

УДК 530.145

КОРРЕКЦИЯ МЕТОДА ВКБ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ ПОВОРОТА. НОВЫЙ ПОДХОД К СТАРОЙ ПРОБЛЕМЕ

Ю. К. Хохлов

Предлагаются способы построения неособенных приближенных выражений для амплитудной функции $\beta(x)$ решения одномерного уравнения Шредингера. Вдали от точки поворота найденные функции плавно переходят в обычные амплитудные функции ВКБ. Отыскание фазы сводится к квадратуре. Необходимость в обычных для ВКБ "формулах связи" отпадает.

Говоря ниже о методе ВКБ, мы будем подразумевать его первоначальную версию, излагаемую в большинстве учебников по квантовой механике. О современном состоянии этого направления можно судить, например, по работам [1, 2].

Чтобы изложить указанную в заголовке тему, достаточно разобрать какой-либо несложный пример уравнения, содержащего точку поворота.

Пусть это будет уравнение вида

$$y'' + Q(x)y = 0, \quad (1)$$

в котором $Q(x) = 1 - L(L+1)/x^2 - V(x)$, где $x \in (0, \infty)$; $L = 1, 2, \dots$; $V(x)$ – приведенный рассеивающий потенциал, стремящийся к нулю на бесконечности.

Пусть x_0 – точка поворота, разделяющая ось x на подбарьерную ($x < x_0$, $Q(x) < 0$) и надбарьерную ($x > x_0$, $Q(x) > 0$) области.

В подбарьерной области решение ищется в виде

$$y_s(x) = \beta(x)^{1/2} \text{sh}(\sigma(x)),$$
$$\sigma(x) = \int_0^x \beta(x)^{-1} dx. \quad (2)$$

Косинусо-подобное решение $y_c(x)$ отличается от (2) заменой $\text{sh} \rightarrow \text{ch}$. Вронскиан $W\{y_c(x), y_s(x)\}$ равен единице. Подставляя (2) в (1), получим

$$2\beta\beta'' + 4Q(x)\beta^2 - \beta'^2 = -4. \quad (3)$$

Дифференцирование нелинейного уравнения (3) приводит к линейному уравнению третьего порядка

$$\beta''' + 4Q(x)\beta' + 2Q'(x)\beta = 0. \quad (4)$$

В низшем приближении метода ВКБ производные

$$\beta'(x), \beta''(x) \quad (5)$$

в (3) попросту отбрасываются. Это дает

$$\beta(x) = 1/\sqrt{-Q(x)}. \quad (6)$$

Выражение (6) сингулярно в точке поворота. Следующие приближения содержат производные этого выражения, т.е. сингулярны в еще большей степени. Данное обстоятельство является существенным недостатком метода ВКБ в целом.

В настоящей работе предлагается другой способ действий. Воспользовавшись тем, что выражение (3) можно рассматривать как алгебраическое уравнение второй степени относительно β , напишем решение для подбарьерной области в виде

$$\beta(x) = (4 - \beta'^2)/(\sqrt{-4Q(x)(4 - \beta'^2 + \beta''^2 - \beta''')}). \quad (7)$$

Знак перед корнем выбран на основании предельного перехода к (6) при стремлении производных к нулю.

Выражение (7) является точным. Мы видим, что в точке поворота никакой особенности нет. Роль регуляризатора играет величина β'' . В случае $V(x) = V_0 + V_1x^2 + \dots$ решение уравнения (4) естественно искать в виде ряда по степеням x^2 . Для получения коэффициентов ряда удобнее всего использовать рекуррентные соотношения, вытекающие из линейного уравнения (4).

Два первых слагаемых ряда имеют вид

$$\beta(x) = \frac{1}{\nu^2} \left(1 + \frac{1 - V_0 x^2}{\nu^2 - 1} \frac{1}{2} + \dots \right), \quad (8)$$

где $\nu = L + 1/2$.

Ряд (8) быстро сходится. Превращая его в полином и подставляя в выражение (7), мы можем легко получить искомое улучшенное представление для $\beta(x)$.

В надбарьерной области синусо-подобное решение ищется в виде

$$y_s(x) = \beta(x)^{1/2} \sin(\sigma(x)),$$

$$\sigma(x) = \int_{x_0}^x \beta(x)^{-1} dx. \quad (9)$$

Косинусо-подобное решение, $y_c(x)$, отличается от (9) заменой $\sin \rightarrow \cos$. Вронскиан $W\{y_c(x), y_s(x)\}$ равен единице. Подставляя (9) в (1), получим

$$2\beta\beta'' + 4Q(x)\beta^2 - \beta'^2 = 4. \quad (10)$$

Уравнение (10) отличается от (3) только знаком правой части. Соответствующее уравнение третьего порядка по виду ничем не отличается от аналогичного уравнения (4). Точное выражение для надбарьерной функции имеет вид

$$\beta(x) = (4 + \beta'^2) / (\sqrt{4Q(x)(4 + \beta'^2) + \beta''^2 + \beta''}). \quad (11)$$

Решение уравнения (10) можно искать в виде ряда по степеням x^{-2} , с последующим использованием полученного ряда в выражении (11).

Возможен также путь прямого подбора. Приведем соответствующий пример, ограничиваясь для простоты случаем $V(x) = 0$. В этом случае решениями уравнения (1) являются функции Риккати-Бесселя $j_L(x)$, $y_L(x)$. Квадрат локальной амплитуды равен

$$\beta(x) = j_L(x)^2 + y_L(x)^2. \quad (12)$$

Будем искать приближенные выражения функций (5) в виде

$$\beta'(x) = -(be^{-\lambda(x-x_0)} + ce^{-m\lambda(x-x_0)}),$$

$$\beta''(x) = (be^{-\lambda(x-x_0)} + mce^{-m\lambda(x-x_0)}). \quad (13)$$

Полагая в (13) $x = x_0$, разрешим возникшую систему относительно коэффициентов b, c :

$$b = -(m\beta'_0 + \beta''_0/\lambda)/(m-1),$$

$$c = (\beta'_0 + \beta''_0/\lambda)/(m - 1). \quad (14)$$

Величины β'_0 , β''_0 предполагаются известными из точного решения (12); величины λ , m все еще неизвестны.

Чтобы уменьшить область возможных значений параметров λ , m , потребуем, чтобы a , b были положительны. Согласно (14), из этого требования вытекают ограничения $\min(\beta''_0) = -\lambda\beta'_0$; $\max(\beta''_0) = -m\lambda\beta'_0$. Не мудрствуя, приписываем β''_0 среднее значение

$$\beta''_0 = -\frac{1}{2}(1 + m)\lambda\beta'_0, \quad m \geq 1. \quad (15)$$

Равенство (15) позволяет определить λ для любого пробного m . Лучшим оказалось значение $m = 3$. При этом значении различие между точной и приближенной функциями на графиках практически незаметно, за исключением самых неблагоприятных значений $L = 1, 2$. С ростом L точность сильно возрастает. Отметим также, что выражение (11), предназначенное первоначально для надбарьерной области, допускает аналитическое продолжение в подбарьерную область. Вообще, подбарьерная и надбарьерная функции $\beta(x)$ не переходят друг в друга в какой-либо точке, поскольку подчиняются различным дифференциальным уравнениям. Сшиванию в точке поворота подлежат не амплитудные функции $\beta(x)$, а полные функции $y(x)$.

Рассмотрим решение $y(x)$, совпадающее в подбарьерной области с решением (2). Это же решение, непрерывно продолженное в надбарьерную область, имеет в последней вид:

$$y(x) = C_1\rho_+(x)\sin(\sigma_+(x)) + C_2\rho_+(x)\cos(\sigma_+(x)) = |C|\rho_+(x) \cdot \sin(\sigma_+(x) + \delta),$$

где $C_1 = \rho_+(x_0)y'_+(x_0) - \rho'_+(x_0)y_+(x_0)$; $C_2 = y(x_0)/\rho_+(x_0)$; $C = C_1 + iC_2$; $i\delta = \text{Ln}(C/|C|)$; $\rho(x) = \sqrt{\beta(x)}$; индекс $+$ означает надбарьерность.

В рассмотренном далее примере (функция Риккати-Бесселя при $L = 3$) фаза δ оказывается равной 0.502849. Это не подтверждает рецепт ВКБ, согласно которому должно быть $\delta = \pi/4 = 0.7854$.

При желании можно положить в основу вычислительной схемы не β'_0 и β''_0 , а Q'_0 и Q''_0 .

Ограничиваясь для простоты надбарьерной областью, добавим к уравнениям (10), (4) уравнение

$$\beta'''' + 4Q(x)\beta'' + 6Q'(x)\beta' + 2Q''(x)\beta = 0, \quad (16)$$

полученное путем дифференцирования уравнения (4). Система, образованная уравнениями (10), (4), (16), в точке поворота превращается в систему трех алгебраических уравнений:

$$2\beta'_0\beta''_0 - \beta'_0\beta'_0 = 4, \quad (17a)$$

$$\beta''_0 + 2Q'_0\beta_0 = 0, \quad (17b)$$

$$\beta''_0 + 6Q'_0\beta'_0 + 2Q''_0\beta_0 = 0. \quad (17c)$$

Для примера обратимся снова к случаю уравнения Риккати–Бесселя, в котором

$$Q'_0 = 2L(L+1)/x_0^3, \quad Q''_0 = -6L(L+1)/x_0^4, \quad (18)$$

и еще более упростим модельную функцию, положив

$$\beta(x) = a + be^{-\lambda(x-x_0)}, \quad (19)$$

откуда

$$\begin{aligned} \beta'(x) &= -\lambda be^{-\lambda(x-x_0)}, \\ \beta''(x) &= \lambda^2 be^{-\lambda(x-x_0)}. \end{aligned} \quad (20)$$

Решению (19) соответствует модельный коэффициент вида [2]:

$$Q_{mod}(x) = -\frac{\lambda^2}{4} + \frac{4 + \lambda^2 a^2}{4\beta^2(x)}. \quad (21)$$

Учитывая в (17) выражение (19), получим:

$$\lambda^2(2ab + b^2) = 4, \quad (22a)$$

$$2Q'_0 a - (\lambda^3 - 2Q'_0)b = 0, \quad (22b)$$

$$2Q''_0 a + (\lambda^4 - 6Q'_0\lambda + 2Q''_0)b = 0. \quad (22c)$$

Система (22) имеет решение

$$b = 2Q'_0/\lambda\sqrt{Q'_0(\lambda^3 - Q'_0)}, \quad (23)$$

в котором λ определяется кубическим уравнением

$$Q_0' \lambda^3 + Q_0'' \lambda^2 - 6Q_0'^2 = 0,$$

представляющем собой условие совместности уравнений (22b, 22c).

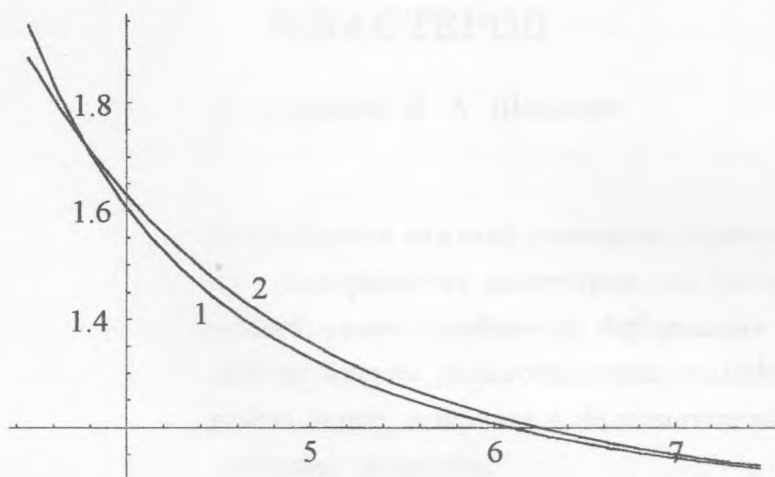


Рис. 1. 1 — точная функция $\beta(x)$, соответствующая уравнению Риккати-Бесселя при $L = 3$. Соответствующая приближенная функция, вычисленная по формулам (11, 13) с $m = 3$, $\lambda = 0.700856$, $b = 0.437523$, $c = 0.437523$, визуально совпадает с точной; 2 — приближенная функция, вычисленная по формулам (11, 20, 23).

На рис. 1 изображены точная и приближенная амплитудные функции $\beta(x)$ на участке $x \geq x_0$ при $L = 3$. Последняя вычислена по формулам (11, 20, 23). Учитывая, что обычный метод ВКБ вообще не применим в окрестности точки поворота, достигнутой точности можно считать хорошей. Следует учитывать и то, что в работе использовалась предельно простая, одноэкспонентная формула (20). Мы предполагаем, что при использовании более гибкой двухэкспонентной формулы типа (13) погрешность оказалась бы столь же малой, как в версии (13).

Таким образом, в работе показано, что, опираясь в точке поворота на функции $Q'(x)$ и $Q''(x)$, можно получить в этой точке и ее окрестности приближенные регулярные выражения для амплитудной функции.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Богомольный Е. Б. Ядерная физика, **40**, в. 4, 915 (1984).
- [2] Мигаута У. Phys. Lett. A, **136**, N 9, 455 (1989).
- [3] Хохлов Ю. К. Препринт ИЯИ -768/92 (1992).

Институт ядерных исследований РАН

Поступила в редакцию 21 мая 2002 г.

