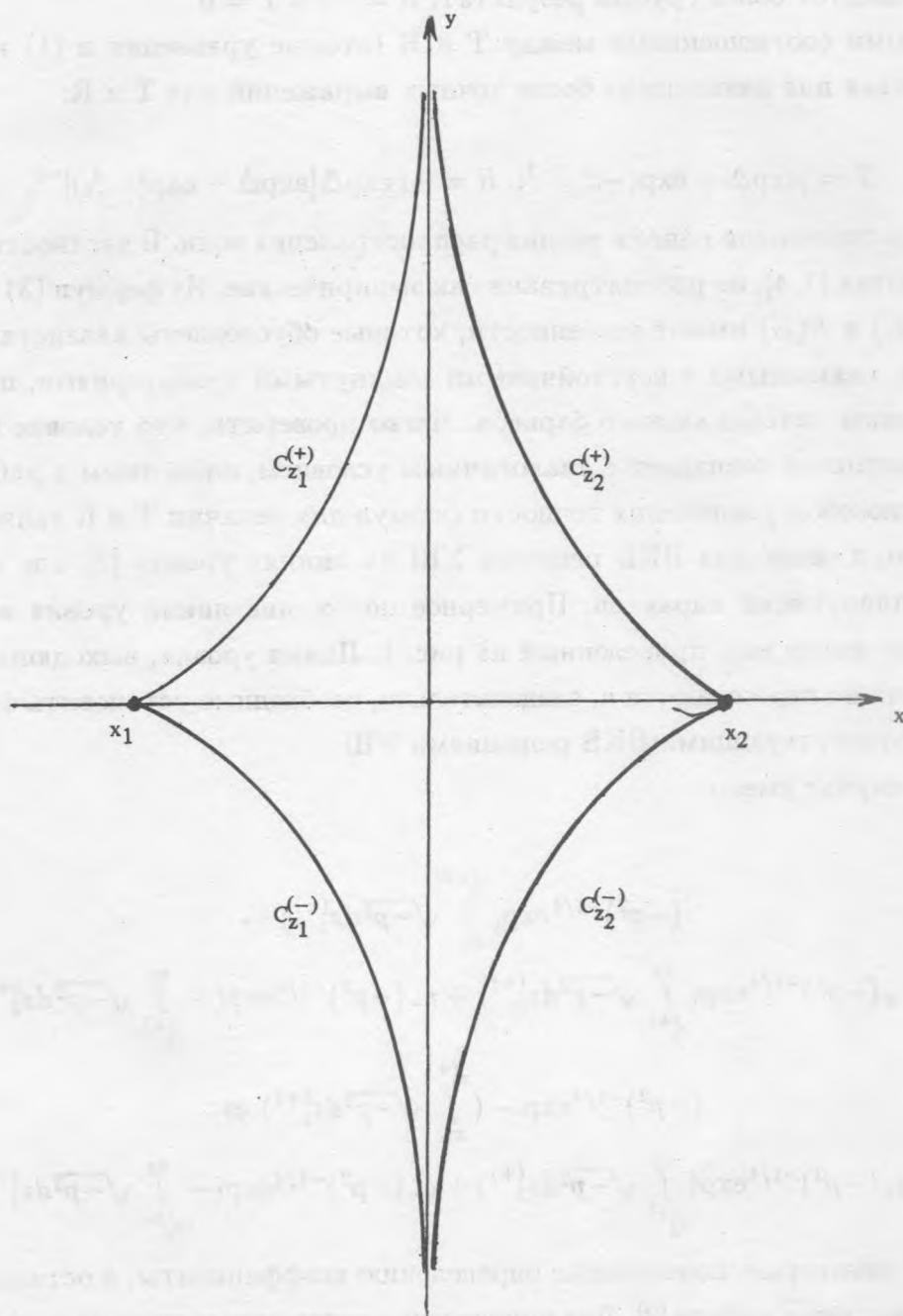


Рис. 1. Линии уровня для задачи об одномерном туннелировании.

Аналогичным образом для второй формулы в (4) получаем

$$q_- = 0; q_+ = \exp(-\Delta). \quad (6)$$

Точно также для нижней части комплексной плоскости положим

$$\begin{aligned} & (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{z_2^{(-)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(-)}\right) \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow & r'_+ (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{x_1}^{z_1^{(-)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(-)}\right) + r'_- (-p^2)^{-1/4} \exp\left(-\int_{x_1}^{z_1^{(-)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(-)}\right); \quad (7) \\ & (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{z_2^{(-)}}^{x_2} \sqrt{-p^2} dz_2^{(-)}\right) \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow & q'_+ (-p^2)^{-1/4} \exp\left(\int_{x_1}^{z_1^{(-)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(-)}\right) + q'_- (-p^2)^{-1/4} \exp\left(-\int_{x_1}^{z_1^{(-)}} \sqrt{-p^2} dz_1^{(-)}\right); \end{aligned}$$

и, соответственно, для констант  $r'_\pm$  и  $q'_\pm$  найдем

$$r'_+ = 0; r'_- = \exp\Delta; q'_- = 0; q'_+ = \exp(-\Delta). \quad (8)$$

Из соотношений (4) – (8) видно, что в рассматриваемом приближении переход с линий уровня  $z_1^{(\pm)}$  на линии уровня  $z_2^{(\pm)}$  заключается в простом аналитическом продолжении ВКБ решений УШ. Легко проверить, что при использовании формул (4) с константами  $r_\pm$  и  $q_\pm$ , приведенными в (5) и (6), для амплитуд прохождения и отражения получаются такие же выражения, как и для рассмотренного выше случая, когда применяются формулы связи на действительной оси. Такой результат связан с тем, что для определения констант  $r_\pm$  и  $q_\pm$  использовался обход по контуру, содержащему действительную ось.

Чтобы получить более точные формулы для амплитуд прохождения и отражения, при определении констант в формулах (4) и (7) используем контур, составленный только из линий уровня  $C_{z_1^{(+)}} C_{z_2^{(+)}} C_{z_2^{(-)}} C_{z_1^{(-)}}$ . Положив

$$r_\pm = r'_\pm; q_\pm = q'_\pm; r_- = \exp\Delta; q_+ = \exp(-\Delta), \quad (9)$$

находим

$$r_+ = 0; q_- = -i \exp(-\Delta). \quad (10)$$

При использовании формул (4) с константами  $r_\pm$  и  $q_\pm$ , приведенными в (9) и (10), для амплитуд прохождения и отражения можно получить формулы, совпадающие с (3). При

этом конечный результат не зависит от направления, в котором применяются формулы связи.

Рассмотрим теперь более точный способ вывода формул связи между ВКБ решениями на разных линиях уровня, основанный на использовании свойств точного решения, для случая туннелирования через квадратичный барьер  $U(x) = U_0 - U_1 x^2$ . решения УШ с таким потенциалом представим в виде  $u_{1,2}(x) = W(\lambda, \pm z)$ , где  $\lambda = (U_0 - E)/2\sqrt{u_1}$ ,  $z = 2^{1/2}U_1^{1/4}x$ , а стандартные решения  $W(\lambda, \pm z)$  определены в работе [6]. При  $\lambda > 0$ ,  $z^2 \gg 4\lambda$ ,  $z > 0$  имеем [6]:

$$W(\lambda, z) = \frac{k^{1/2}}{2p^{1/2}} \left[ \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(i \int_{z_2}^z pdz\right) + \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(-i \int_{z_2}^z pdz\right) \right];$$

$$W(\lambda, -z) = \frac{1}{2k^{1/2}p^{1/2}} \left[ \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(i \int_{z_2}^z pdz\right) + \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(-i \int_{z_2}^z pdz\right) \right]; \quad (11)$$

где  $k = [1 + \exp(2\pi\lambda)]^{1/2} - \exp(\pi\lambda)$ ,  $p = z^2/4 - \lambda$ ,  $z_2$  - правая точка поворота, определяемая условием  $p(z) = 0$ .

Аналогичным образом при  $\lambda > 0$ ,  $z^2 \gg 4\lambda$ ,  $z < 0$  находим

$$W(\lambda, z) = \frac{1}{2k^{1/2}p^{1/2}} \left[ \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(i \int_z^{z_1} pdz\right) + \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(-i \int_z^{z_1} pdz\right) \right];$$

$$W(\lambda, -z) = \frac{k^{1/2}}{2p^{1/2}} \left[ \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(i \int_{z_2}^z pdz\right) + \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \exp\left(-i \int_z^{z_1} pdz\right) \right], \quad (12)$$

где  $z_1$  - левая точка поворота. Из соотношений (11) и (12) получаем следующее соответствие

$$\frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(i \int_z^{z_1} pdz\right) \Leftrightarrow \frac{i}{2} \left(k - \frac{1}{k}\right) \frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(i \int_{z_2}^z pdz\right) + \frac{1}{2} \left(k + \frac{1}{k}\right) \frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(-i \int_{z_2}^z pdz\right);$$

$$\frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(-i \int_z^{z_1} pdz\right) \Leftrightarrow \frac{i}{2} \left(k + \frac{1}{k}\right) \frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(i \int_{z_2}^z pdz\right) - \frac{i}{2} \left(k - \frac{1}{k}\right) \frac{1}{p^{1/2}} \exp\left(-i \int_{z_2}^z pdz\right). \quad (13)$$

Используя (13), а также соотношения  $k^{\pm 1} = [1 + \exp(2\Delta)]^{1/2} \mp \exp\Delta$ , для множителей  $r_{\pm}, r'_{\pm}, q_{\pm}, q'_{\pm}$  в формулах (4) и (7) находим



$$\begin{aligned}
 r_+ &= r'_+ = -i \exp \Delta [(1 + \exp(-2\Delta))^{1/2} - 1]; \quad r_- = r'_- = \exp \Delta; \\
 q_+ &= q'_+ = 2 \exp \Delta [(1 + \exp(-2\Delta))^{1/2} - 1]; \\
 q_- &= q'_- = -i \exp \Delta [(1 + \exp(-2\Delta))^{1/2} - 1].
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

Отметим, что выражения (14) можно получить и рассмотренным выше методом обхода по контуру, составленному из линий уровня  $C_{z_1^{(+)}}$ ,  $C_{z_2^{(+)}}$ ,  $C_{z_2^{(-)}}$ ,  $C_{z_1^{(-)}}$ , если вместо (9) положить

$$r_{\pm} = r'_{\pm}; \quad q_{\pm} = q'_{\pm}; \quad r_- = \exp \Delta; \quad r_+ = q_- . \tag{15}$$

Используя (14), для амплитуд отражения и прохождения имеем

$$T = (1 + \exp 2\Delta)^{-1/2}; \quad R = -i \exp \Delta (1 + \exp 2\Delta)^{-1/2} . \tag{16}$$

Заметим, что формула (16) для амплитуды отражения  $R$  ранее была получена в работе [4] методом, отличным от использованного в данной работе.

Полученные выше результаты можно представить в виде обратимых формул связи между ВКБ решениями УШ по разные стороны от потенциального барьера

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( i \int_z^{z_1} p dz \right) &\Leftrightarrow s_+ \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( i \int_{z_2}^z p dz \right) + s_- \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( -i \int_{z_2}^z p dz \right); \\
 \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( -i \int_z^{z_1} p dz \right) &\Leftrightarrow t_+ \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( i \int_{z_2}^z p dz \right) + t_- \frac{1}{p^{1/2}} \exp \left( -i \int_{z_2}^z p dz \right).
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Для случая, когда выполняются соотношения (9), выражения для коэффициентов  $s_{\pm}$  и  $t_{\pm}$  в (17) имеют вид:  $s_+ = -i \exp \Delta$ ;  $s_- = \exp \Delta + \exp(-\Delta)$ ;  $t_+ = \exp \Delta$ ;  $t_- = i \exp \Delta$ . Соответственно для случая, когда выполняются соотношения (15), для тех же коэффициентов находим  $s_+ = -i \exp \Delta$ ;  $s_- = (1 + \exp 2\Delta)^{1/2}$ ;  $t_+ = (1 + \exp 2\Delta)^{1/2}$ ;  $t_- = i \exp \Delta$ .

Соотношения (17) известны в литературе как параболические формулы связи для ВКБ решений УШ. Отметим, что по сравнению с известными ранее формулами [7, 8], найденные соотношения имеют более простой вид и, следовательно, более удобны в практических расчетах.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, Наука, 1974.
- [2] Бруев А.С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1-2, 49 (1993).
- [3] Hayes M.G.W. J. Phys., **A6**, 177 (1973).
- [4] Heading J. J. Phys., **A6**, 958 (1973).
- [5] Бруев А.С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11-12, 50 (1991).
- [6] Миллер Дж.Ч.П. Таблицы функций Вебера, ВЦ АН СССР, 1968.
- [7] Сонног J.N.L. Molec. Phys., **15**, 37 (1968).
- [8] Crothers D.S.F. J. Phys., **B9**, L513 (1976).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 16 декабря 1992 г.