ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория теоретической физики

С.Н. Соколов

Д-690

S-МАТРИЦА ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Дубна 1961 год

С.Н. Соколов

Д-690

S-МАТРИЦА ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Направлено в ЖЭТФ

А н н о т а ц и я

Выведено новое уравнение, в котором роль переменной, по которой производится дифференцирование, играет кинетическая энергия $v = 2(E - \mathcal{U})$ Это уравнение эквивалентно одномерному уравнению Шредингера. Найдена S -матрица в замкнутой форме и ее разложение в виде всегда сходящихся рядов. В простейшем случае нулевой член ряда для матрицы S соответствует отсутствию отражения и совпадает с квазиклассическим приближением. Первый член ряда дает надбарьерное отражение, в частности, формулу, полученную И.Гольдманом и А.Мигдалом [1]. С помощью другого разложения S -матрицы найдены поправки к формулам сшивания квазиклассических решений.

Одномерное нерелятивистское уравнение Шредингера

$$\psi''(x) + 2\left[E - \mathcal{U}(x)\right]\psi(x) = 0 \qquad (1)$$

неудобно для вычисления матрицы рассеяния, так как в это уравнение не входят явно амплитуды падающей и отраженной волны и его структура никак не выдает того факта, что именно неровности потенциала $\mathcal{U}(x)$ являются причиной возникновения отраженной волны.

В настоящей работе из уравнения (1) выводится новое матричное уравнение, в котором роль волновой функции выполняют амплитуды падающей и отраженной волны, а независимой переменной, по которой производится дифференцирование, становится "потенциал" $v = 2(E - \mathcal{U})$. Координата x становится вспомогательной переменной, превращаясь в указатель порядка, в котором расположены различные участки потенциала; вводится понятие X – произведения аналогично T –произведению теории квантованных полей. Полученное уравнение, хотя и является эквивалентным уравнению Шредингера (1), по многим своим свойствам оказывается дополнительным к уравнению Шредингера.

При выводе матричного уравнения используется неизвестная ранее структура общего решения уравнения (1). Решение матричного уравнения позволяет найти явное выражение для S –матрицы и представить S –матрицу в виде всегда сходящихся рядов (отличных, разумеется, от рядов теории возмущений). Преобразованиями S –матрицы оказывается возможным легко добиться быстрой сходимости этих рядов.

В простейшем случае нулевой член ряда для матрицы S соответствует отсутствию отражения и совпадает с квазиклассическим приближением Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ). Первый член ряда дает надбарьерное отражение, в частности, формулу, полученную И.Гольдманом и А. Мигдалом /1/. Дальнейшие члены ряда учитывают ослабление падающей волны и уточняют отраженную.

Полученные результаты приводят к новой оценке места квазиклассического приближения в точной теории. Разложение по константе h (фактически, по гладкости потенциала $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$), дает расходящийся ряд, два члена которого – единственные, не исчезающие при $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \to 0$ – дают, однако, пригодное для использования приближение. Остальные члены, исчезающие при $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \to 0$, не имеют физического смысла и только ухудшают приближение. Благодаря тому, что все члены ряда по h , кроме упомянутых двух, исчезают при тех же условиях, при которых исчезает отражение, возникает указанное выше совпадение ВКБ приближения с нулевым членом ряда для матрицы S .

Явление отражения от неровностей потенциала имеет глубокое родство с явлением несохранения классических адиабатических инвариантов в квантовой механике. Поэтому возможно, что предлагаемый здесь подход окажется целесообразным и при рассмотрении этих последних явлений. Матричное уравнение может быть также обобщено на случай системы зацепленных одномерных уравнений Шредингера.

§ 1. Постановка задачи

В уравнение Шредингера

$$\psi''(x) + v(x)\psi(x) = 0, \tag{1.1}$$

где $v(x) = k^2(x) = 2(E - U(x))$, переменные x и v входят существенно неравноправно в одном важном отношении: в то время, как описывающая состояние частицы волновая функция $\psi(x)$ дважды дифференцируема по x при любых ограниченных потенциалах $U(x)$, производной $\frac{d\psi}{dv} = \frac{d\psi}{dx}\frac{dx}{dv}$, вообще говоря, не существует. Так, например, $\frac{d\psi}{dv}$ обращается в бесконечность везде, где $v = const$. Вследствие этого любое уравнение, содержащее производную $\frac{d\psi}{dv}$, теряло бы смысл на всех участках, где $v = const$, и имело бы ряд других нехороших свойств.

Сказанное вовсе не означает, что не существует полноценного по своим свойствам уравнения, заменяющего уравнение Шредингера, в котором "потенциал" v играл бы роль переменной, по которой производится дифференцирование. Напротив, целью настоящей работы является построение такого уравнения и изучение его свойств.

Допустим, что состояние частицы можно описать некоторой функцией $F(x)$, дифференцируемой по крайней мере один раз по v при всех кусочно-непрерывных $v \neq 0$ (даже таких, производная которых $\frac{dv}{dx}$ не существует ни в одной точке). Здесь и в дальнейшем функция считается дифференцируемой, если производная принадлежит к классу кусочно-непрерывных функций. Вид функции $F(x)$ и ее связь с $\psi(x)$ можно установить при помощи следующих наводящих соображений.

Если $F(x)$ дифференцируема в общем случае не больше чем один раз, то она может удовлетворять некоторому дифференциальному уравнению порядка не выше первого. Это уравнение может быть одновременно эквивалентным уравнению (1.1) и линейным только в том случае, если функция F имеет две компоненты

$$F(x) = \begin{pmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

и связана с $\psi(x)$ линейным образом

$$\psi(x) = F_1(x)\,\varphi_1(x) + F_2(x)\,\varphi_2(x). \tag{1.3}$$

Чтобы функции φ_1, φ_2 были дифференцируемы хотя бы один раз по x, они не должны содержать в аргументах $v(x)$ явно, но могут содержать, например, интегралы вида $\int^x q(v,x)\,dx$. Учитывая, что при $v = const$ функция $\psi(x)$ должна быть комбинацией экспонент $\exp[\pm i(\kappa x + const)]$, получаем

$$\psi(x) = \left[F_1(x)\,e^{i\xi(x)} + F_2(x)\,e^{-i\xi(x)}\right] v^{-\frac{1}{4}}, \tag{1.4}$$

где фаза $\xi(x)$ равна

$$\xi(x) = \int^x \kappa(x)\,dx. \tag{1.5}$$

Выделение множителя $v^{-\frac{1}{4}}$ окажется удобным в дальнейшем. Так как на функции $F_1(x)$, $F_2(x)$ наложено требование дифференцируемости по v, то формула (1.4) является некоторой гипотезой о структуре общего решения уравнения (1.1).

§ 2. Уравнения для амплитуд

Выведем уравнения для амплитуд $F_1(x)$ и $F_2(x)$. Вычисляя производную ψ',

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= i v^{\frac{1}{4}} F_1 e^{i\xi} - i v^{\frac{1}{4}} F_2 e^{-i\xi} + \\ &+ \frac{dv}{dx}\left[e^{i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{-\frac{1}{4}}F_1\right) + e^{-i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{-\frac{1}{4}}F_2\right)\right],\end{aligned} \tag{2.1}$$

мы видим, что существование ψ' может быть обеспечено только в том случае, если выражение в квадратных скобках равно нулю

$$e^{i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{-\frac{1}{4}}F_1\right)+e^{-i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{-\frac{1}{4}}F_2\right)=0, \tag{2.2}$$

так как в противном случае в выражение для ψ' войдет производная v', существования которой мы не предполагаем.

Вычисляя (с учетом (2.2)) вторую производную $\psi''(x)$, имеем

$$\begin{aligned}\psi''(x) &= -v^{\frac{3}{4}}F_1e^{i\xi}-v^{\frac{3}{4}}F_2e^{-i\xi}+\\ &+i\frac{dv}{dx}\left[e^{i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{\frac{1}{4}}F_1\right)-e^{-i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{\frac{1}{4}}F_2\right)\right].\end{aligned} \tag{2.3}$$

Аналогичным образом, для существования $\psi''(x)$ необходимо, чтобы

$$e^{i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{\frac{1}{4}}F_1\right)-e^{-i\xi}\frac{d}{dv}\left(v^{\frac{1}{4}}F_2\right)=0. \tag{2.4}$$

Элементарными преобразованиями системе уравнений (2.2), (2.4) можно придать компактный вид

$$\begin{cases}\dfrac{dF_1(x)}{d\ln v(x)}=\dfrac{1}{4}F_2(x)\,e^{-2i\xi(x)}\\[2ex] \dfrac{dF_2(x)}{d\ln v(x)}=\dfrac{1}{4}F_1(x)\,e^{2i\xi(x)}\end{cases}. \tag{2.5}$$

Сравнивая выражения (1.4) и (2.3) легко убедиться, что ψ удовлетворяет уравнению Шредингера (1.1), если удовлетворяются уравнения (2.2), (2.4).

Интересно отметить, что при выводе уравнений (2.2), (2.4) мы не обращались явно к уравнению (1.1), а использовали только существование производных ψ' и ψ''. Это связано с тем, что уравнение (1.1) уже было использовано при записи $\psi(x)$ в форме (1.4).

Систему уравнений (2.2), (2.4) легко вывести и более наглядным, но менее строгим приемом, разбивая потенциал $U(x)$ на множество тонких прямоугольных барьеров, выписывая условия непрерывности ψ и ψ' на каждой границе, а затем устремляя толщину барьерчиков к нулю.

§ 3. Решение уравнений для амплитуд

Запишем (2.5) в матричной форме

$$dF = g(x)\, F\, d\ln v, \tag{3.1}$$

где

$$g(x) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} e^{-2i\xi(x)} \\ \frac{1}{4} e^{2i\xi(x)} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.2}$$

Матрицы $g(x)$ при разных x не коммутируют между собой.

Решение уравнения (3.1) может быть записано в виде X - экспоненты[x)] /2/

$$F(x_1) = X\left(\exp\int_{x_0}^{x_1} g(x)\, d\ln v(x)\right) F(x_0), \tag{3.3}$$

где знак X - произведения означает, что матрицы $g(x)$ должны быть расставлены в порядке возрастания их аргументов слева направо (или убывания, если $x_1 < x_0$).

Матрица

$$S(x_1, x_0) = X\left(\exp\int_{x_0}^{x_1} g(x)\, d\ln v(x)\right), \tag{3.4}$$

[x)] Понятие X - экспоненты совпадает с понятием мультипликативного интеграла $\int (1+f(x)dx)$, введенного в 1887 году Вольтерра /2/. Мы оставляем первый термин, как более близкий физической терминологии.

преобразующая $F(x_0)$ в $F(x_1)$, унимодулярна и имеет элементы

$$S_{11}=1+\int_{x_0}^{x_1}\frac{1}{4}e^{-2i\xi(x')}\int_{x_0}^{x'}\frac{1}{4}e^{2i\xi(x'')}\,d\ln v(x')\,d\ln v(x'')+\ldots,$$

$$S_{12}=\int_{x_0}^{x_1}\frac{1}{4}e^{-2i\xi}\,d\ln v+$$

$$+\int_{x_0}^{x_1}\frac{1}{4}e^{-2i\xi}\int_{x_0}^{x'}\frac{1}{4}e^{2i\xi}\int_{x_0}^{x''}\frac{1}{4}e^{-2i\xi}\,d\ln v(x')\,d\ln v(x'')\,d\ln v(x''')+\ldots, \tag{3.5}$$

$$S_{22}=[S_{11}]_{\xi\to-\xi}, \qquad S_{21}=[S_{12}]_{\xi\to-\xi}$$

Из (3.4) вытекает, что ряды (3.5) сходятся всегда, когда только интеграл (в смысле Стильтьеса)

$$\int_{x_0}^{x_1}e^{\pm 2i\xi(x)}\,d\ln v(x) \tag{3.6}$$

существует. Таким образом, формула

$$F(x)=S(x,x_0)\,F(x_0) \tag{3.7}$$

дает общее решение уравнения Шредингера. В последнем можно убедиться и непосредственно, подставляя (3.7), (3.4), (1.4) в (1.1).

Подчеркнем, что ряды (3.5) сходятся не за счет малости какой-либо константы. В этом отношении они выгодно отличаются от многих других рядов, через которые можно записать решение уравнения Шредингера, например, рядов теории возмущений.

Матрицу S легко найти в явном виде, если известны два частных решения $\psi_{(1)}(x)$ и $\psi_{(2)}(x)$ уравнения (1.1). Введем матрицы

$$w = \begin{pmatrix} \psi_{(1)} & \psi_{(2)} \\ \psi'_{(1)} & \psi'_{(2)} \end{pmatrix}; \quad Z = \begin{pmatrix} v^{-\frac{1}{4}} e^{i\xi} & v^{-\frac{1}{4}} e^{-i\xi} \\ i v^{\frac{1}{4}} e^{i\xi} & -i v^{\frac{1}{4}} e^{-i\xi} \end{pmatrix}; \quad F = \begin{pmatrix} F_{1(1)} & F_{1(2)} \\ F_{2(1)} & F_{2(2)} \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Очевидно, из (1.4) и (2.1) следует

$$w(x) = Z(x) F(x). \tag{3.9}$$

Из равенств (3.7), (3.9) получаем явное выражение для матрицы S

$$S(x, x_0) = Z^{-1}(x)\, w(x)\, w^{-1}(x_0)\, Z(x_0). \tag{3.10}$$

Подставляя (3.10), (3.7) и в (2.5) можно показать, что эта система удовлетворяется, как только ψ удовлетворяет уравнению (1.1). Таким образом, система (2.5) эквивалентна уравнению Шредингера (1.1) в том смысле, что каждому решению уравнения (1.1) соответствует решение системы (2.5), и наоборот. Отсюда следует, что общее решение уравнения (1.1) действительно имеет структуру (1.4).

В уравнениях (2.5) фаза $\xi(x)$ играет ту же роль, что потенциал $v(x)$ в уравнении (1.1). Волновая функция $F(x)$, вообще говоря, не дифференцируема по x, что очевидно хотя бы из того, что она выражается через интегралы Стильтьеса. Таким образом имеется некоторая дополнительность в свойствах системы (2.5) и уравнения Шредингера (1.1).

§ 4. Точки поворота

Непосредственное применение формул (3.3)–(3.5) к отрезку $[x_1, x_0]$, содержащему точку поворота[x)] $v = 0$, неудобно из-за неудовлетворительной скорости сходимости рядов (3.5) в этом случае. Чтобы освободиться в X-экспоненте от особенности в точке поворота, выделим из матрицы $S(x_1, x_0)$ некоторую главную часть $P(x_1, x_0)$.

Воспользуемся тождеством

$$X\left[\exp\left(\int_{x_0}^{x_1} p(x)\, d\alpha(x) + \int_{x_0}^{x_1} e(x)\, d\beta(x)\right)\right] = P(x_1, x_0)\, \mathcal{E}(x_1, x_0), \tag{4.1}$$

где

$$P(x, x_0) = X\left(\exp\int_{x_0}^{x} p\, d\alpha\right), \tag{4.2}$$

$$\mathcal{E}(x_1, x_0) = X\left(\exp\int_{x_0}^{x_1} P^{-1}(x, x_0)\, e(x)\, P(x, x_0)\, d\beta(x)\right), \tag{4.3}$$

и которое легко доказать, записывая экспоненту в виде бесконечного произведения. Положим

$$p = g(\bar{x}), \quad e = g(x) - g(\bar{x}), \quad d\alpha = d\beta = d\ln v, \tag{4.4}$$

где $\bar{x}$ – точка поворота $v(\bar{x}) = 0$. Тогда вместо (3.7) получим

$$F(x_1) = P(x_1, x_0)\, \mathcal{E}(x_1, x_0)\, F(x_0). \tag{4.5}$$

Стоящий в X – экспоненте (4.3) интеграл теперь регулярен и мал при малых $x_1 - x_0$, так что матрица $\mathcal{E}$ близка к единичной. Для элементов матрицы $\mathcal{E}$

---

x) Интегралы в (3.3), (3.5) можно в этом случае понимать в следующем смысле

$$\int f\, d\ln v = P_v \int f\, \frac{dv}{v} + i\pi \frac{1}{2}\left(\mathrm{sign}\, v^- - \mathrm{sign}\, v^+\right) \int f\, \delta(x - \bar{x})\, dx, \tag{4.1a}$$

где $\bar{x}$ – точка поворота, символ P_v означает пропуск при интегрировании участка, где $|v| < \varepsilon$; $\varepsilon \to 0$; v^+, v^- – значения v на правом и левом конце пропущенного участка.

может быть написано разложение, аналогичное (3.5), которое быстро сходится. Матрица P вычисляется явно

$$P(x,x_0) = \begin{pmatrix} ch\frac{1}{4}\ln\frac{v}{v_0} & e^{-2i\xi(\bar{x})} sh\frac{1}{4}\ln\frac{v}{v_0} \\ e^{2i\xi(\bar{x})} sh\frac{1}{4}\ln\frac{v}{v_0} & ch\frac{1}{4}\ln\frac{v}{v_0} \end{pmatrix} \qquad (4.6)$$

и описывает главную часть преобразования волновой функции $F(x)$ при переходе через точку поворота.

Выделение из S -матрицы главной части (4.6) возможно всегда и не предполагает гладкости или малости кривизны потенциала в районе точки поворота. Таким образом, точка поворота не является препятствием к получению матрицы S в виде быстро сходящихся рядов.

Аналогичным приемом главную часть матрицы S можно выделить не только в малой окрестности точки поворота, но и на любом отрезке $[x_1, x_0]$, если на этом отрезке для потенциала $v(x)$ можно подобрать близкий к нему потенциал $\bar{v}(x)$, для которого известно точное решение уравнения Шредингера.

Возвращаясь к матрице P, следует упомянуть, что матрица (4.6) является матрицей рассеяния на прямоугольном скачке от v_0 к v в точке $\bar{x}$ (v_0 и v - любых знаков).

§ 5. Точка поворота в квазиклассическом случае

Метод выделения главной части матрицы S можно применить для получения поправок к обычным формулам связи[x)] квазиклассических решений внутри и вне потенциального барьера. Указанные поправки, возникающие вследствие кривизны потенциала в окрестности точки поворота, не всегда бывают малы и могут сильно изменять, например, вероятность проникновения частицы через потенциальный барьер.

[x)] Подробный вывод и обсуждение обычных формул связи можно найти в работе Р.Лангера/3/.

Пусть в окрестности точки поворота потенциал $v(x)$ близок к линейному. Тогда в (4.1)-(4.3) естественно положить

$$p = e = g(x), \quad d\alpha = d\ln\left(\eta^{\frac{2}{3}} \operatorname{sign} x\right), \quad d\beta = d\ln\left|v\,\eta^{-\frac{2}{3}}\right|, \tag{5.1}$$
$$\eta = \left|\xi(x) - \xi(0)\right|$$

(в (5.1) точка поворота принята за начало координат $v(0)=0$, и потенциальный барьер считается расположенным слева $\operatorname{sign} v = \operatorname{sign} x$). Очевидно, при линейном потенциале $v = cx$, дифференциал $d\beta \equiv 0$ и $P = S$.

Главная часть $P(x, x_0)$ (4.3) легко находится по формуле (3.10), где в качестве решений $\psi_{(1)}$ и $\psi_{(2)}$ можно взять (сравни с /4/)

$$\varphi_{\pm} = \begin{cases} \eta^{\frac{1}{3}} \frac{1}{2}\left[J_{\frac{1}{3}}(\eta) \mp J_{-\frac{1}{3}}(\eta)\right] & \text{при } x>0 \\ -\eta^{\frac{1}{3}} \frac{1}{2}\left[I_{\frac{1}{3}}(\eta) \pm I_{-\frac{1}{3}}(\eta)\right] & \text{при } x<0 \end{cases} \tag{5.2}$$

(J, I - функции Бесселя). Учитывая, что $\frac{d}{dx} = \left|\frac{d\eta}{dx}\right| \operatorname{sign} x \cdot \frac{d}{d\eta}$, и производя над матрицами w, z некоторое несущественное линейное преобразование $\tilde{w} = Lw$, $\tilde{z} = Lz$, $L = \begin{pmatrix} \eta^{\frac{1}{6}} & 0 \\ 0 & \eta^{-\frac{1}{6}} \operatorname{sign} x \end{pmatrix}$, получаем

$$P(x, x_0) = \tilde{z}^{-1}(x)\, \tilde{w}(x)\, \tilde{w}^{-1}(x_0)\, \tilde{z}(x_0) = G(x)\, G^{-1}(x_0), \tag{5.3}$$

где матрицы $\tilde{z}$, $\tilde{w}$ являются матрицами Вронского по переменной η $\left(\dot{} = \frac{d}{d\eta}\right)$

$$\tilde{w} = \eta^{\frac{1}{6}} \mathcal{D}(\varphi_+, \varphi_-) = \eta^{\frac{1}{6}} \begin{pmatrix} \varphi_+ & \varphi_- \\ \dot{\varphi}_+ & \dot{\varphi}_- \end{pmatrix}, \quad \tilde{z} = \begin{cases} \mathcal{D}(e^{i\eta}, e^{-i\eta}) & \text{при } x>0 \\ \bar{\gamma}\mathcal{D}(e^{\eta}, e^{-\eta}) & \text{при } x<0 \end{cases}, \tag{5.4}$$

$$\det \tilde{w} = -\frac{\sqrt{3}}{2\pi} \operatorname{sign} x .$$

Множитель[x)] $\bar{\gamma} = v^{-\frac{1}{4}} \left| v^{\frac{1}{4}} \right| = e^{-i\frac{\pi}{4}}$. Подставляя (5.4) в (4.3), получаем

$$\mathcal{E}(x_1, x_0) = G(x_0)\, X \left[\exp \int_{x_0}^{x_1} \tilde{w}^{-1}(x) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tilde{w}(x)\, d\beta \right] G^{-1}(x_0),$$

$$\tilde{w}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tilde{w} = -\eta^{\frac{1}{3}} \frac{2\pi}{\sqrt{3}}\, \mathrm{sign}\, x \frac{d}{d\eta} \begin{pmatrix} \varphi_+ \varphi_- & \varphi_-^2 \\ -\varphi_+^2 & -\varphi_+ \varphi_- \end{pmatrix}. \tag{5.5}$$

Можно показать, что при

$$\left| \int_{x_0}^{x_1} d\bar{\beta} \frac{d}{d\eta} (\varphi_+ \varphi_-) \right| \ll 1, \quad \left| \int_{x_0}^{x_1} d\bar{\beta}' \frac{d}{d\eta} (\varphi_\pm^2) \int_{x_0}^{x'} d\bar{\beta}'' \frac{d}{d\eta} (\varphi_\mp^2) \right| \ll 1, \tag{5.6}$$

где

$$d\bar{\beta} = -\eta^{\frac{1}{3}} \frac{\pi}{2\sqrt{3}}\, d\beta\, \mathrm{sign}\, \bar{x}, \tag{5.7}$$

в разложении X –экспоненты в (5.5) можно ограничиться первым членом, откуда

$$S(x, x_0) \approx P(x, x_0) + G(x) \int_{x_0}^{x} \frac{d}{d\eta} \begin{pmatrix} \varphi_+ \varphi_- & \varphi_-^2 \\ -\varphi_+^2 & -\varphi_+ \varphi_- \end{pmatrix} d\bar{\beta}\, G^{-1}(x_0). \tag{5.8}$$

В этом выражении первый член $P(x, x_0)$, стоящий в правой части, дает обычные формулы связи, а второй – поправку к этим формулам.

При больших значениях аргумента η матрицы $P(x, x_0)$ и $G^{-1}(x_0)$ удобнее выражать не через функции $\varphi_\pm$ и $\dot{\varphi}_\pm$, а через некоторые их комбинации R, T, t, имеющие простые асимптотические разложения (см., например,[/5/])

---

x) Такой выбор соответствует формуле (4.1а).

$$R_{\pm} \sim \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{(2\eta)^m} \frac{(\frac{1}{3},m) \pm (\frac{2}{3},m)}{2}\,; \qquad T_{\pm} \sim \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2\eta)^m} \frac{(\frac{1}{3},m) \pm (\frac{2}{3},m)}{2}\,; \tag{5.9}$$

$$t_{\pm} \sim \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{3},m) \pm (\frac{2}{3},m)}{2\cdot(2\eta)^m}\,; \qquad (\nu,m) = \frac{\Gamma(\nu+m+\frac{1}{2})}{m!\,\Gamma(\nu-m+\frac{1}{2})}\,.$$

Тогда при $x>0$, $x_0<0$ имеем $(\xi = \eta(x),\ \eta = \eta(x_0))$

$$P(x,x_0) = \bar{\gamma} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{4}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_+ & i e^{-2i\xi}\bar{R}_- \\ -i e^{2i\xi} R_- & \bar{R}_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -T_- e^{2\eta} + \frac{i}{2} t_+ & T_+ - \frac{i}{2} t_- e^{-2\eta} \\ -T_- e^{2\eta} - \frac{i}{2} t_+ & T_+ + \frac{i}{2} t_- e^{-2\eta} \end{pmatrix}, \tag{5.10}$$

$$G^{-1}(x_0) = \bar{\gamma}\sqrt{2\pi} \begin{pmatrix} -t_+ & t_- \cdot e^{-2\eta} \\ -\frac{2}{\sqrt{3}} T_- e^{2\eta} & \frac{2}{\sqrt{3}} T_+ \end{pmatrix} \tag{5.11}$$

($\bar{R}$ - означает функцию, комплексно сопряженную с R).

В большинстве рассмотрений имеют смысл только те элементы матриц P, P^{-1}, S, S^{-1}, которые имеют конечный предел при $\eta \to \infty$. Между тем, матрицы P, S (а также, очевидно, и матрицы P^{-1}, S^{-1}) содержат экспоненциально растущие элементы. Если эти растущие элементы исключить из рассмотрения, то мы получим формулы связи, которые могут быть использованы только в одном определенном направлении: либо при переходе из области $v<0$ в область $v>0$, либо при обратном переходе.

В случае использования растущих элементов матриц S и S^{-1} следует иметь в виду, что, как нетрудно установить с помощью (5.8), эти элементы очень чувствительны даже к небольшим отклонениям хода потенциала от линейного.

§ 6. Надбарьерное отражение

Явление надбарьерного отражения не имеет анолога в классической механике и состоит в том, что частица с положительной кинетической энергией может отражаться от неровностей потенциала. При этом, если бугры и ямы, которые имеет потенциал, достаточно гладки, то отражение оказывается, вообще говоря, очень малым даже при большом отношении v_{max} к v_{min}. При значительном отношении v_{max}/v_{min} обычные приемы приближенного решения уравнения Шредингера (1.1), например, теория возмущений, становятся мало эффективными, и коэффициент отражения оказывается много проще оценить, если исходить из матричного уравнения (3.1).

Амплитуда отраженной волны (при заданном полном потоке) определяется, очевидно, недиагональными элементами матрицы $S(\infty, -\infty)$. Так, если поток частиц падает слева, и прошедшая волна уходит направо, то

$$F_2(-\infty) = S_{21}^{(-1)}(-\infty,\infty)\, F_1(\infty) = -S_{21}(\infty,-\infty)\, F_1(\infty). \tag{6.1}$$

Для приближенного вычисления матрицы S удобно разбить область, где потенциал не является постоянным, на отрезки $[x_{i+1}, x_i]$ такого размера, чтобы элементы каждой из матриц $S(x_{i+1}, x_i)$ хорошо аппроксимировались первыми членами рядов (3.5)

$$S(x_{i+1}, x_i) \approx \begin{pmatrix} 1 & \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-2i\xi}\frac{1}{4}\,d\ln v \\ \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} e^{2i\xi}\frac{1}{4}\,d\ln v & 1 \end{pmatrix} = \tau(x_{i+1}, x_i), \tag{6.2}$$

а затем найти произведение матриц τ,

$$S(\infty, -\infty) \approx \tau(\infty, x_{n-1})\cdot\tau(x_{n-1}, x_{n-2})\cdot\ldots\cdot\tau(x_1, -\infty). \tag{6.3}$$

Погрешность недиагональных элементов матриц τ легко оценивается:

$$\left|S_{21} - r_{21}\right| \lesssim \left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{4} \left|d \ln v\right| \right)^2 \cdot \frac{1}{2} \max \left| \int\limits_{x_1}^{x} e^{2i\xi} \frac{1}{4} d \ln v \right| , \qquad (6.4)$$

где $x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}$. Таким образом, при умеренном числе отрезков n аппроксимация (6.3) будет хорошей, если для всех выбранных отрезков

$$\left| \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} e^{2i\xi} \frac{1}{4} d \ln v \right| \gg \left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{4} \left|d \ln v\right| \right)^2 \cdot \frac{1}{2} \max \left| \int\limits_{x_i}^{x} e^{2i\xi} \frac{1}{4} d \ln v \right| . \qquad (6.5)$$

Число отрезков n, которое необходимо для достижения заданной относительной точности c, может быть грубо оценено по формуле

$$n \lesssim \frac{0{,}03}{c} \left(\int \left|d \ln v\right| \right)^2 . \qquad (6.6)$$

Например, для одногорбого потенциала с $V_{max}/V_{min} = 5$ и для точности $c = 0{,}05 = 5\%$ получаем $n = 6$.

Если условие (6.5) выполнено для интервала $(\infty, -\infty)$, то для амплитуды надбарьерного отражения мы получаем оценку

$$- S_{21}(\infty, -\infty) \approx - \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{2i\xi} \frac{1}{4} d \ln v , \qquad (6.7)$$

совпадающую с точностью до обозначений и нормировки с формулой /9/ работы /6/. Подчеркнем, что формулы (6.3), (6.7) полностью решают задачу о надбарьерном отражении и не связаны ни с теорией возмущений, ни с квазиклассическим приближением. Условие (6.5) в основном имеет физический смысл отсутствия резонансов и значительно слабее как условия квазиклассичности, так и условия применимости теории возмущений.

§ 7. Надбарьерное отражение в квазиклассическом случае

Квазиклассика есть частный случай, когда можно применить формулу (6.7). Высокая гладкость потенциала

$$\left| \frac{\Delta \lambda}{\lambda} \right| \approx \left| \lambda' \right| = \left| \frac{k'}{k^2} \right| \ll 1 , \qquad \left| \frac{k''}{k^3} \right| \ll 1 , \qquad (7.1)$$

которая имеет место в квазиклассическом случае, позволяет несложным преобразованием уравнения (1.1) добиться выполнения условия (6.5) на интервале $(\infty, -\infty)$ даже для потенциалов с большим отношением v_{max}/v_{min}. Воспользуемся одним из преобразований Лангера[3]. Положим

$$\Psi = K^{-\frac{1}{2}}\bar{\Psi}, \quad x = h(y), \quad y = \xi(x), \tag{7.2}$$

где h – функция, обратная к фазе ξ. Тогда уравнение (1.1) приобретает вид

$$\frac{d^2\bar{\Psi}}{dy^2} + \bar{\Psi}\left(1 + \frac{3}{4}\frac{K'^2}{K^4} - \frac{1}{2}\frac{K''}{K^3}\right) = 0, \tag{7.3}$$

где штрих означает производную по x. Согласно (7.1)

$$|\bar{v} - 1| = \left|\frac{3}{4}\frac{K'^2}{K^4} - \frac{1}{2}\frac{K''}{K^3}\right| \ll 1, \tag{7.4}$$

так что для преобразованного потенциала $\bar{v}$ $\int |d \ln v| \ll 1$ и условие применимости формулы (6.7) выполнено.

Интеграл (6.7) в квазиклассическом случае редко может быть найден аналитически, так как преобразованный потенциал $\bar{v}(y)$ в элементарных функциях обычно не выражается. В качестве примера, когда вычисления удается довести до конца, возьмем разобранный в работе В.Покровского и др.[7] частный случай, когда $v(x)$ имеет вид

$$v(x) = (x - i\sigma)\, Q(x), \tag{7.5}$$

где $Q(x)$ – аналитическая функция, не имеющая ни нулей, ни особенностей в полосе

$$-\sigma < \operatorname{Im} x < \sigma + c, \quad c \gg 1. \tag{7.6}$$

Прямое вычисление[7] показывает, что $\bar{v}(y)$ имеет вид

$$\bar{v}(y) = 1 + \frac{5}{36}\frac{1}{(y - i\bar{\sigma})^2}\bar{Q}(y), \quad \bar{Q}(i\bar{\sigma}) = 1, \tag{7.7}$$

где $\bar{Q}(y)$ не имеет особенностей в полосе

$$-\bar{\sigma} < \operatorname{Im} y < \bar{\sigma} + \bar{c}, \quad i\bar{\sigma} = \xi(i\sigma), \quad i\bar{c} = \xi(ic). \tag{7.8}$$

Из (7.4) следует, что в квазиклассическом случае $\bar{\sigma} \gg 1$.

Подставляя (7.7) в (6.7) и проводя интегрирование по контуру, замкнутому в верхней полуплоскости, мы видим, что особенности функции $\tilde{Q}(y)$ вносят экспоненциально малый вклад и, если этих особенностей не слишком много, то этим вкладом можно пренебречь. Заменяя $\tilde{Q}(y)$ единицей, для амплитуды надбарьерного отражения имеем

$$R = - S'_{21}(\infty, -\infty) =$$
$$(7.9)$$
$$= - \int \exp\left\{2i \int^{y} \left[1 + \frac{5}{36}(z - i\bar{\sigma})^{-2}\right]^{1/2} dz\right\} \frac{1}{4} d \ln\left[1 + \frac{5}{36}(y - i\bar{\sigma})^{-2}\right] = -i\, e^{-2\bar{\sigma}}$$

(вычисление интеграла (7.9) обсуждается в приложении).

Та же оценка для R была получена в [7] путем сложного суммирования рядов теории возмущений и сравнением результата с известным точным решением (для $V = 1 + \beta\, ch^{-2}(\alpha, x)$). Следует упомянуть, что в работах В.Покровского и др. [7,8] содержится неверное утверждение о том, что формула (6.7), выведенная впервые И.Гольдманом и А.Мигдалом [6], совпадает с первым членом ряда теории возмущений. В самом деле, подстановка потенциала Покровского (7.7) в интеграл Гольдмана и Мигдала (6.7) приводит к точному результату (7.9), в то время как первый член ряда теории возмущений для разбираемого примера дает [7] $R \approx -i\, \frac{5}{18}\pi\, e^{-2\bar{\sigma}} = -i\, 0{,}87\, e^{-2\bar{\sigma}}$.

В заключение автор хотел бы выразить свою глубокую благодарность Я.А.Смородинскому за многократные обсуждения, С.С.Герштейну за постоянную помощь в работе и Л.Д.Заставенко за дружескую поддержку на ранней стадии работы.

Приложение

Интеграл (7.9) легче всего вычислить, разлагая стоящий в показателе корень в ряд по степени величины β

$$\beta\,(z - i\bar{\sigma}) = \frac{5}{36}(z - i\bar{\sigma})^{-2}, \quad \sqrt{1+\beta} = 1 + \frac{1}{2}\beta - \frac{1}{8}\beta^2 + \frac{1}{16}\beta^3 - \dots, \qquad (\Pi.1)$$

и интегрируя этот ряд почленно. В нижней полуплоскости всегда (при любых $\bar{\sigma}$) найдется прямая $\operatorname{Im} y = const$, на которой ряд

$$\frac{1}{2i} B(y - i\bar{\sigma}) = \frac{1}{2}\int^{y} \beta\, dz - \frac{1}{8}\int^{y} \beta^2 dz + \frac{1}{16}\int^{y} \beta^3 dz - \ldots \qquad (\text{П}.2)$$

сходится всюду абсолютно, так что такая процедура законна. Далее разложим в ряд $\exp B = 1 + B + \ldots$. Вычисляя явно $\frac{d}{dy}\ln(1+\beta)$, имеем

$$R = -\int e^{2iy}\left(1+B+\ldots\right)\left(-\frac{1/2}{y-i\bar{\sigma}} + \frac{1/4}{y-i\left(\bar{\sigma}+\frac{\sqrt{5}}{6}\right)} + \frac{1/4}{y-i\left(\bar{\sigma}-\frac{\sqrt{5}}{6}\right)}\right) dy. \qquad (\text{П}.3)$$

Выражение (П.3) допускает почленное интегрирование. Делая замену $y - i\bar{\sigma} = x$, имеем $R = -\rho \exp(-2\bar{\sigma})$, где ρ не зависит от $\bar{\sigma}$:

$$\rho = \int e^{2ix}\left(1 + B(x) + \ldots\right)\left(-\frac{1/2}{x} + \frac{1/4}{x - i\frac{\sqrt{5}}{6}} + \frac{1/4}{x + i\frac{\sqrt{5}}{6}}\right) dx. \qquad (\text{П}.4)$$

Константа ρ легко подсчитывается численно и оказывается равной i . Так, первые три члена ряда по B, β дают:

$$\rho_0 = \int e^{2ix}\, d\ln(1+\beta(x)) = i\pi\left(\operatorname{ch}\frac{\sqrt{5}}{3} - 1\right) = i\cdot 0,91$$

$$\rho_1 = \rho_0 + \int e^{2ix}\left(\frac{-i5}{36}\right) d\ln(1+\beta) = \quad = i\cdot 0,997$$

$$\rho_2 = \rho_1 + \int e^{2ix}\left(\frac{5}{36}\right)^2\left(\frac{-1}{2x^2}\right) d\ln(1+\beta) = i\cdot 0,9992.$$

и интегрируя этот ряд почленно. В нижней полуплоскости всегда (при любых $\bar{\sigma}$) найдется прямая $\mathrm{Im}\, y = const$, на которой ряд

$$\frac{1}{2i} B(y - i\bar{\sigma}) = \frac{1}{2}\int^{y} \beta\, dz - \frac{1}{8}\int^{y} \beta^{2} dz + \frac{1}{16}\int^{y} \beta^{3} dz - \ldots \tag{П.2}$$

сходится всюду абсолютно, так что такая процедура законна. Далее разложим в ряд $\exp B = 1 + B + \ldots$. Вычисляя явно $\frac{d}{dy}\ln(1+\beta)$, имеем

$$R = -\int e^{2iy}\left(1+B+\ldots\right)\left(-\frac{1/2}{y-i\bar{\sigma}} + \frac{1/4}{y-i(\bar{\sigma}+\frac{\sqrt{5}}{6})} + \frac{1/4}{y-i(\bar{\sigma}-\frac{\sqrt{5}}{6})}\right)dy. \tag{П.3}$$

Выражение (П.3) допускает почленное интегрирование. Делая замену $y - i\bar{\sigma} = x$, имеем $R = -\rho \exp(-2\bar{\sigma})$, где ρ не зависит от $\bar{\sigma}$:

$$\rho = \int e^{2ix}\left(1 + B(x) + \ldots\right)\left(-\frac{1/2}{x} + \frac{1/4}{x - i\frac{\sqrt{5}}{6}} + \frac{1/4}{x + i\frac{\sqrt{5}}{6}}\right)dx. \tag{П.4}$$

Константа ρ легко подсчитывается численно и оказывается равной i . Так, первые три члена ряда по B, β дают:

$$\rho_0 = \int e^{2ix} d\ln(1+\beta(x)) = i\pi\left(\mathrm{ch}\frac{\sqrt{5}}{3} - 1\right) = i\cdot 0{,}91$$

$$\rho_1 = \rho_0 + \int e^{2ix}\left(\frac{-i5}{36}\right) d\ln(1+\beta) = \quad = i\cdot 0{,}997$$

$$\rho_2 = \rho_1 + \int e^{2ix}\left(\frac{5}{36}\right)^{2}\left(\frac{-1}{2x^{2}}\right) d\ln(1+\beta) = i\cdot 0{,}9992 .$$

Литература

1. И.И.Гольдман, А.Б.Мигдал. ЖЭТФ, **28**, 394, 1955.
2. Ф.Р.Гантмахер. Теория матриц, гл. XIУ, ГИТТЛ, 1953.
3. R.E. Langer. Phys.Rev., **51**, 669, 1937.
4. Л.Шифф. Квантовая механика, § 2, ИИЛ, 1959.
5. Я.М.Шпильрейн. Таблицы специальных функций, ч.1, ГТТИ, 1933.
6. В.Л.Покровский, С.К.Саввиных, Ф.Р.Улинич. ЖЭТФ, **34**, 1272, 1958.
7. В.Л.Покровский, Ф.Р.Улинич, С.К.Саввиных. ЖЭТФ, **34**, 1629, 1958.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 марта 1961 года.