

С 323

Г-427

27/X - 64.

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P-1779



С.С.Герштейн, Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ
В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ

ЖЭТФ, 1965, т 48, в 2, с. 632-643.

1964

P-1779

С.С. Герштейн, Л.И. Пономарев, Т.П. Пузырина

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ
В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ

Направлено в ЖЭФ

СОЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ
ФИЗИКИ ИСПОЛНИТЕЛЬНОЙ
МАШИНЫ

2712/3 чг

В в е д е н и е

Ряд задач квантовой механики приводит к так называемой задаче двух центров, т.е. к нахождению волновых функций и уровней энергии заряженной частицы, движущейся в поле двух фиксированных кулоновских центров с зарядами z_1 и z_2 .

Частный случай этой задачи - молекулярный ион водорода - исследовался многими авторами (отметим, что еще до создания квантовой механики эта задача была рассмотрена в диссертации Паули^{/1/} на основе старой боровской теории). В настоящее время имеются численные расчеты нескольких нижних термов^{/2,3/} (там же приведена библиография). Кроме этого существует множество приближенных методов решения этой задачи (Л. С. А. О., У. А., вариационный, теория возмущений), которые, однако, справедливы только при $R \gg 1$ или $R \ll 1$ (R - расстояние между центрами).

В данной работе задача двух центров рассмотрена с помощью квазиклассического приближения. Хорошо известно, что метод ВКБ эффективен при больших квантовых числах, однако можно ожидать, что применимость квазиклассики в данном случае будет шире, чем первоначально поставленные границы, так как известно, что в поле одного кулоновского центра квазиклассические уровни энергии совпадают с точными не только при $n \gg 1$, но и при $n = 1$, а задача двух центров в пределе $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ сводится к этой задаче.

Применение метода ВКБ в ранних работах наталкивались на своеобразные трудности, связанные с расходимостью фазового интеграла для σ -термов. Причина этих трудностей лежит, по существу, в неправильном выборе квазимульса^{/4/}, который, как известно, определен неоднозначно и допускает так называемое преобразование Лангера^{/5/}. Различные авторы (Вильстеттер, Крамерс, Хеллмиг^{/6/}) преодолевали эти трудности по-разному, иногда весьма остроумно^{х)}, но единого метода предложено не было и, вероятно, поэтому метод ВКБ в дальнейшем к этой задаче не применялся.

В данной работе показано, что при правильном выборе квазимульса эти трудности не возникают и благодаря этому удается получить замкнутое решение задачи во всей области изменения R с достаточно хорошей точностью.

х) Например, Крамерс применил своеобразный метод регуляризации фазового интеграла. Интересно, что идея метода в общих чертах аналогична идее регуляризации в квантовой теории поля.

1. Основные уравнения

Уравнение Шредингера задачи двух центров в атомных единицах $\hbar = e = m = 1$ имеет вид

$$-\frac{1}{2} \Delta \psi + \left(-\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right) \psi = E \psi. \quad (1)$$

В вытянутых эллиптических координатах

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}; \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}; \quad \phi = \arctg \frac{y}{x}. \quad (2)$$

уравнение разделяется, нормированное решение получаем в виде

$$\psi = N \cdot X(\xi) \cdot Y(\eta) \cdot e^{im\phi}. \quad (3)$$

При этом:

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{dX}{d\xi} + \left(-p^2 \xi^2 + b' \xi + A - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right) X = 0, \quad (5)$$

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{dY}{d\eta} + \left(p^2 \eta^2 + b \eta - A - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right) Y = 0. \quad (4)$$

Здесь A — константа разделения,

$$p^2 = -\frac{R^2}{2} E = -\frac{R^2}{4} \kappa, \quad (6)$$

$$b = R(Z_2 - Z_1), \quad b' = R(Z_2 + Z_1),$$

$$W = E + \frac{Z_1 Z_2}{R} = \text{полная энергия.}$$

Уравнение вида

$$\frac{d}{dx} p(x) \frac{dy}{dx} + r(x) y = 0 \quad (7)$$

заменой независимого переменного и функции

$$t = \chi(x) \quad y = \frac{u}{\sqrt{p(x) \chi'(x)}} \quad (8)$$

приводится к форме, необходимой для применения квазиклассики,

$$\frac{d^2 u}{dt^2} + q(t) u = 0. \quad (7')$$

Поскольку $\chi(x)$ — произвольная функция, такое приведение неоднозначно.

Как показано в работе ^{1/4}, в случае, когда $p(x)$ имеет простые нули (которые представляет собой особые точки уравнения (7)), следует применять преобразование:

$$t = \int \frac{dx}{p(x)}, \quad y(x) = u(t). \quad (8')$$

Такая замена, уводя особые точки уравнения (7) в $t = \pm \infty$, обеспечивает правильное поведение квазиклассических решений в особых точках и правильную фазу вдали от точек остановки.

Кроме того, как будет показано, (8') дает также правильное поведение термов при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$. Используя (8') и возвращаясь к прежним переменным, получим квазиклассические решения (4) и (5) в виде:

$$Y(\eta) = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{1-\eta^2} \sqrt{Q(\eta)}} \exp \left\{ \pm i \int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta) d\eta \right\}, \quad (9)$$

$$Q(\eta) = \sqrt{\left[\frac{p^2 \eta^2 + b \eta - A}{1 - \eta^2} - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right]^{1/2}} = \left[-p^2 + \frac{p^2 - A + b \eta}{1 - \eta^2} - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right]^{1/2}, \quad (9')$$

$$X(\xi) = \frac{C_{\pm}}{\sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{R(\xi)}} \exp \left\{ \pm i \int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi) d\xi \right\}, \quad (10)$$

$$R(\xi) = \left[\frac{-p^2 \xi^2 + b' \xi + A}{\xi^2 - 1} - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right]^{1/2}. \quad (10')$$

Легко видеть, что этот вид квазипульсов совпадает с их классическими выражениями в методе Гамильтона-Якоби ^{1/7/ x}.

Условия квантования для квазипульсов $R(\xi)$ и $Q(\eta)$ дают соответственно константы разделения A_{ξ} и A_{η} , как функции квантовых чисел n_{ξ} , n_{η} , m и параметров p^2 и R , а равенство $A_{\xi} = A_{\eta}$ — электронные термы $E = E_{n_{\xi} n_{\eta} m}(R)$.

2. Условия квантования

В уравнении (4) функция $[Q(\eta)]^{1/2}$ играет роль эффективного потенциала при нулевой энергии квантования. В зависимости от значений параметров p^2 и A при $m \neq 0$ потенциал может иметь вид I или II на рис. 1.

x) Обычно в методе ВКБ применяется преобразование

$$t = x, \quad y = \frac{u}{\sqrt{p(x)}}, \quad (8'')$$

что приводит в данной задаче к квазипульсам, которые отличаются от (9') и (10') заменой $m^2 + m^2 - 1$. В ранних работах ^{1/8/} именно это и приводило к трудностям, упомянутым во Введении. Аналогичным образом (8'') давало $m^2 - 1$ вместо m^2 при квазиклассическом рассмотрении Штарк-эффекта в атоме водорода ^{1/8/} и там же ^{1/8/} было установлено, что правильный результат получается при отбрасывании единицы. (Аргументация при этом была примерно та же, что и при кramerсовской замене (14) $\ell(\ell+1) \rightarrow (\ell + \frac{1}{2})^2$ в радиальном уравнении до работы Лангера ^{1/10/}).

Попутно отметим, что последовательное применение метода ВКБ к атому водорода при использовании (8'') приводит к аналогичным затруднениям. Указанные результаты автоматически получаются при использовании (8'). В частности, при этом сразу же возникает замена $\ell(\ell+1) \rightarrow (\ell + \frac{1}{2})^2$.

В случае I существуют две области классического движения $\eta_1 < \eta < \eta_2$ и $\eta_3 < \eta < \eta_4$, разделенные потенциальным барьером. При $p^2 \gg 1$ это соответствует приближению разведенных атомов. Случай II при $p^2 \ll 1$ соответствует приближенно объединенного атома. (Особый случай $m=0$ изображен на рис. 1а. При этом крайними "точками остановки" становятся $\eta_1 = -1$; $\eta_4 = 1$).

Используя выражения для A при $R \gg 1$ и $R \ll 1$, приведенные, например, в /16/, можно показать, что в этих двух предельных случаях движение квазиклассично в случае I в левой и правой ямах, соответственно, если:

$$p^2 \gg 1; \quad A \gg 1; \quad \frac{m^2}{p^2 - A \mp b} \ll 1 - \eta^2 \ll \frac{p^2 - A \mp b}{p^2} \quad (11)$$

$$\frac{p^2 - A \mp b}{p} \approx \left\{ \frac{2(2n_2 + |m| + 1)}{2(2n_2' + |m| + 1)} \right\} \gg 1 \quad (11')$$

(n_2 и n_2' - число нулей волновой функции в каждой из ям).

В случае II, если

$$p^2 \ll 1; \quad A < 0; \quad 1 - \eta^2 \gg \frac{m^2}{p^2 - A \mp b}; \quad \frac{p}{p^2 - A \mp b} \ll 1 \quad (12)$$

$$|A| \approx (n_\eta + |m|)(n_\eta + |m| + 1) \gg 1 \quad (12a)$$

(n_η - число нулей функции в общей яме).

В этих предельных случаях условия квантования могут быть просто записаны как условия на фазовые интегралы по области квазиклассического движения в каждой из ям или в общей яме, соответственно. Для каждого заданного термина $E_{n_\xi n_\eta m}$ при изменении R случай I непрерывно переходит в II. Однако обычные условия квантования /11/ при этом, разумеется, не "сшиваются" на вершине барьера, поскольку в этой области они вообще неприменимы. Это связано с тем, что при их выводе в области II не учитывается надбарьерное отражение, а в области I пренебрегается подбарьерным переходом. Обе указанные поправки, будучи экспоненциально малы-ми вдали от вершины барьера, становятся весьма существенными вблизи нее. Последовательно применяя метод обхода точек остановки в комплексной плоскости, предложенный Цвангом /12/, и используя условие непрерывности тока (как это делалось Кемблом /13/), нетрудно получить (см. Приложение) интерполяционные формулы, справедливые вплоть до вершины барьера. В случае I

$$\cos(\omega_2 + \omega_2') = -\cos \lambda \cos(\omega_2 - \omega_2') \quad (13)$$

или

$$\operatorname{ctg} \omega_2 \operatorname{ctg} \omega_2' = \operatorname{tg}^2 \frac{\lambda}{2};$$

в случае II

$$\cos \omega_0 = -\sin \epsilon \cos(\omega - \omega')$$

или

$$\operatorname{ctg} \omega \operatorname{ctg} \omega' = \operatorname{tg}^2 \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\epsilon}{2} \right). \quad (14)$$

Все обозначения даны в Приложении. При $R \rightarrow \infty$ $\lambda \rightarrow 0$; при $R \rightarrow 0$ $\epsilon \rightarrow 0$, и формулы (13) и (14) переходят в обычные формулы квантования. Точно на барьере $\lambda = \epsilon = \frac{\pi}{4}$ формулы сшиваются и совпадают там с условиями квантования, полученными в этом предельном случае в работе Крамерса и Иттмана /14/ x).

Эффективный потенциал $(R(\xi))^{-2}$ уравнения (5) имеет вид обычной осцилляторной ямы, поэтому условия квантования можно написать сразу:

$$\omega_1 = \pi(n_1 + \frac{1}{2}); \quad \omega_1' = \int_{\xi_1}^{\xi_2} R(\xi) d\xi. \quad (15)$$

При этом в случае $m \neq 0$ всегда $\xi_1 > 1$ (ξ_1 - меньший положительный корень уравнения $R(\xi) = 0$). Если $m = 0$, то $\xi_1 = -1$ при $p^2 \rightarrow \infty$. При $\xi_1 < 1$ нижний предел должен быть положен $= 1$.

3. Вычисление E и A

Все величины в (17) выражаются через полные эллиптические интегралы. Но в предельных случаях $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ проще исходить из определений, используя для разложений в ряды соотношения (11) и (12). (В частности, иногда очень удобно применять способ Зоммерфельда /15/).

При $R \rightarrow \infty$ можно квантовать независимо в каждой яме, условия (13) сведутся к

$$\omega_2 = \pi(n_2 + \frac{1}{2}); \quad \omega_2' = \pi(n_2' + \frac{1}{2}). \quad (13)$$

Тогда глубоко под барьером (до 4-го порядка) получим:

$$\begin{aligned} A_\xi = & p^2 + 2p(2n_1 + |m| + \xi) - R(Z_1 + Z_2) + \frac{1}{2}(2n_1 + 1)(2n_1 + |m| + 1) - \\ & - \frac{1}{2p} R(Z_1 + Z_2)(2n_1 + |m| + 1) - \frac{1}{16p^3} R^2(Z_1 + Z_2)^2(2n_1 + |m| + 1) - \\ & - \frac{1}{8p}(2n_1 + 1)(2n_1 + |m| + 1)(2n_1 + 2|m| + 1) + \frac{3}{16p^2} R(Z_1 + Z_2)(2n_1 + |m| + 1)^2 \end{aligned} \quad (16)$$

x) В окрестности барьера ($E - u_0 = s + 0$) (13) дает $\lambda = \frac{\pi}{4} + s$, а $1/4 - \lambda = \frac{\pi}{4} + s \ln s$ т.е. результаты совпадают с логарифмической точностью, но зато формулы (13) и (14) переходят в обычные правила квантования, а /14/ справедливо лишь вблизи барьера.

$$A_{\eta} = p^2 - 2p(2n_2 + |m| + 1) - R(Z_2 - Z_1) + \frac{1}{2}(2n_2 + 1)(2n_2 + |m| + 1) +$$

$$+ \frac{1}{2p} R(Z_2 - Z_1)(2n_2 + |m| + 1) + \frac{1}{16p^3} R^2(Z_2 - Z_1)^2(2n_2 + |m| + 1) + \quad (16')$$

$$+ \frac{1}{8p} (2n_2 + 1)(2n_2 + |m| + 1)(2n_2 + 2|m| + 1) + \frac{3}{16p^2} R(Z_2 - Z_1)(2n_2 + |m| + 1)^2$$

Аналогично в правой яме с заменой $Z_1 \rightarrow Z_2$; $n_2 \rightarrow n_1'$. Выражения (16) и (16') незначительно отличаются от полученных в /18/ даже для $n_1 = n_2 = m = 0$. Однако для уровней энергии условие $A_{\xi} = A_{\eta}$ дает $(n = n_1 + n_2 + |m| + 1)$.

$$E = -\frac{Z_1^2}{2n^2} - \frac{Z_2}{R} + \frac{3}{2} n(n_1 - n_2) \frac{Z_2}{Z_1 R^2} \quad (17)$$

т.е. правильное выражение для линейного эффекта Штарка при любых n . Квази-классика верна и здесь вне границ применимости.

При $R \rightarrow 0$ получим $(\ell = n_0 + |m|; N = n_1 + \ell + 1)$,

$$\omega_0 = -\pi(n_0 + \frac{1}{2}), \quad (14)$$

$$A_{\eta} = -(\ell + \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{2} p^2 [1 - \frac{m^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2}] - \frac{1}{8} \frac{R^2(Z_2 - Z_1)^2}{N^2} [1 - \frac{3m^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2}], \quad (18)$$

$$\sqrt{A_{\xi}} = \frac{Z_1 + Z_2}{\sqrt{-2E}} - (n_1 + \frac{1}{2}) - \frac{1}{4} \frac{p^2}{\ell + \frac{1}{2}} [1 - \frac{m^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2}] - \quad (18')$$

$$- \frac{1}{16} \frac{R^2(Z_1 + Z_2)^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2} [1 - \frac{3m^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2}], \quad (19)$$

$$E = -\frac{(Z_1 + Z_2)^2}{2N^2} - \frac{R^2}{4} \frac{Z_1 Z_2 (Z_1 + Z_2)^2}{N^2 (\ell + \frac{1}{2})^2} [1 - \frac{3m^2}{(\ell + \frac{1}{2})^2}]$$

в хорошем согласии с /8/.

4. Случай $Z_1 = Z_2 = 1$

Для молекулярного иона водорода условия квантования (13) и (14) сильно упрощаются:

$$\omega_0 = -\pi(n_0 + \frac{1}{2}) + (-)^{n_0} \epsilon,$$

$$\omega_2 = -\pi(n_2 + \frac{1}{2}) + (-)^{n_2} \frac{\lambda}{2},$$

$$\omega_1 = -\pi(n_1 + \frac{1}{2}), \quad (20)$$

$n_0 = 2n_2$ для симметричного термина, $n_0 = 2n_2 + 1$ - для антисимметричного. Найдем расщепление этих уровней под барьером при $m = 0$. Из (20) находим:

$$\Delta \omega_2 = \frac{\partial \omega_2}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial \omega_2}{\partial A} \Delta A = \lambda, \quad (21)$$

$$\Delta \omega_1 = \frac{\partial \omega_1}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial \omega_1}{\partial A} \Delta A = 0,$$

$$\Delta p = \lambda \frac{\partial \omega_1}{\partial A} / \frac{\partial(\omega_2 \cdot \omega_1)}{\partial(p, A)}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \omega_1}{\partial A} = \frac{\pi}{4p}, \quad \frac{\partial(\omega_2 \cdot \omega_1)}{\partial(p, A)} = -\frac{\pi^2}{4} \frac{n}{p^2}, \quad K = 2 \cdot \frac{A}{p} \text{B}(\frac{\sqrt{A}}{p}). \quad (22')$$

Используя (6), (16') и свойства эллиптических интегралов /17/, получим:

$$\Delta E = \frac{1}{\pi} \frac{\kappa_1}{n} \left(\frac{8pe}{2n_2 + 1} \right)^{2n_2 + 1} e^{-2p} \quad (23)$$

и, так как с той же точностью, что и формула Стирлинга

$$\sqrt{2\pi} \left(\frac{n_2 + \frac{1}{2}}{e} \right)^{n_2 + \frac{1}{2}} = n_2!,$$

то при $n_2 \gg 1$ получим формулу работы /18/:

$$\Delta E = \frac{2\kappa}{n} \frac{(4p)^{2n_2 + 1}}{n_2! n_2!} e^{-2p}. \quad (24)$$

Формула (24) справедлива при $R \gg 1$ и любых n_2 ; формула (23) - при любых R (до барьера) и $n_2 \gg 1$. Для основного состояния (23) дает:

$$\Delta E = \frac{4}{\pi} R e^{-R}, \quad (23')$$

а (24)

$$\Delta E = \frac{4}{e} R e^{-R}. \quad (24')$$

При $R = 9$ (23') дает $\Delta E = 2,0 \cdot 10^{-3}$, (24') - $\Delta E = 2,3 \cdot 10^{-3}$, точный расчет /3/ $\Delta E = 1,7 \cdot 10^{-3}$; без перехода к пределу по формуле (22) $\Delta E = 1,9 \cdot 10^{-3}$; точный счет на машине из уравнений (20) $\Delta E = 1,5 \cdot 10^{-3}$; худшее согласие (24') с точными расчетами по сравнению с (23') объясняется, по-видимому, тем, что при $R = 9$ еще не достигается асимптотическая область.

5. Сравнение с точными расчетами

Системы трансцендентных уравнений (13), (15) и (14), (15) решалась численно на электронно-вычислительной машине методом минимизации для 8 первых термов

молекулярного иона водорода и системы $Z_1=1$; $Z_2=2$. Результаты представлены на рис. 2 и 3. Там же для сравнения приведены точные данные работ^{/3/}. Видно, что данные хорошо совпадают при $R \ll 1$ и $R \gg 1$, и также точно на барьере при $R = R_0$ (совпадение лучшее при $R > R_0$). В непосредственной области по обе стороны барьера совпадение хуже, оно лучше для π -термов, чем для σ -термов, а среди последних лучше для p, d, \dots -термов, чем для s -термов, — как и следовало ожидать от квазиклассики. Однако относительная ошибка нигде не превосходит 5%. (Кроме термина $1s\sigma$ $Z_1=1$; $Z_2=2$, где ошибка достигает 10%). На рис. 4 приведены также термы $2p\sigma$ и $1s\sigma$ системы Π_2 , рассчитанные 3-я способами: 1) точный расчет^{/3/}; 2) расчет по формулам (20); 3) по формулам обычной квазиклассики^{/11/}. Видно, что квантование по формулам (20) дает лучшее приближение.

6. Волновые функции

Используя результаты работы^{/4/}, выпишем нормированные волновые функции задачи двух центров в области квазиклассического движения для предельных случаев I и II.

В случае I глубоко под барьером в левой яме ($\kappa = -2E$)

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \phi) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \frac{\kappa^m}{\sqrt{\pi}} \frac{\cos(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{R(\xi)}} \frac{\cos(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta) d\eta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{1 - \eta^2} \sqrt{Q(\eta)}} \quad (25)$$

Соответственно в правой яме с заменой: $\kappa \rightarrow \kappa'$; $\eta \rightarrow \eta'$; $\eta_1 \rightarrow \eta_3$.

В случае II высоко над барьером:

$$\psi_{n l m}(\xi, \eta, \phi) = \frac{2}{\pi^{3/2}} \frac{\kappa^m (-A)^m}{\sqrt{R(Z_2 + Z_1)}} \frac{\cos(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{R(\xi)}} \frac{\cos(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta) d\eta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{1 - \eta^2} \sqrt{Q(\eta)}} \quad (26)$$

Можно показать, что (26) при $R \rightarrow 0$ совпадает с нормированными волновыми функциями водородоподобного атома с зарядом $Z_1 + Z_2$, а (25) при $R \rightarrow \infty$ — с асимптотическим выражением волновой функции электрона, изолированного атома в параболических координатах.

Функции (25) и (26) при $\xi \rightarrow 1$ и $\eta \rightarrow \pm 1$ имеют правильное поведение:

$$\psi(\xi, \eta, \phi) \sim (\xi - 1)^{m/2} (1 - \eta^2)^{m/2}$$

Аналогичным образом для волновых функций непрерывного спектра (после замены $p^2 \rightarrow -s^2$; нормировка на δ -функцию от k ; $s = \frac{Rk}{2}$; k — импульс электрона) получим:

$$X(\xi) = \sqrt{\frac{2s}{\pi}} \frac{2}{R} \frac{\cos(\int_{\xi_1}^{\xi} R(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{\xi^2 - 1} \sqrt{R(\xi)}} \quad (27)$$

$$Y(\eta) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (-A)^m \frac{\cos(\int_{\eta_1}^{\eta} Q(\eta) d\eta - \frac{\pi}{4})}{\sqrt{1 - \eta^2} \sqrt{Q(\eta)}} \quad (27')$$

Приложение

а) Выведем условия квантования для потенциала Π (см. рис. 1) с учетом надбарьерного отражения и для потенциала I — с учетом подбарьерного перехода. Задача такого рода имеет точный смысл вблизи вершины барьера, где коэффициент надбарьерного отражения (соответственно коэффициент прохождения в подбарьерной области) не мал, и учет его не представляет превышение точности квазиклассического приближения. Поскольку, однако, получающиеся формулы высоко над барьером (и соответственно глубоко под барьером) переходят в обычные правила квантования, их можно рассматривать как интерполяционные. В рассматриваемом надбарьерном случае существуют две действительные и две комплексно-сопряженные точки "остановки" $Q(\eta) = 0$: $\eta_1 = a$; $\eta_4 = b$; $\eta_{2,3} = a \pm i\beta$ (см. рис. 1). Используя метод комплексной точки остановки, предложенный Покровским и Халатниковым^{/19/}, можно установить связь между квазиклассическими решениями, взятыми от различных точек остановки:

$$\frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{i \int_a^{\eta} Q d\eta\} - i e^{2i\phi_0} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{-i \int_a^{\eta} Q d\eta\} - e^{i(\phi_0 + \phi'_0)} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{i \int_b^{\eta} Q d\eta\}, \quad (П.1)$$

$$\phi_0 = \int_a^{\eta_2} Q d\eta; \quad \phi'_0 = \int_{\eta_2}^b Q d\eta \quad (П.2)$$

(аналогичное соотношение для волны, отраженной направо, получается, если воспользоваться комплексно-сопряженной точкой остановки η_3). Формула (П.1) не учитывает отличия коэффициента при прошедшей волне от единицы, так как эта величина, будучи экспоненциально малой второго порядка вдали от барьера, не может быть правильно определена. Однако, как заметил Кембл^{/13/}, использование условия сохранения тока позволяет экстраполировать квазиклассические формулы вплоть до вершины барьера, где коэффициент отражения уже не мал. Вводя в падающей волне (П.1) коэффициент g и определяя его из условия сохранения тока, имеем окончательно для волны, прошедших соответственно направо и налево над барьером:

$$g \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{i \int_a^{\eta} Q d\eta\} - i e^{2i\omega} e^{-\delta} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{-i \int_a^{\eta} Q d\eta\} - e^{i(\omega + \omega')} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp\{i \int_b^{\eta} Q d\eta\} \quad (П.3)$$

$$e^{i(\omega_2 + \omega'_2)} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ -i \int_a^\eta Q d\eta \right\} - g \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ -i \int_b^\eta Q d\eta \right\} - i e^{2i\omega'_2} e^{-\delta} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ i \int_b^\eta Q d\eta \right\} \quad (\text{П.3}')$$

где

$$\begin{aligned} \omega &= \int_a^\eta Q d\eta - \int_a^\beta \text{Im} Q(a+it) dt, \\ \omega' &= \int_b^\eta Q d\eta + \int_b^\beta \text{Im} Q(a+it) dt, \\ \delta &= \int_{-\beta}^{\beta} \text{Re} Q(a+it) dt, \quad g = \sqrt{1 + e^{-2\delta}}, \\ \omega_2 &= \omega + \omega', \quad \omega'_2 = \omega - \omega'. \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

В надбарьерном случае существует 4 точки остановки (см. рис. 1). Определив разрезы $Q(\eta)$ в комплексной плоскости η , как на рис. 5, и продолжая решения из левой "ямы" в правую по верхнему берегу разреза, а из правой в левую - по нижнему (вновь с учетом сохранения тока) получим:

$$e^{i(\omega_2 + \omega'_2)} e^{-K} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ -i \int_{\eta_1}^\eta Q d\eta \right\} \rightarrow h \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ -i \int_{\eta_4}^\eta Q d\eta \right\} - i e^{2i\omega'_2} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ i \int_{\eta_4}^\eta Q d\eta \right\} \quad (\text{П.5})$$

$$h \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ i \int_{\eta_1}^\eta Q d\eta \right\} - i e^{2i\omega_2} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ -i \int_{\eta_1}^\eta Q d\eta \right\} - e^{i(\omega_2 + \omega'_2)} e^{-K} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp \left\{ i \int_{\eta_4}^\eta Q d\eta \right\} \quad (\text{П.5}')$$

где

$$\omega_2 = \int_{\eta_1}^{\eta_2} Q d\eta; \quad \omega'_2 = \int_{\eta_3}^{\eta_4} Q d\eta; \quad K = \int_{\eta_2}^{\eta_3} |Q| d\eta; \quad h = \sqrt{1 + e^{-2K}} \quad (\text{П.6})$$

Легко видеть, что (П.3) и (П.3') совпадают с (П.5) и (П.5') после замены:

$$\omega_2 \rightarrow \omega; \quad \omega'_2 \rightarrow \omega'; \quad e^{-K} \rightarrow e^{\delta} \quad (\text{П.7})$$

Поэтому в дальнейшем рассмотрим подробно только пару (П.5) и (П.5').

Из требования экспоненциального затухания решения вне области квазиклассического движения вблизи точек остановки η_1 и η_4 должны быть выбраны решения: $\cos \left(\int_{\eta_1}^\eta Q d\eta - \frac{\pi}{4} \right)$ и $C \cos \left(\int_{\eta_4}^\eta Q d\eta + \frac{\pi}{4} \right)$, соответственно.

Отвлекаясь от нормировки, из (П.5) и (П.5') можно получить следующее соответствие между решениями у точек остановки η_1 и η_4 :

$$\begin{pmatrix} \cos \left(\int_{\eta_1}^\eta Q d\eta - \frac{\pi}{4} \right) \\ \sin \left(\int_{\eta_1}^\eta Q d\eta - \frac{\pi}{4} \right) \end{pmatrix} = e^K \begin{pmatrix} h \sin(\omega_2 + \omega'_2) - \sin(\omega_2 - \omega'_2) h \cos(\omega_2 + \omega'_2) + \cos(\omega_2 - \omega'_2) \\ -h \cos(\omega_2 + \omega'_2) + \cos(\omega_2 - \omega'_2) h \sin(\omega_2 + \omega'_2) + \sin(\omega_2 - \omega'_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \left(\int_{\eta_4}^\eta Q d\eta + \frac{\pi}{4} \right) \\ \sin \left(\int_{\eta_4}^\eta Q d\eta + \frac{\pi}{4} \right) \end{pmatrix} \quad (\text{П.8})$$

Для требуемого соответствия решений:

$$\cos \left(\int_{\eta_1}^\eta Q d\eta - \frac{\pi}{4} \right) \rightarrow C \cos \left(\int_{\eta_4}^\eta Q d\eta + \frac{\pi}{4} \right),$$

необходимо положить:

$$h \cos(\omega_2 + \omega'_2) + \cos(\omega_2 - \omega'_2) = 0 \quad (\text{П.9})$$

Аналогично для пары (П.3) и (П.3')

$$g \cos(\omega_2 + \omega'_2) + e^{-\delta} \cos(\omega_2 - \omega'_2) = 0 \quad (\text{П.10})$$

Вводя

$$\text{tg } \lambda = e^{-K}; \quad \text{tg } \tau = e^{-\delta} \quad (\text{П.11})$$

получим формулы (13) и (14), приведенные в тексте. При $\delta \rightarrow \infty$, $K \rightarrow \infty$ они переходят в известные.

Константа C определяется из условия:

$$C^2 = \frac{h + \cos 2\omega_2}{h + \cos 2\omega'_2} = \frac{\sin 2\omega_2}{\sin 2\omega'_2} \quad (\text{П.12})$$

Для случая $E > u_0$ поступаем аналогично, с заменой (П.7). Из (П.11) видно, что при $E < u_0$ волновая функция уровня, сосредоточенного в левой яме, экспоненциально убывает внутрь правой, так как тогда $h = 1 + \frac{1}{2} e^{-2K}$; $\cos 2\omega_2 = -1$; $h + \cos 2\omega'_2 = 1 + \alpha$; $C = \pm e^{-K}$. В случае $E > u_0$ после замены (П.7) получаем $h = \sqrt{1 + e^{2\delta}}$. Очевидно, что $C = \pm 1$; знак C определяется по правилам, данным в /16/

Л и т е р а т у р а

1. W. Pauli. Ann. d. Phys., **68**, 177 (1922).
2. E. Teller. Zs. f. Phys., **61**, 458 (1930).
3. A. Hylleraas. Zs. f. Phys., **71**, 739 (1931).
4. S.K. Chakravarty. Phil. Mag., v. **28**, 423 (1939).
5. D.R. Bates, K. Ledsham, A.L. Stewart. Phil. Trans. Roy. Soc., A **246**, 215 (1953).
6. D.R. Bates, T.R. Carson. Proc. Roy. Soc., A **234**, 207 (1954).
7. R. Langer. Trans. Amer. Math. Soc., **37**, 397 (1935).
8. M. Willstätter. Ann. d. Phys., **10**, 873 (1931).
9. E.M. Engers, H.A. Kramers. Zs. f. Phys., **82**, 328 (1933).
10. E. Hellmig. Zs. f. Phys., **94**, 361 (1935).
11. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Механика. Физматгиз, Москва, 1958.
12. S. Lanczos. Zs. f. Phys., **65**, 431 (1930).

9. Г. Бете. Квантовая механика простейших систем, ОНТИ, Москва, 1935 .
 10. R.E.Langer. Phys. Rev., 51, 669 (1937).
 11. Н.И. Гольдман, В.Д. Кривченков. Сборник задач по квантовой механике. Гостехиздат, Москва, 1957.
 12. A.Zwaan. Arch. Neerl. des Sciences, 12, 33 (1929).
 13. E.C.Kembl. Phys. Rev., 48, 549 (1935). The Fundamental Principles of Quantum Mechanics. New York, Dover (1959).
 14. H.A.Kramers, G.P.litman. Zs. f. Phys., 58, 217 (1929).
 15. А.Зоммерфельд. Строение атомов и спектры, т.1, Москва, 1956 .
 16. С.С.Герштейн, В.Д.Кривченков. ЖЭТФ, 40, 1491 (1961).
 17. Е.Янке, Ф. Енде. Таблицы функций, Физматгиз, Москва, 1959 .
 18. Б.М.Смирнов. ЖЭТФ, 46, 1017 (1964).
 19. В.Л.Покровский, И.М.Халатников. ЖЭТФ, 40, 1713 (1961).

Рукопись поступила в издательский отдел
 29 июля 1964 г.

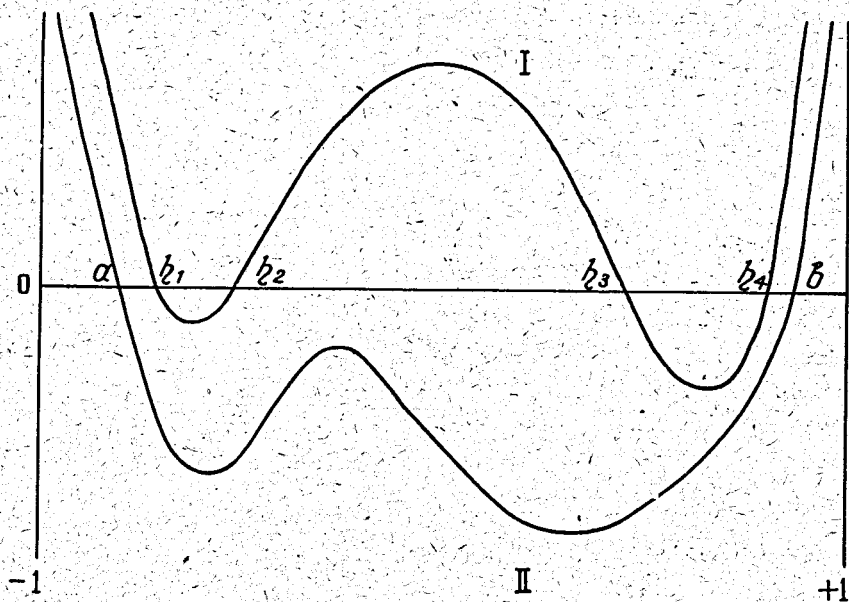


Рис. 1.

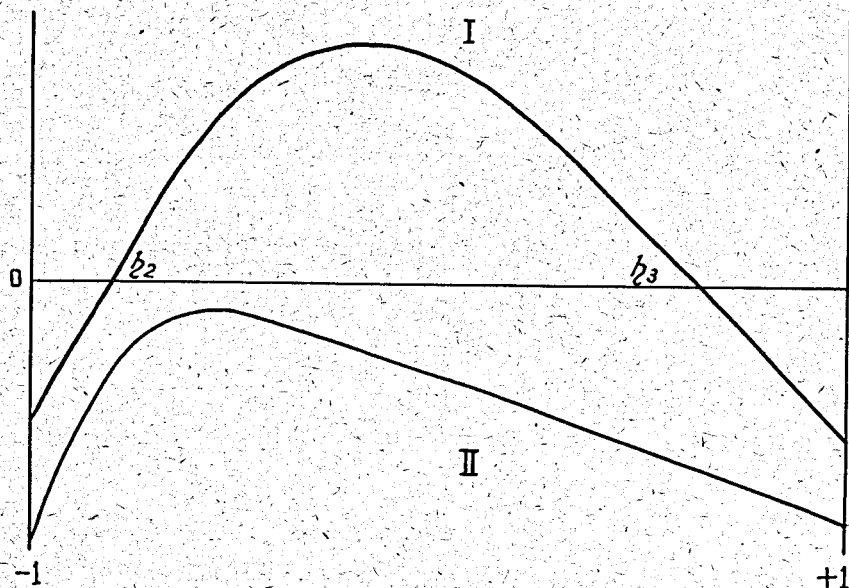


Рис. 1 а.



Рис. 2. Термы системы N_2 . — значения, данные в работе /3/,
 - - - значения, рассчитанные по формулам (20). Терм $5f\sigma$
 рассчитан по формулам (20).

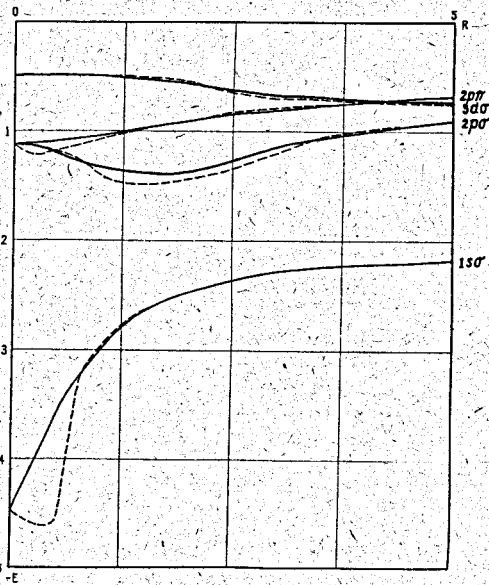


Рис. 3. Термы системы $Z_1 = -1$; $Z_2 = 2$;

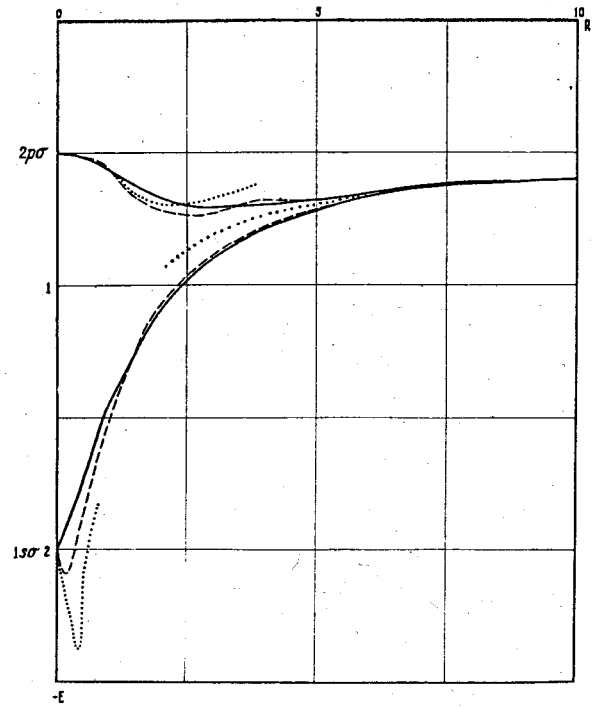


Рис. 4. — значения, данные в работе /3/,
 - - - значения, рассчитанные по формулам (20),
 расчет по формулам обычной квазиклассики ($\epsilon=0$; $\lambda=e^{-K}$).

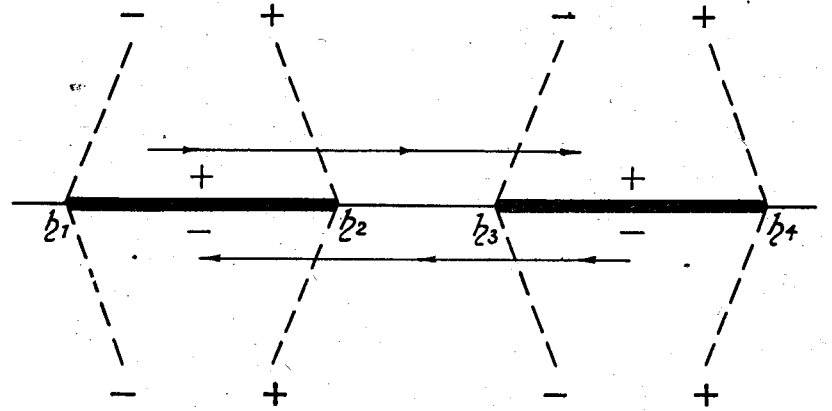


Рис. 5. Пунктиром показаны линии Стокса, т.е. линии, на которых скачком
 меняются коэффициенты a_{\pm} в асимптотическом решении у точек
 остановки η_i

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{Q}} [a_+ \exp \{ -it \} + a_- \exp \{ +it \}] (t = |\eta - \eta_i| e^{i\phi}),$$