УДК 530.145

О НЕКОТОРЫХ СВОЙСТВАХ ВКБ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

А. С. Бруев

Описано ранее не рассматривавшееся явление Стокса для асимптотического разложения ВКБ решения уравнения Шредингера для задачи о туннелировании через потенциальный барьер.

Волновая функция в приближении ВКБ имеет вид [1]

$$\Psi_{BKB}(x) = c_1 p^{-1/2} \exp(i \int p dx) + c_2 p^{-1/2} \exp(-i \int p dx), \tag{1}$$

где $p = (E - U)^{1/2}$ – классический импульс; $c_{1,2}$ – произвольные постоянные; система единиц такова, что $2m = \hbar = 1$. В классически запрещенной области $E < U$ и, следовательно, в (1) содержится экспоненциально малый член. Как правило, подобными членами пренебрегают [1], так что асимптотическое разложение ВКБ волновой функции удовлетворяет общему определению Пуанкаре для асимптотического разложения [2].

В данной работе предлагается отступить от известного случая [1] и сохранить экспоненциально малые члены в асимптотическом разложении ВКБ. Такое модифицированное разложение ВКБ должно удовлетворять известному определению асимптотического разложения, данному Ватсоном [3]. О том, что подобный прием позволяет повысить точность некоторых асимптотических разложений, известно очень давно. В частности, Стокс [4] убедился в этом на примере асимптотического разложения функции Эйри. В данной работе аналогичное повышение точности асимптотического разложения ВКБ используется для получения важных на практике формул для амплитуд прохождения и отражения через одномерный потенциальный барьер.

Чтобы получить формулы для амплитуд прохождения и отражения, будем использовать обратимые формулы связи для функций ВКБ, найденные в работе [5] с помощью асимптотических разложений ватсоновского типа для функций Эйри. Очевидные выкладки приводят к известным формулам для амплитуд прохождени (T) и отражения (R) [6]

$$T = \left[\exp\Delta + \tfrac{1}{4}\exp(-\Delta)\right]^{-1},$$
$$R = -i\left[\exp\Delta - \tfrac{1}{4}\exp(-\Delta)\right]\left[\exp\Delta + \tfrac{1}{4}\exp(-\Delta)\right]^{-1}, \tag{2}$$

где Δ – туннельный интеграл. Однако, в рамках используемого приближения, формулы (2) справедливы только тогда, когда в подбарьерной области отсутствуют линии Стокса. В противном случае нарушается следующее очевидное соотношение:

$$(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\pm\int\limits_{x_1}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right] = \exp(\pm\Delta)(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\mp\int\limits_{x}^{x_2}(-p^2)^{1/2}dx\right], \tag{3}$$

для значений x таких, что $U > E$. В (3) $\Delta = \int_{x_1}^{x_2}(-p^2)^{1/2}dx$, где $x_{1,2}$ – точки поворота. Вместо (3) в подбарьерной области для функций ВКБ положим:

$$(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\pm\int\limits_{x_1}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right] \leftrightarrow \binom{a_+}{b_+}(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{x}^{x_2}(-p^2)^{1/2}dx\right] +$$
$$+\binom{a_-}{b_-}(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{x}^{x_2}(-p^2)^{1/2}dx\right], \tag{4}$$

где $a_\pm$ и $b_\pm$ – некоторые подлежащие определению коэффициенты. Чтобы их найти, воспользуемся свойствами точного решения уравнения Шредингера (УШ) для барьера $U(x) = U_0 - U_1x^2$, где $U_0, U_1 > 0$. Решения УШ с таким потенциалом представим в виде

$$u_{1,2}(x) = W(\lambda, \pm Z),$$

где $\lambda = \frac{U_0 - E}{2\sqrt{U_1}}$, $Z = 2^{1/2}U_1^{1/4}x$, а стандартные решения $W(\lambda, \pm Z)$ определены в [7]. При $\lambda > 0$, $Z^2 \gg 4\lambda$, $Z > 0$ имеем [7]:

$$W(\lambda, \pm Z) = \frac{k^{\pm 1/2}}{2p^{1/2}}\left[\exp\left(\pm\frac{\pi i}{4}\right)\exp\left(i\int\limits_{Z_2}^{Z}pdZ\right) + \exp\left(\mp\frac{\pi i}{4}\right)\exp\left(-i\int\limits_{Z_2}^{Z}pdZ\right)\right], \tag{5}$$

где $k = [1 + \exp 2\pi\lambda]^{1/2} - \exp\pi\lambda$; $p = \left(\frac{1}{4}Z^2 - \lambda\right)^{1/2}$; Z_2 – правая точка поворота, определяемая условием $p(Z) = 0$. Аналогичным образом при $\lambda > 0$, $Z^2 \gg 4\lambda$, $Z < 0$ находим:

$$W(\lambda, \pm Z) = \frac{k^{\mp 1/2}}{2p^{1/2}}\left[\exp\left(\mp\frac{\pi i}{4}\right)\exp\left(i\int_Z^{Z_1} pdZ\right) + \exp\left(\pm\frac{\pi i}{4}\right)\exp\left(-i\int_Z^{Z_1} pdZ\right)\right], \quad (6)$$

где Z_1 – левая точка поворота. Из соотношений (5) и (6) следует определенное соответствие между функциями ВКБ, заданными по разные стороны от потенциального барьера:

$$p^{-1/2}\exp\left(\pm i\int_Z^{Z_1} pdZ\right) \leftrightarrow \pm\tfrac{1}{2}\left(k - \tfrac{1}{k}\right)p^{-1/2}\exp\left(\pm i\int_{Z_2}^{Z} pdZ\right) +$$
$$+\tfrac{1}{2}\left(k + \tfrac{1}{k}\right)p^{-1/2}\exp\left(\mp i\int_{Z_2}^{Z} pdZ\right). \quad (7)$$

Если выразить коэффициенты перед функциями ВКБ в (7) через туннельный интеграл, воспользовавшись соотношениями

$$k - \frac{1}{k} = -2\exp\Delta, \; k + \frac{1}{k} = 2(1 + \exp 2\Delta)^{1/2}, \quad (8)$$

то формулы (7) можно будет использовать как параболические формулы связи для функций ВКБ. При этом найденное соотношение имеет более простой вид по сравнению с известными ранее формулами [8], [9].

Используя известные формулы связи для функций ВКБ при переходе через линейную точку поворота [5], с помощью (7) и (8) для коэффициентов $a_\pm$ и $b_\pm$ в (4) находим:

$$a_+ = 0, \; a_- = \frac{1}{2}[(\exp 2\Delta + 1)^{1/2} + \exp\Delta],$$
$$b_+ = 2[(\exp 2\Delta + 1)^{1/2} - \exp\Delta], \; b_- = 0. \quad (9)$$

Если подставить найденные соотношения (9) в формулу (4) и сравнить их с формулой (3), то легко заметить, что формула (3) справедлива с точностью до экспоненциально малых членов:

$$(-p^2)^{-1/4}\exp\left[\pm\int\limits_{x_1}^{x}(-p^2)^{1/2}dx\right] \leftrightarrow$$
$$2^{\mp 1}[(\exp 2\Delta + 1)^{1/2} \pm \exp\Delta](-p^2)^{-1/4}\exp\left[\mp\int\limits_{x}^{x_2}(-p^2)^{1/2}dx\right]. \qquad (10)$$

Чтобы понять причину, по которой вместо формулы (3) нужно использовать формулу (10), рассмотрим поведение функций ВКБ в комплексной плоскости. Соответственно будем считать, что в верхней части комплексной плоскости выполняется аналогичное (4) соотношение, но с другими коэффициентами $r_\pm$ и $q_\pm$. Для нижней части комплексной плоскости аналогичные коэффициенты обозначим как $r'_\pm$ и $q'_\pm$.

Теперь нам понадобятся формулы связи для функций ВКБ по произвольному (но отличному от действительной оси) направлению в комплексной плоскости при переходе через линейную точку поворота. Используя известные асимптотические разложения функций Эйри [10], стандратным способом находим требуемые формулы связи:

$$c_+p^{-1/2}\exp\left(i\int\limits_{Z}^{x_1}pdZ\right) + c_-p^{-1/2}\exp\left(-i\int\limits_{Z}^{x_1}pdZ\right) \leftrightarrow$$
$$\left[c_+\exp\left(-\frac{\pi i}{4}\right) + c_-\exp\frac{\pi i}{4}\right](-p^2)^{-1/4}\exp\left[\int\limits_{x_1}^{Z^{(\pm)}}(-p^2)^{1/2}dZ^{(\pm)}\right] + \qquad (11)$$
$$+ c_\pm\exp\left(\pm\frac{\pi i}{4}\right)(-p^2)^{-1/4}\exp\left[-\int\limits_{x_1}^{Z^{(\pm)}}(-p^2)^{1/2}dZ^{(\pm)}\right],$$

где $c_\pm$ – произвольные постоянные; x_1 – координата точки поворота, расположенной слева от классически запрещенной области; $Z^{(\pm)}$ – произвольная комплексная координата в верхней (нижней) полуплоскости. В том случае, если координата точки поворота расположена справа от классически запрещенной области, в формуле (11) нужно поменять пределы интегрирования и произвести замену $Z^{(\pm)} \to \tilde{Z}^{(\mp)}$, где $\tilde{Z}^{(\mp)}$ – произвольная комплексная координата в нижней (верхней) полуплоскости.

Используя формулы (7), (8) и (11), находим:

$$r_+ = r'_+ = -i[\sqrt{\exp 2\Delta + 1} - 1],$$
$$r_- = r'_- = \exp\Delta,$$

$$q_+ = q'_+ = 2[\sqrt{\exp 2\Delta + 1} - 1],$$
$$q_- = q'_- = -i[\sqrt{\exp 2\Delta + 1} - 1].$$

Из найденных соотношений следует, что в подбарьерной области в разных секторах комплексной плоскости асимптотическое разложение ВКБ волновой функции имеет различную форму, что свидетельствует о наличии в подбарьерной области линий Стокса. В частном случае барьера $U_0 - U_1 x^2$ этот результат подтверждается известными свойствами асимптотических разложений функции параболического цилиндра [10].

Учет отмеченного явления Стокса позволяет существенно увеличить точность формул ВКБ, определяющих амплитуды прохождения и отражения для потенциального барьера. Используя формулу (10), получаем:

$$T = [\exp 2\Delta + 1]^{-1/2},$$
$$R = -i \exp \Delta [\exp 2\Delta + 1]^{-1/2}. \tag{12}$$

Формулы (12) совпадают с аналогичными формулами работы [11], выведенными с помощью формул связи для функций ВКБ на линиях уровня.

Из формул (12) видно, что функции $T(E)$ и $R(E)$ имеют особенности, обусловленные квазистационарными состояниями, возникающими из-за наличия неустойчивых замкнутых траекторий, проходящих вблизи вершины потенциального барьера. Значения комплексных энергий, найденные из особенностей функций $T(E)$ и $R(E)$ в (12), совпадают с аналогичными величинами, полученными с помощью соответствующего квазиклассического условия квантования [12, 13]. В то же время, формулы (2) неверно предсказывают значения комплексных энергий для указанных состояний, что, естественно, свидетельствует об их меньшей точности.

Аналогичное явление для асимптотического разложения ВКБ волновой функции проявляется и в надбарьерном прохождении. В частности, его учет позволяет получить важную формулу для амплитуды надбарьерного отражения. В надбарьерном случае вместо формулы (4) положим

$$p^{-1/2} \exp\left(\pm i \int_x^0 p dx\right) \leftrightarrow \begin{pmatrix} a'_+ \\ b'_+ \end{pmatrix} p^{-1/2} \exp\left(i \int_0^x p dx\right) + \begin{pmatrix} a'_- \\ b'_- \end{pmatrix} p^{-1/2} \exp\left(-i \int_0^x p dx\right),$$

где $a'_\pm$ и $b'_\pm$ – некоторые подлежащие определению коэффициенты. Для их определения поступим точно так же, как и в предыдущем случае. При $\lambda < 0$, $Z^2 \gg 4 \mid \lambda \mid$, $Z > 0$ имеем [7]:

$$W(\lambda, \pm Z) = \frac{k^{\pm 1/2}}{2p^{1/2}} \left[\exp\left(\pm \frac{\pi i}{4}\right) \exp\left(i \int_0^Z pdZ\right) + \exp\left(\mp \frac{\pi i}{4}\right) \exp\left(-i \int_0^Z pdZ\right)\right], \quad (13)$$

где использованы те же обозначения, что и в (5). Аналогичным образом при $\lambda < 0$, $Z^2 \gg 4 \mid \lambda \mid$, $Z < 0$ получаем:

$$W(\lambda, \pm Z) = \frac{k^{\mp 1/2}}{2p^{1/2}} \left[\exp\left(\mp \frac{\pi i}{4}\right) \exp\left(i \int_Z^0 pdZ\right) + \exp\left(\pm \frac{\pi i}{4}\right) \exp\left(-i \int_Z^0 pdZ\right)\right]. \quad (14)$$

Из соотношений (13) и (14) можно получить соответствие для функций ВКБ, заданных по разные стороны от потенциального барьера. Находим

$$\begin{gathered} p^{-1/2} \exp\left(\mp i \int_Z^0 pdZ\right) \leftrightarrow \\ \tfrac{1}{2}\left(k + \tfrac{1}{k}\right) p^{-1/2} \exp\left(\pm i \int_0^Z pdZ\right) \pm \tfrac{i}{2}\left(\tfrac{1}{k} - k\right) \exp\left(\mp i \int_0^Z pdZ\right). \end{gathered} \quad (15)$$

В соотношении (15) коэффициенты перед функциями ВКБ выразим через фазовый интеграл $\Delta' = i \int_{x_1}^{x_2} pdx$, где $x_{1,2}$ – комплексные точки поворота. Для этого воспользуемся соотношениями

$$k - \frac{1}{k} = 2\exp(+\Delta'),\ k + \frac{1}{k} = 2[1 + \exp(+2\Delta')]^{1/2}. \quad (16)$$

С помощью (15), (16) для амплитуд прохождения и отражения в надбарьерном случае находим:

$$\begin{aligned} T &= [1 + \exp(+2\Delta')]^{-1/2}, \\ R &= -i\exp(+\Delta')[1 + \exp(+2\Delta')]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (17)$$

Полученные в (17) выражения намного точнее аналогичных выражений, найденных в работе [14] методом, отличным от рассмотренного. Формулы (17) переходят в формулы работы [14] при условии $\mid \Delta' \mid \gg 1$. При этом $T \simeq 1$, $R \simeq -i\exp(+\Delta')$.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика, М., Наука, 1974.

[2] Poincare H., Acta Math., **8**, 295 (1886).

[3] Watson G. N., Phil. Trans. Roy. Soc. (Lond.), **A211**, 279 (1911).

[4] Stokes G. G., Trans. Cambr. Phil. Soc., **10**, 105 (1857).

[5] Murphy E. L., Good R. H. Jr., J. Math. and Phys., **XLIII**, 251 (1961).

[6] Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. Квантовая механика, М., Наука, 1974.

[7] Миллер Дж. Ч. Таблицы функций Вебера, М., ВЦ АН СССР, 1968.

[8] Connor J. N. L., Molec. Phys., **15**, 37 (1968).

[9] Crothers D. S. F., J. Phys., **B9**, L513 (1976).

[10] Славянов С. Ю. Асимптотика решений одномерного уравнения Шредингера, ЛГУ, 1990.

[11] Бруев А. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1–2, 54 (1993).

[12] Schutz B. F., Will C. M., Astroph. Journ., **291**, L33 (1985).

[13] Бруев А. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 11–12, 50 (1991).

[14] Покровский В. П., Халатников И. М. ЖЭТФ, **40**, 1713 (1961).

Поступила в редакцию 8 декабря 1993 г.