Краткие сообщения по физике № 5 — 1991 г.

УДК 530.145

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ВКБ-КВАНТОВАНИЯ ДЛЯ ТОЧНОРЕШАЕМЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ В УРАВНЕНИИ ШРЕДИНГЕРА

А.С. Брусв

Рассмотрена модификация метода ВКБ, дающая в нулевом приближении точное значение спектра для одномерных потенциалов, обладающих форм-инвариантностью.

В настоящее время метод ВКБ по-прежнему привлекает внимание; рассматриваются различные варианты его усовершенствования и расширения области применения /1—3/. Этой цели служит и суперсимметричное ВКБ-приближение, рассмотренное в работе /4/. В частности, в работах /4—6/ показано, что уже в низшем суперсимметричном ВКБ-приближении для некоторых одномерных потенциалов получается точное выражение для энергий связанных состояний. Как оказалось, это свойство связано с форминвариантностью этих потенциалов /7/.

В данной работе на конкретном примере показано, что возможна иная (отличная от суперсимметричной) модификация ВКБ-приближения, которая для тех же потенциалов в нулевом приближении приводит к точным значениям для энергий связанных состояний. Эта модификация заключается в учете искажений фаз ВКБ-функций, обусловленных особенностями потенциала в комплексной плоскости. Для приложений такой вариант ВКБ-приближения представляет интерес, поскольку не требуется знать выражение для суперпотенциала.

В качестве конкретного потенциала выберем известный точнорешаемый потенциал Розена — Морзе /8/

$$U(x) = A\exp 2x\ (1 + \exp 2x)^{-1} - B\exp 2x\ (1 + \exp 2x)^{-2},$$

где $B > A > 0$. Уравнение Шредингера* для этого потенциала при замене $z = -e^{2x}$, $\psi(x) = z^{\mu}(1 - z)^{\nu}u(z)$, $\mu = (1/2)\sqrt{-E}$, $\nu = 1/2 + (1/2)\sqrt{1 + B}$ можно привести к стандартному гипергеометрическому уравнению. Соответственно, решение $u(z)$, удовлетворяющее условию конечности решения при $x \to -\infty$, имеет вид:

---

*Используем систему единиц, в которой $2m = \hbar = 1$.

$$u(z) = F(\mu + \nu + (1/2)\sqrt{A - E},\ \mu + \nu - (1/2)\sqrt{A - E};\ 2\mu + 1;\ z),$$

где $F(a, b; c; x)$ — гипергеометрическая функция. Требование, чтобы при $E < 0$ волновая функция была нормируема, определяет дискретный спектр энергий

$$E_N = -\frac{1}{4}\left[\sqrt{B + 1} - (2N + 1) - \frac{A}{\sqrt{B + 1} - (2N + 1)}\right]^2, \tag{1}$$

где $N = 0, 1, 2....$ Расчет энергий E_N с помощью одномерного квазиклассического уравнения квантования $S = \pi(N + 1/2)$, где $S = \int_{x_1}^{x_2} [E - U(x)]^{1/2} dx$ — интеграл действия для движения в яме, $x_{1,2}$ — точки поворота /9/, приводит к формуле, отличающейся от (1) тем, что вместо $B + 1$ стоит величина B.

Покажем как можно модифицировать ВКБ-приближение, чтобы устранить этот недостаток. Условие применимости ВКБ-приближения требует выполнения неравенства $|d\lambda/dx| \ll 1$, где $\lambda = [E - U(x)]^{-1/2}$ — де-бройлевская длина волны частицы /9/. В рассматриваемом случае это условие нарушается не только вблизи классических точек поворота, но и вблизи точек сингулярностей потенциала $x_n = \pm i\pi(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2...$, расположенных на мнимой оси комплексной плоскости. В частности, можно показать, что при конечных значениях E решение уравнения Шредингера вблизи точек x_n имеет квазиклассический вид лишь при выполнении неравенства $B \gg 1$. При $E \to \infty$ для асимптотики решения уравнения Шредингера вблизи точек x_n находим:

$$\psi(z) \sim E^{1/4} \cos\left(\sqrt{E}\, z - (\pi/4)\sqrt{B + 1} - \pi/4\right), \tag{2}$$

где $z = x_n - x$. Это выражение можно переписать следующим образом: $\psi(z) \sim p_1^{-1/2} \cos\left(\int_{z_1}^{z} p_1 dz - \pi/4\right)$,

где $p_1 = \sqrt{E - (B + 1)/4z^2}$, z_1 — координата точки поворота. Из полученного выражения видно, что если использовать стандартные ВКБ-функции, то для $\psi(z)$ при $E \to \infty$ получится выражение, аналогичное (2), за исключением того, что под корнем вместо $B + 1$ будет стоять величина B. Поэтому для повышения точности приближения будем использовать ВКБ-функции с искаженной фазой, возникающие при замене в исходном потенциале константы B на $B + 1$. При этом фаза модифицированной ВКБ-функции будет совпадать с фазой точной волновой функции вблизи точек $x = x_n$ в пределе $E \to \infty$. Модифицированные ВКБ-функции, в отличие от обычных ВКБ-функций, можно использовать вблизи точек $x = x_n$ при любых значениях параметра B. Кроме того, ясно, что использование модифицированных ВКБ-функций приводит к уравнению квантования, содержащему действие с модифицированным потенциалом, так что для энергий связанных состояний уже в нулевом приближении получается точный результат.

Отметим, что с точки зрения общего разложения решения уравнения Шредингера по параметру квазиклассичности, использованию модифицированных ВКБ-функций соответствует выделение определенной сходящейся подпоследовательности бесконечного числа членов ряда. Поэтому рассмотренное выше модифицированное ВКБ-приближение не имеет явного параметра малости. Если не использовать модифицированные ВКБ-функции, то аналогичного эффекта можно добиться только при рассмотрении высших приближений ВКБ. Для случая центрально-симметричного поля, когда особенность потенциала находится на действительной оси*, подобные расчеты проведены в работе /10/.

Полученный результат означает, что для ВКБ-приближения наряду с действительными траекториями необходимо рассматривать и комплексные траектории частицы. Покажем это более очевидным способом. Сделав замену в уравнении Шредингера $\psi(x) = (z - 1)^{-1/2}u(z)$, $z = 1 + \exp(-2x)$ для функции $u(z)$ получаем уравнение

$$4(z-1)^2 d^2u/dz^2 + [E + 1 - (A - B)/z - B/z^2]u = 0 \tag{3}$$

с эффективным потенциалом $U_{ef}(z) = (A - B)/z + B/z^2$, эффективной массой $m_{ef} = 1/8(z - 1)^2$ и эффективной энергией $E_{ef} = E + 1$. Вблизи точки $z = 0$ асимптотики линейно независимых решений уравнения (3) выражаются через функции Бесселя $J_\nu(x)$: $u_{1,2}(z) = z^{1/2}J_{\pm(1/2)\sqrt{1+B}}(\frac{1}{2}\sqrt{1 + E}\, z)$. Конечность волновой функции при $z = 0$ требует выбора регулярного решения и, соответственно, верхнего знака в приведенном выражении. При $E \to \infty$ имеем $u(z) = \cos(\frac{1}{2}\sqrt{E}\, z - \frac{\pi}{4}\sqrt{B + 1} - \frac{\pi}{4})$, что является суперпозицией двух ВКБ-функций, для которых такое же выражение для фаз получается при замене в исходном потенциале константы B на B + 1.

Точка $z = 1$ для уравнения (3) является классической точкой поворота, отделяющей классически разрешенную область $1 < z < \infty$ от классически запрещенной области $0 < z < 1$, а значения x являются комплексными. Вблизи точки $z = 1$ асимптотики линейно независимых решений уравнения (3) также выражаются через функции Бесселя

---

* Модификацию ВКБ-функций в этом случае называют поправкой Лангера.

$$u_{1,2}(z) = (z-1)^{1/2} J_{\pm(1/2)\sqrt{A-E}}\left[\frac{i}{2}\sqrt{A+2B}\,(z-1)\right].$$

Конечность волновой функции при z = 1 для значений E < A требует выбора верхнего знака в приведенном выражении. При $B \to \infty$ для асимптотики выбранного решения находим

$$u(z) = \cos\left[\frac{i}{2}\sqrt{A+2B}\,(z-1) - \frac{\pi}{4}\sqrt{A-E} - \frac{\pi}{4}\right],$$

что является суперпозицией двух ВКБ-функций, для которых такое же выражение для фазы получается при замене $E_{ef} = E + 1$ на E. Если вернуться к переменной x, то использование уравнения квантования с учетом модификации потенциала дает точный результат для энергий связанных состояний, приведенный в (1).

Аналогичным образом можно рассмотреть модификацию ВКБ-приближения для других форминвариантных одномерных потенциалов /11/, для которых известно точное выражение для спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dolinsky T. Phys. Lett., A, **132**, 69 (1988).
2. Бандман Т.М., Раутиан С.Г. ЖЭТФ, **96**, 1587 (1989).
3. Мур В.Д., Попов В.С. Письма в ЖЭТФ, **51**, 499 (1990).
4. Comtet A., Bandrank A.D., Campbell D.K. Phys. Lett., B, **150**, 159 (1985).
5. Khare A. Phys. Lett., B, **161**, 131 (1985).
6. Kasap E., Gonul B., Simsek M. Chem. Phys. Lett., **172**, 499 (1990).
7. Dutt R., Khare A., Sukhatme U.P. Phys. Lett., **181**, 295 (1986).
8. Rosen N., Morse P.M. Phys. Rev., **42**, 210 (1932).
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, М., Наука, 1974.
10. Watson J.K.G. J. Chem. Phys., **90**, 6443 (1989).
11. Генденштейн Л.Э. Письма в ЖЭТФ, **38**, 299 (1983).

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 12 февраля 1991 г.