УДК 530.145

МОДИФИЦИРОВАННОЕ ВКБ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ДВУХЪЯМНОГО АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

А. С. Бруев

Рассмотрена модификация приближения ВКБ применительно к расчету уровней энергии для потенциала симметричного двухъямного ангармонического осциллятора.

В работе [1] рассмотрена модификация известного приближения ВКБ для уравнения Шредингера (УШ), заключающаяся в последовательном учете экспоненциально малых членов в решении для классически запрещенной области. Эффективность такой модификации продемонстрирована на примере решения ВКБ для параболического потенциального барьера $U(x) = -x^2$. В частности, показано, что при учете соответствующего явления Стокса для асимптотического разложения ВКБ, можно получить формулы для амплитуд прохождения и отражения, имеющие бóльшую точность по сравнению с известными. В данной работе в эффективности такой модификации приближения ВКБ мы убедимся на примере расчета уровней энергии для потенциала симметричного двухъямного ангармонического осциллятора $U(x) = -x^2 + \mu x^4$. При этом нужно принять во внимание, что данная задача часто встречается в физических приложениях [2, 3] и, следовательно, представляет несомненный интерес.

Прежде, чем проводить квантование уровней энергии в рассматриваемом потенциале, убедимся в справедливости соотношения

$$p^{-1/2}\exp[\pm i\int\limits_{x_{1,3}}^{x} pdx] = \exp(\pm is)p^{-1/2}\exp[\mp i\int\limits_{x}^{x_{2,4}} pdx], \qquad (1)$$

используемого при квантовании по методу ВКБ. Здесь $p = \sqrt{E-U}$[1], $s = \int\limits_{x_1}^{x_2} pdx =$

[1]Используется система единиц, для которой $2m = \hbar = 1$.

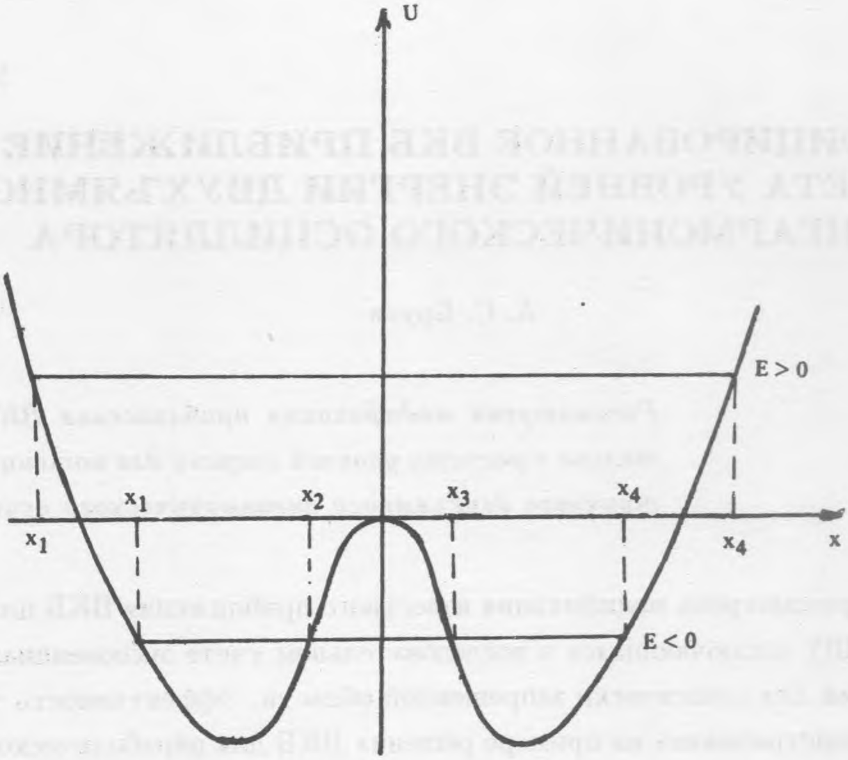

Рис. 1.

$\int_{x_3}^{x_4} pdx$, x_i, $i = 1 - 4$ – точки поворота (рис. 1). Отметим, что в (1) значения E таковы, что $E > U(x)$. Воспользуемся свойствами точного решения УШ для потенциала $U(x) = U_0 + U_1 x^2$, где $U_0, U_1 > 0$. При $E > U(x)$ решения УШ с таким потенциалом представим в виде

$$u_{1,2}(x) = U(\lambda, \pm z),$$

где $\lambda = (U_0 - E)/2\sqrt{U_1}$, $z = 2^{1/2}U_1^{1/4}x$, а стандартные решения $U(\lambda, \pm z)$ определены в [4]. При $\lambda < 0$, $z^2 - 4 \mid \lambda \mid >> 0$, $z > 0$ имеем [4]:

$$U(\lambda, z) = \frac{\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \lambda\right)}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right], \tag{2}$$

$$U(\lambda,-z)=\frac{\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\lambda\right)}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}\left[2\cos\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right]-\right.$$

$$\left.-\sin\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right]\right],$$

где $p^2=-z^2/4-\lambda$, z_2 – правая точка поворота, определяемая условием $p(z)=0$. Аналогичным образом, при $\lambda<0$, $z^2-4\mid\lambda\mid>>0$, $z<0$ находим

$$U(\lambda,-z)=\frac{\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\lambda\right)}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z}^{z_1}(-p^2)^{1/2}dz\right],\tag{3}$$

$$U(\lambda,z)=\frac{\sqrt{\Gamma\left(\frac{1}{2}-\lambda\right)}}{2^{3/4}\pi^{1/4}}\left[2\cos\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{z}^{z_1}(-p^2)^{1/2}dz\right]-\right.$$

$$\left.-\sin\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z}^{z_1}(-p^2)^{1/2}dz\right]\right],$$

где z_1 – левая точка поворота. Из (2) и (3) следует определенное соответствие между функциями ВКБ, заданными по разные стороны от потенциальной ямы:

$$(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z}^{z_1}(-p^2)^{1/2}dz\right]\leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow 2\cos\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right]-\sin\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right];\tag{4}$$

$$(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{z}^{z_1}(-p^2)^{1/2}dz\right]\leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow\frac{1}{2}\cos\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right]+\sin\pi\lambda(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{z_2}^{z}(-p^2)^{1/2}dz\right].$$

Соотношения (4) для функций ВКБ можно записать для случая произвольной потенциальной ямы, если использовать соотношение

$$s=-\lambda\pi,\tag{5}$$

где $s = \int\limits_{x_1}^{x_2} pdx$ – фазовый интеграл. Легко проверить, что соотношения (4), переписанные с учетом (5), можно также получить с помощью известных формул связи для функций ВКБ при переходе через линейную точку поворота [5]. Отсюда следует, что, в отличие от случая потенциального барьера [1], когда в подбарьерной области нарушается аналогичное (1) соотношение, в области потенциальной ямы можно использовать стандартное приближение ВКБ.

Рассмотрим квантование уровней энергии в данном потенциале. Для этого используем формулы связи для функций ВКБ [5] с учетом описанного в [1] явления Стокса. Задавая в классически запрещенной области, расположенной слева от потенциальной ямы, волновую функцию в виде

$$\Psi(x) = (-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_x^{x_1}(-p^2)^{1/2}dx\right],$$

где x_1 – точка поворота (рис. 1), при $E < U_0$, где U_0 – высота потенциального барьера, для волновой функции в классически запрещенной области, расположенной справа от потенциальной ямы, находим:

$$\Psi(x) = [\cos 2s(\exp 2\Delta + 1)^{1/2} + \exp\Delta](-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{x_4}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right] + \tag{6}$$

$$+\frac{1}{2}\left[\sin 2s(\exp 2\Delta + 1)^{1/2}\right](-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{x_4}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right],$$

где $\Delta = \int\limits_{x_2}^{x_3}(-p^2)^{1/2}dx$. Для того, чтобы волновая функция при $x \to \infty$ стремилась к нулю, необходимо потребовать, чтобы выполнялось равенство $\cos 2s(\exp 2\Delta + 1)^{1/2} + \exp\Delta = 0$, из которого получаем условие

$$\cos s = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\left[1 - (1 + \exp(-2\Delta))^{-1/2}\right]^{1/2}. \tag{7}$$

При $\Delta >> 1$ из (7) получается известный результат $s = \pi[N + (1/2)] \pm (1/2)\exp(-\Delta)$, где $N = 0, 1, 2...$, справедливый для уровней, расположенных вблизи дна потенциальной ямы.

Аналогичным образом при $E > U_0$ вместо (6) получаем

$$\Psi(x) = [\cos s'(\exp i\Delta' + 1)^{1/2} + \exp i\Delta'](-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{x_4}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right] + \tag{8}$$
$$+\frac{1}{2}\left[\sin s'(\exp 2i\Delta' + 1)^{1/2}\right](-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{x_4}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right],$$

где $s' = \int\limits_{x_1}^{x_4} p dx$, $\Delta' = \int\limits_{x_2}^{x_3} p dx$, причем значения $x_{2,3}$ при $E > U_0$ комплексны. С помощью (8) вместо (7) находим следующее условие:

$$\cos s' = -\exp i\Delta'[\exp 2i\Delta' + 1]^{-1/2}. \tag{9}$$

Из (9) при $\mathrm{Im}\Delta' >> 1$ для уровней, расположенных много выше потенциального барьера, имеем

$$s' = \pi(N + 1/2) - \exp(iRe\Delta')\exp(-\mathrm{Im}\Delta'), \tag{10}$$

где $N = 0, 1, 2....$ Из формулы (10) видно, что для уровней энергии много выше потенциального барьера отличие их положений от уровней, получаемых с помощью стандартного приближения ВКБ, экспоненциально мало. Приведем необходимые для расчета уровней энергии выражения для величин s, s', Δ, Δ':

$$s = \frac{1}{3\sqrt{2}\mu}\left[1 + \sqrt{1 + 4\mu E}\right]^{1/2}\left[E\left(\frac{2\sqrt{1 + 4\mu E}}{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}\right) - (1 - \sqrt{1 + 4\mu E})K\left(\frac{2\sqrt{1 + 4\mu E}}{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}\right)\right],$$

$$\Delta = \frac{\sqrt{2}}{3\mu}\left[1 + \sqrt{1 + 4\mu E}\right]^{1/2}\left[E\left(\frac{1 - \sqrt{1 + 4\mu E}}{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}\right) - \sqrt{1 + 4\mu E}K\left(\frac{1 - \sqrt{1 + 4\mu E}}{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}\right)\right],$$

$$s' = \frac{(1 + 4\mu E)^{1/4}}{3\mu}\left[(\sqrt{1 + 4\mu E} - 1)K\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}{2\sqrt{1 + 4\mu E}}\right) + 2E\left(\frac{1 + \sqrt{1 + 4\mu E}}{2\sqrt{1 + 4\mu E}}\right)\right], \tag{11}$$

$$\Delta' = i\frac{(1 + 4\mu E)^{1/4}}{3\mu}\left[(\sqrt{1 + 4\mu E} + 1)K\left(\frac{\sqrt{1 + 4\mu E} - 1}{2\sqrt{1 + 4\mu E}}\right) - 2E\left(\frac{\sqrt{1 + 4\mu E} - 1}{2\sqrt{1 + 4\mu E}}\right)\right],$$

где $K(q)$ и $E(q)$ – полные эллиптические интегралы.

Таблица 1

Результаты расчетов энергий уровней

μ	Энергии уровней	Приближение ВКБ	Модифицир. приближ. ВКБ	Численные значения [6]
0,05	E_0	–3,62616	–3,62616	–3,6415779
	E_1	–3,62453	–3,62453	–3,6398660
	E_2	–1,22002	–1,21983	–1,2530829
	E_3	–1,11282	–1,11321	–1,1511617
0,2	E_0	–0,24611	–0,23076	–0,30824658
	E_1	0,45183	0,22329	0,28553020
	E_2	1,96573	1,99866	2,0203778
	E_3	3,88412	3,88031	3,8982747

Результаты расчетов уровней энергии, полученные с помощью формул (7), (9) и (11), приведены в таблице 1. Здесь же указаны данные численных расчетов [6], а также данные, полученные с помощью стандартного приближения ВКБ [5]. Как видно из приведенных результатов, предлагаемая модификация приближения ВКБ позволяет заметно повысить точность расчета уровней энергии, особенно для надбарьерной области энергий.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Бруев А. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11-12, 30 (1993).

[2] Bhattacharya S. K., Rau A. R. P., Phys. Rev., **A26**, 2315 (1982).

[3] Bhattacharya S. K., Phys. Rev., **A31**, 1991 (1985).

[4] Справочник по специальным функциям, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, М., Наука, 1979.

[5] Murphy E. L., Good R. H., Jr., Journ. Math. and Phys., **43**, 251 (1964).

[6] Banerjee K., Bhatnagar S. P., Phys. Rev. **D18**, 4767 (1978).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 9 февраля 1994 г.