906

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория теоретической физики

С.Н. Соколов

Р – 906

S-МАТРИЦА ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА И ЕЕ АСИМПТОТИКА В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ

Ann. Phys., 1962, т 10, в 1/2, s 110-118

Дубна 1962 год

С.Н. Соколов

Р - 906

S-МАТРИЦА ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА И ЕЕ АСИМПТОТИКА В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ

А н н о т а ц и я

Для решения одномерного уравнения Шредингера предлагается регулярный метод, основанный на прямом вычислении **S** -матрицы и сохраняющий эффективность при бесконечном растяжении области взаимодействия, когда эта область становится $\gg\lambda$. Метод применяется к исследованию квазиклассической асимптотики надбарьерного отражения для произвольных потенциалов. Показано, что эта асимптотика зависит в широких пределах от непрерывности высоких производных потенциала.

Summary

A regular method is proposed for the direct calculation of the S-matrix for the one-dimensional Schrödinger equation. The method stays effective in case of the wide interaction regions $\gg\lambda$ and is applied to the investigation of the quasi-classical asymtotic behaviour of the overbarrier reflection from arbitrary potentials. The asymptotic behaviour is shown to be largely dependent on the continuity of the high derivatives of the potential.

1. Введение

Оценка квантовых эффектов, которые зависят от деталей поведения потенциала в области, содержащей от нескольких до многих длин волн де-Бройля, приводит к трудностям при решении уравнения Шредингера, так как известные регулярные методы решения этого уравнения быстро теряют эффективность при расширении зоны взаимодействия. Эти трудности оказываются значительными даже в одномерном случае, который будет обсуждаться в настоящей работе. Типичным (одномерным) эффектом, где нельзя ограничиться рассмотрением малого участка потенциала, является надбарьерное отражение от широких и гладких потенциальных барьеров, для оценки которого был предложен ряд нерегулярных методов [1,2,3,4].

Методы, изложенные в работах [1,2,3,4], применимы к довольно узкому классу потенциалов и дают только квазиклассическую асимптотику коэффициента надбарьерного отражения (к.н.о.), не позволяя оценить порядок величины и скорость убывания отброшенных членов при стремлении параметра квазиклассичности $\alpha = \frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ к нулю. Наиболее многообещающей в смысле общности результатов была работа [1], где для уравнения Шредингера была построена приближенная функция Грина и найдена некоторая интегральная оценка к.н.о. К сожалению, там не было указано ни одного конкретного потенциала (хотя, как будет показано, их существует целый класс), для которого эта оценка дает лучшие результаты, чем первый член ряда теории возмущений. В работах [2,3,4] была найдена асимптотика к.н.о. для нескольких потенциалов, имеющих простую аналитическую структуру, если их формально рассматривать как функции комплексного x. Из этой серии работ наиболее любопытна работа [4], где гладкий действительный потенциал заменяется эквивалентным ему комплексным потенциалом, который имеет небольшую область резкого изменения и для которого эффективны обычные регулярные методы.

В настоящей работе предлагается регулярный метод решения одномерного уравнения Шредингера

$$\psi''(x) + v(x)\,\psi(x) = 0, \tag{1}$$

где $v(x) = k^2(x) = 2(E - U(x))$, который применим, в принципе, для любых $v(x)$, но наиболее эффективен для широких потенциальных барьеров. Метод основан на непосредственном вычислении S-матрицы, связывающей амплитуду прямой и отраженной волн в начальной точке x_0 с амплитудами в произвольной точке x_1.

Аналогичные методы, предназначенные для трехмерного случая, приведены в лекции Глаубера [5], однако использованные там амплитуды могут осциллировать даже в случае исчезающе малого отражения, что затрудняет применение этих методов для анализа асимптотики к.н.о. Мы будем использовать другие амплитуды, не имеющие простого 3-х мерного обобщения, но зато близкие к константам всегда, когда отражение равномерно мало.

2. Амплитуды

Назовем функции $F_1(x)$, $F_2(x)$, определенные равенством

$$F_{\substack{1\\2}}(x) = \tfrac{1}{2}\, e^{\mp i\xi} \left(v^{1/4}\psi \mp i v^{-1/4}\psi' \right), \qquad \xi \equiv \int^{x} k(x)\, dx, \tag{2}$$

амплитудами прямой и отраженной волн. Разрешая (2) относительно ψ и ψ', имеем

$$\psi(x) = v^{-1/4} F_1\, e^{i\xi} + v^{-1/4} F_2\, e^{-i\xi},$$

$$\psi'(x) = i v^{1/4} F_1\, e^{i\xi} - i v^{1/4} F_2\, e^{-i\xi}. \tag{3}$$

Дифференцируя равенство (2) один раз по x и выражая затем ψ, ψ', ψ'' через F_1, F_2 при помощи (3) и (1), получаем систему уравнений

$$\frac{d\,F_1(x)}{d\ln v(x)} = \tfrac{1}{4}\, F_2(x)\, e^{-2i\xi(x)} \tag{4}$$

$$\frac{d\,F_2(x)}{d\ln v(x)} = \tfrac{1}{4}\, F_1(x)\, e^{2i\xi(x)}.$$

Следует остановиться на мотивах выбора определения (2). Напомним тот факт, что амплитуда волны, отраженной от потенциальной ступеньки длиной $\Delta x \ll \lambda$ и высотой $\Delta v \ll v$, пропорциональна Δv и не зависит от точной формы ступеньки. Это свойство можно рассматривать как условие того, что вводимые некоторым формальным путем амплитуды имеют наглядный физический смысл. На математическом языке это условие может быть записано следующим образом: амплитуды должны иметь кусочно-непрерывную производную по $v(x)$ для произвольного кусочно-непрерывного[x] $v(x)$ ψ. Подстановка выражения (2) в правую часть системы (4) показывает, что производные $\frac{dF}{dv}$ действительно обладают нужными свойствами непрерывности. Можно показать, что любые амплитуды ϕ_1, ϕ_2, обобщающие константы c_1, c_2 в выражении $\psi_{free} = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$ на случай непостоянных потенциалов, обладающие упомянутым выше свойством дифференцируемости по $v(x)$ и удовлетворяющие системе уравнений вида

$$\frac{d\phi_1}{dv} = \phi_2 A_1(x), \quad \frac{d\phi_2}{dv} = \phi_1 A_2(x), \tag{5}$$

совпадают с F_1, F_2 с точностью до несущественных нормировочных констант.

Действительно, произвольный функционал от v, непрерывно переходящий в $kx + const$ при стремлении потенциала к постоянному, имеет вид $\xi + \eta$, где η – произвольная функция, дифференцируемая по v. Следовательно,

$$\psi = \phi_1 f_1 e^{i\xi} + \phi_2 f_2 e^{-i\xi}, \tag{6}$$

где $\phi_{\frac{1}{2}} f_{\frac{1}{2}} = e^{\pm i\eta}$. Дифференцируя (6) по x

$$\psi' = i v^{1/2} \phi_1 f_1 e^{i\xi} - i v^{1/2} \phi_2 f_2 e^{-i\xi} + \frac{dv}{dx}\left[e^{i\xi} \frac{d}{dv}(\phi_1 f_1) + e^{-i\xi} \frac{d}{dv}(\phi_2 f_2) \right]$$

и принимая во внимание кусочную непрерывность функций $\frac{d}{dv}(\phi f)$, мы видим, что существование ψ' может быть обеспечено только в том случае, если выражение в квадратных скобках равно нулю и

$$\psi' = i v^{1/2} \phi_1 f_1 e^{i\xi} - i v^{1/2} \phi_2 f_2 e^{-i\xi}, \tag{7}$$

так как в противном случае производная v', существование которой не предполагается, войдет в выражение для ψ'. Из сравнения (6), (7) с (3) очевидно, что уравнения для $\phi_{\frac{1}{2}}$ могут быть получены из (4) подстановкой $F_{\frac{1}{2}} = \phi_{\frac{1}{2}} v^{1/4} f_{\frac{1}{2}}$ и будут иметь вид (5), только если $v^{1/4} f_{\frac{1}{2}} = const$.

---

x) Далее такие функции будут называться коротко дифференцируемыми по $v(x)$.

Нетрудно заметить, что F_1, F_2 являются как раз коэффициентами при волновых функциях $v^{-1/4} e^{\pm i\xi}$ в квазиклассическом приближении Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна[x)]/6,7/. Это любопытный факт, так как соображения, лежащие в основе формул (2)-(4), не имеют ничего общего с обычным выводом квазиклассических волновых функций из асимптотического разложения по степеням $\hbar$ (точнее, по степеням $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$).

3. Матрица рассеяния

Запишем (4) в матричной форме

$$d F = g(\xi)\, F\, ½\, d \ln v, \tag{8}$$

где

$$F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}, \qquad g(\xi) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-2i\xi} \\ e^{2i\xi} & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрицы $g(\xi)$ при разных ξ не коммутируют между собой.

Решение уравнения (8) может быть записано в виде X -экспоненты

$$F(x_1) = X\left(\exp \int_{x_0}^{x_1} ¼\; g\; d \ln v(x)\right) F(x_0), \tag{9}$$

где знак X -произведения означает, что матрицы $g(\xi) \equiv g[\xi(x)]$ должны быть расставлены в порядке возрастания x слева направо (или убывания x, если $x_1 < x_0$). Заметим, что понятие упорядоченной экспоненты, введенное Файнманом/8/, совпадает с понятием мультипликативного интеграла $\int (1+ f(x)\, dx)$, введенным в 1887 году Вольтерра и означающим бесконечное произведение

$$\int_a^\beta (1+ f\, dx) = \lim_{\substack{n\to\infty \\ \Delta x_i \to 0}} \prod_{x_i=a}^{x_n=\beta} (1+ f(x_i)\Delta x_i). \tag{10}$$

Свойства мультипликативных интегралов подробно обсуждаются в монографии/9/.

---

x) Между F_1, F_2 и амплитудами ВКБ приближения имеется, помимо других, следующая разница: в ВКБ приближении при $v < 0$ берутся функции $|v^{-1/4}|\, e^{\pm i\xi}$, а в (3), (2) знак модуля перед $v^{\pm 1/4}$ отсутствует. Благодаря этому, согласно (2), F_1, F_2 всегда испытывают скачок при переходе через точку поворота и известное "отсутствие аналитического продолжения" перестает быть парадоксом.

Двухрядная матрица

$$S(x_1, x_0) = X\left(\exp \int_{x_0}^{x_1} \tfrac{1}{4} g \, d\ln v\right), \qquad (11)$$

преобразующая $F(x_0)$ в $F(x_1)$, унимодулярна (в силу закона сохранения потока $tr\ g = 0$) и может быть разложена в ряд

$$S = 1 + \int_{x_0}^{x_1} \tfrac{1}{4} g \, d\ln v + \int_{x_0}^{x_1} \tfrac{1}{4} g(\xi^1) \int_{x_0}^{x^1} \tfrac{1}{4} g(\xi) \, d\ln v(x^1) \, d\ln v(x) + \ldots \qquad (12)$$

Этот ряд сходится всегда, когда существует интеграл $\int_{x_0}^{x_1} e^{\pm 2i\xi(x)} \, d\ln v(x)$, так что (9) дает общее решение уравнения Шредингера (1).

Не всякая унимодулярная матрица может быть S -матрицей, так как кроме условия $S_{11} S_{22} - S_{12} S_{21} = 1$ элементы S -матрицы удовлетворяют двум дифференциальным уравнениям и могут быть выражены друг через друга. Например, если известны элементы S_{11}, S_{22}, то S_{12} дается формулой

$$S_{12} = \exp\left(c + \int_{x_0}^{x_1} S'_{22} \, S_{11} \, (S_{22} S_{11} - 1)^{-1} \, dx\right),$$

где c - произвольная константа.

Если известны два независимых решения $\psi_\alpha(x)$ и $\psi_\beta(x)$ уравнения (1), матрица S может быть написана в явной форме. Введем матрицу $F = \begin{pmatrix} F_{1\alpha} & F_{1\beta} \\ F_{2\alpha} & F_{2\beta} \end{pmatrix}$, где столбцы получаются подстановкой ψ_α, ψ_β в (2). Тогда $S(x_1, x_0) = F(x_1) F^{-1}(x_0)$. В качестве примера приведем S - матрицу для прямоугольного скачка от v_0 к v в точке x:

$$S(x+0, x-0) = \begin{pmatrix} ch \tfrac{1}{4} \ln \frac{v}{v_0} & sh \tfrac{1}{4} \ln \frac{v}{v_0} \cdot \exp(-2i\xi(x)) \\ sh \tfrac{1}{4} \ln \frac{v}{v_0} \cdot \exp(2i\xi(x)) & ch \tfrac{1}{4} \ln \frac{v}{v_0} \end{pmatrix}.$$

При использовании матрицы (11) следует помнить, что поток частиц, уходящий в $+\infty$, дается выражением $|F_1(\infty)|^2 \exp\{-2 Im[\xi(\infty) - \xi(-\infty)]\}$, а не просто $|F_1(\infty)|^2$.

4. Малое отражение

Разложения, подобные (12), полезны как источник прямых оценок S -матрицы, полностью независимых от оценок обычной теории возмущений. Нулевой член ряда (12), $S = 1$, совпадает с ВКБ приближением. Более интересным примером, который будет сейчас обсуждаться, является первый член, $\int \frac{1}{4} g \; d \ln v$, который дает оценку коэффициента надбарьерного отражения x).

$$R = \int e^{2i\xi} \; \frac{1}{4} \, d \ln v \; ; \qquad v > 0 \; . \tag{13}$$

Эта оценка была впервые найдена в /1/, где, как уже упоминалось выше, не была выяснена ее область применимости. Вопрос о свойствах оценки (13) стал еще более темным после работ /2,3/, где было высказано необоснованное утверждение, что (13) не дает ничего нового по сравнению с первым членом ряда теории возмущений.

Найдем достаточное условие применимости оценки (13). Ограничимся случаем, когда отражение равномерно мало, то есть

$$| R(x) | = | \int^{x} e^{2i\xi} \; \frac{1}{4} \, d \ln v \, | < \rho << 1 \; .$$

Тогда, как можно показать интегрированием по частям многократных интегралов, составляющих остаток ряда (12),

$$| S_{21} - R \, | < \rho^2 \; \frac{1}{2} \int | \, d \ln v \, | \; . \tag{14}$$

Требуя, чтобы абсолютная погрешность оценки R не превышала оцениваемой величины, приходим к достаточному условию

$$\theta = | R |^{-1} \rho^2 \frac{1}{2} \int | \, d \ln v \, | < 1 \; , \tag{15}$$

при выполнении которого оценка (15) применима к потенциалу v. Условие (15) не эквивалентно условию квазиклассичности, что особенно заметно в далекой квазиклассической области, но обсуждать этот вопрос мы пока не будем.

Вариация логарифма v, $\int | \, d \ln v \, | \equiv V \{ \ln v \}$, входящая в (15), ведет себя как $\approx 2 \ln \frac{v_{max}}{v_{min}}$ и в случае $\rho^2 << | R |$ не может нарушить (15), даже если v_{max} в десятки раз превышает v_{min}. Таким образом, оценка (13) может применяться к потенциалам $v(x)$, которые весьма далеки от постоянных и которые не могут рассматриваться методами теорий возмущений. В качестве конкретного примера укажем потенциал $v(x)$ (рис. 1):

---

x) Если поток частиц падает слева, $\psi_{in} = \exp(i\xi)$, то амплитуда отраженной волны дается минус матричным элементом S_{21} : $\psi_{refl} = -S_{21} S_{22}^{-1} \exp(-i\xi) \approx -R \exp(-i\xi)$.

x	$-\infty, 0$	$0, x_1$	x_1, x_1+2	$x_1+2,\ x_1+2+x_2$	x_1+2+x_2, ∞
$v(x)$	1	$(1-2p_1 x)^{-2}$	25	$[1+2p_2(x_1+2+x_2-x)]^{-2}$	1

где $\quad p_1 = \dfrac{1}{80} \ln 5\ ; \quad p_2 = -\dfrac{1}{120} \ln 5\ ; \quad x_{1,2} = \dfrac{2}{5} \mid p_{1,2} \mid^{-1}$.

Подсчитывая

$$R = e^{2i\xi(0)} \Big(\int_0^{40} e^{2i\xi} p_1 \, d\xi + \int_{50}^{110} e^{2i\xi} p_2 \, d\xi \Big) = e^{2i\xi(0)} \, (-0{,}01399\ldots + i\,0{,}01206\ldots)$$

и оценивая численно $\rho \approx \dfrac{1}{30}$, убеждаемся, что $\theta \approx 0{,}2 < 1$, и найденное R может служить оценкой для S_{21}. Для сравнения приведем значение S_{21}, полученное точным решением уравнения (1): $S_{21} = e^{2i\xi(0)} \, (-0{,}01404\ldots + i\,0{,}01210\ldots)$.

5. Сильное отражение

Если отражение сильно, ряд (12) может сходится медленно. В этом случае одним из способов получения S -матрицы в виде быстро сходящихся разложений может служить следующий метод модельных потенциалов.

Возьмем в качестве независимого переменного фазу ξ . В дальнейшем, если в некотором выражении участвуют одновременно несколько потенциалов $w^1(\xi)$, $w^2(\xi)$; то каждый рассматривается как функция своей собственной фазы: $w^{(i)}(\xi) = v^{(i)}(\ldots)$, где $\xi = \int^{x^{(i)}} \sqrt{v^{(i)}} \, dx$, причем для знакопеременных w предполагается, что соответствующие комплексные фазы принимают одно и то же множество значений и упорядочивание по x эквивалентно упорядочиванию по $|\xi|$.

Напишем тождество

$$S^{(1)}(\xi_1, \xi_0) = X \exp \int_{\xi_0}^{\xi_1} g(\xi) \, ¼ \, d \ln w^{(1)}(\xi) = X \exp \int_{\xi_0}^{\xi_1} g(\xi) \, ¼ \, \Big(d \ln w^{(2)}(\xi) + \tag{18}$$

$$+ \, d \ln \frac{w^{(1)}(\xi)}{w^{(2)}(\xi)} \Big) = S^{(2)}(\xi_1, \xi_0) \, X \exp \int_{\xi_0}^{\xi_1} [\, S^{(2)}(\xi, \xi_0) \,]^{-1} g(\xi) \, S^{(2)}(\xi, \xi_0) \, ¼ \, d \ln \frac{w^{(1)}(\xi)}{w^{(2)}(\xi)}$$

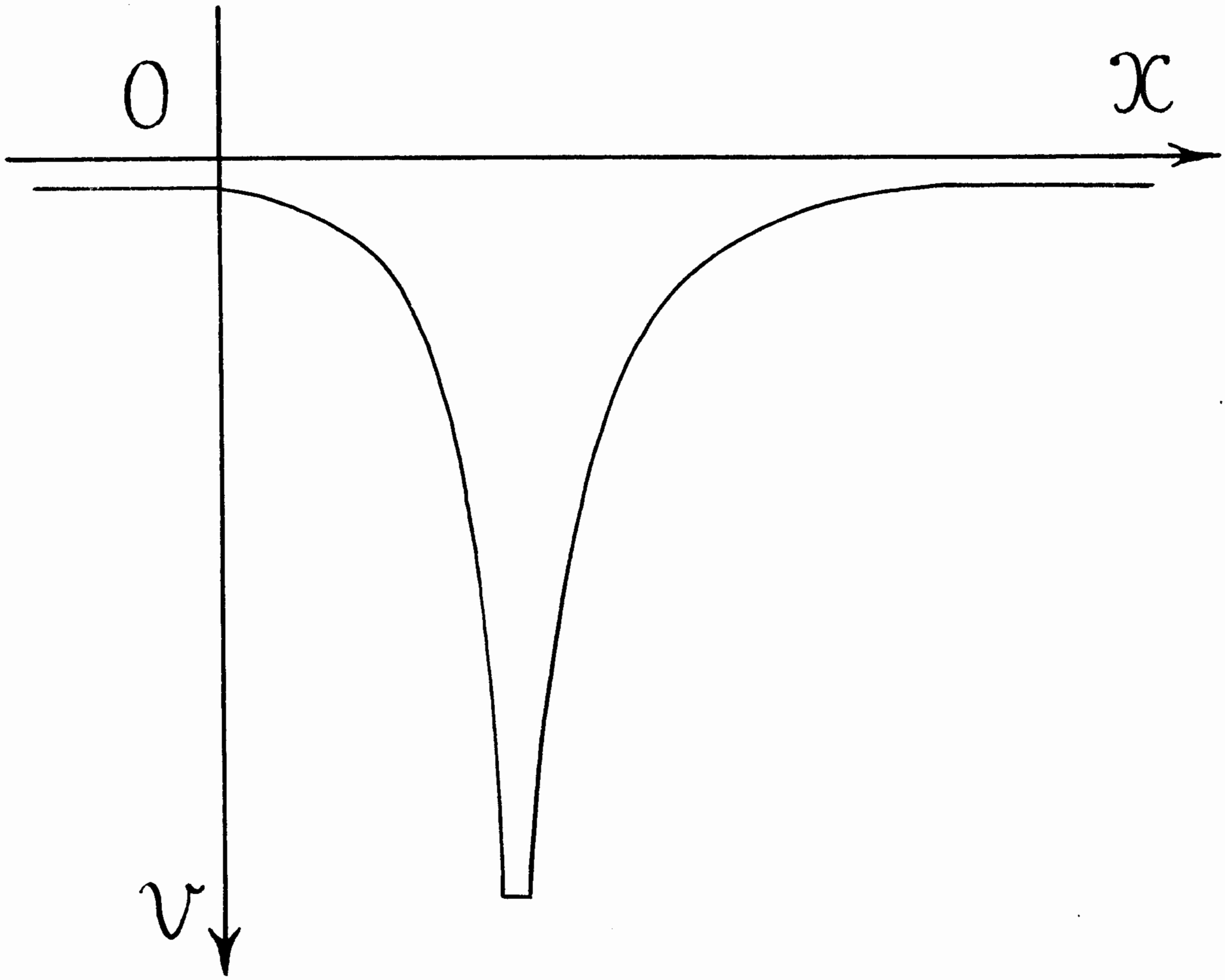

Рис. 1.

где $S^{(2)}$ означает S -матрицу для потенциала $w^{(2)}$ и которое легко доказать, записывая X -экспоненту в виде произведения (10). Из (16) очевидно, что если $\frac{d\ \ln w^{(1)}(\xi)}{d\xi} = \frac{d\ \ln w^{(2)}(\xi)}{d\xi}$, то потенциалы $w^{(1)}$ и $w^{(2)}$ эквиваленты, то есть имеют равные матрицы рассеяния $S(\xi_1, \xi_0)$.

Допустим, что потенциал $w^{(2)}(\xi)$ используется в качестве модельного и для него S -матрица известна. Разлагая стоящую в правой части (16) X -экспоненту в ряд, аналогичный (12), имеем

$$S^{(1)}(\xi_1, \xi_0) = S^{(2)}(\xi_1, \xi_0) + \int_{\xi_0}^{\xi_1} S^{(2)}(\xi_1, \xi)\ g(\xi)\ S^{(2)}(\xi, \xi_0)\ \tfrac{1}{4}\ d\ln \frac{w^{(1)}(\xi)}{w^{(2)}(\xi)} + \dots \quad (17)$$

В частном случае $w^{(2)} = const$, $S^{(2)} = 1$, разложение (17) переходит в (12). Ряд (17) для $S^{(1)}$ и аналогичное разложение для матрицы

$$T = \begin{pmatrix} e^{i\xi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\xi_1} \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} e^{-i\xi_0} & 0 \\ 0 & e^{i\xi_0} \end{pmatrix} = X\exp \int_{\xi_0}^{\xi_1} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} i\,d\xi + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tfrac{1}{4}\, d\ln w \right],$$

которая более удобна в случае $v < 0$, сходятся, говоря качественно, как степенной ряд для $e^{\beta/2}$, где $\beta = \int_{\xi_0}^{\xi_1} |d\ \ln (w^{(1)}/w^{(2)})|$. Таким образом, для того, чтобы некоторый потенциал $w(\xi)$ имел S -матрицу, близкую к $S^{(1)}(\xi_1, \xi_0)$, и мог применяться в качестве приближенно эквивалентного потенциалу $w^{(1)}(\xi)$, достаточно, чтобы вариация отношения $\frac{w^{(1)}(\xi)}{w(\xi)}$ была мала по сравнению с единицей. Пример использования ряда (17) для нахождения поправки к формулам связи квазиклассических решений в точке поворота дан в препринте /10/.

Существенным качеством метода модельных потенциалов является то, что ее эффективность, вообще говоря, не снижается с увеличением размеров области, в которой потенциалы $w^{(1)}$ и $w^{(2)}$ не совпадают.

6. Надбарьерное отражение в квазиклассическом случае

Часто можно встретить утверждение, что в квазиклассическом пределе, $a = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \to 0$, отражение экспоненциально мало. Между тем, поведение коэффициента отражения в широких пределах зависит от типа потенциала и S_{12} не является обязательно экспоненциально малым по a.

Общую картину зависимости S_{21} от a можно легко установить при помощи оценки (13). Предположим, что n -ая производная $\frac{d^n \ln w(\xi)}{d\xi^n} = \ln^{(n)} w(\xi)$, где $w(\xi) = w[\xi(x)] = v(x)$, существует и является кусочно-гладкой. Тогда, вводя в аргумент потенциала $w(\xi)$ параметр квазиклассичности a, $w = w(a\xi)$, растягивающий w при $a \to 0$, и производя в каждом члене ряда (12) для S_{12} некоторое число интегрирований по частям, имеем

$$R = \tfrac{1}{4} \int e^{2i\xi}\, d \ln w(a\xi) = \tfrac{1}{4} \frac{a^n}{(-2i)^n} \int e^{2i\xi}\, d \ln^{(n)} w(a\xi)$$

и $|S_{21} - R| < a^{n+1}\, const$. Мы видим, что оценка R убывает как a^n или быстрее и является, вообще говоря,[x)] асимптотически точной при $a \to 0$ для каждого данного n. Если $\ln^{(n)} w(\xi)$ в точках ξ_j имеет скачки $\Delta_j \ln^{(n)} w$, то отражение убывает в точности как a^n

$$S_{21} = \tfrac{1}{4} \frac{a^n}{(-2i)^n} \sum_j \Delta_j \ln^{(n)} w\; e^{2i\xi_j/a} + a^n\, 0(a)$$

и в пределе $a \to 0$ целиком происходит от скачков n-ой производной w.

Очевидно, для аналитических $w(a\xi)$ матричный элемент S_{21} должен убывать быстрее любой степени a, например, как $a^{-\ln a}$ или e^{-c/a^2}. В этом случае оценка R уже более не является асимптотически точной, хотя и остается того же порядка, что S_{21}. Отражение, асимптотически малое в обычном смысле (то есть как $e^{-c/a}$), имеет место в довольно частном случае, когда $\ln^{(1)} w(a\xi)$ - аналитическая функция с конечным числом простых полюсов. Тогда при $a \to 0$

$$S_{21} \approx R = \tfrac{1}{4} \int e^{2i\xi} \sum_j \frac{c_j}{a\xi - i\sigma_j}\, d(a\xi) \to i\,\pi/2\; c_0 e^{-2\frac{\sigma_0}{a}},$$

где σ_0 - наименьшее из всех положительных σ_j.

Если v'' или более высокие производные v существуют, относительная ошибка оценки R как функция R убывает довольно медленно. Более мощные оценки для S_{21} можно построить при помощи преобразования Лангера[/11/], которое состоит в следующей одновременной замене как независимого переменного, так и волновой функции

---

x) При изменении a оценка R может периодически проходить через нуль. В окрестностях таких точек оценка R становится неверной, однако относительная длина областей a, где это случается, стремится в нулю при $a \to 0$.

$$y = \int^{x} h^{-2}(x)\, dx\ ; \quad \bar{\psi} = h^{-1}\psi\ , \tag{18}$$

где $h(x)$ – произвольная дважды дифференцируемая функция. Подставляя (18) в (1), имеем

$$\frac{d^2\bar{\psi}}{dy^2} + \bar{v}\bar{\psi} = 0\ , \quad \bar{v} = h^4 v + h^3 h''.$$

Полагая $h = v^{-1/4}$ и обозначая R для $\bar{v}$ через $\bar{R}$, получаем оценку

$$\bar{R} = \tfrac{1}{4}\int \exp\left(2i\int^{x}\sqrt{\bar{v}\, v}\, dx\right) d\ln\bar{v}\ , \quad \bar{v} = 1 + 5/16\,(v')^2 v^{-3} - \tfrac{1}{4} v'' v^{-2}\ .$$

Эта оценка имеет вполне удовлетворительную относительную точность в широком диапазоне случаев, включая экспоненциально малое рассеяние. Возьмем частный случай, рассмотренный впервые Покровским и др. /2/, когда $v = (ax - i\sigma)Q(ax)$, где $Q(x)$ – аналитическая функция, не имеющая ни нулей, ни особенностей в полосе $|Im\, x| < \sigma_1$, $\sigma_1 > \sigma > 0$. Если особенности производной $\frac{d}{dx}\ln Q(x)$ вне упомянутой полосы не являются слишком многочисленными, то S – матрица в асимптотике $a \to 0$ не зависит от Q, и можно положить $v = ax - i\sigma$. Переходя к переменной ξ и подставляя в (12) $\xi_1 = \xi - i\frac{\bar{\sigma}}{a}$; $i\bar{\sigma}/a = \xi(i\sigma/a)$, легко доказать, что $S_{21} = ce^{-2\frac{\bar{\sigma}}{a}}$; $\bar{R} = re^{-2\frac{\bar{\sigma}}{a}}$, где ни c, ни r не зависят от a. Вычисляя

$$r = \tfrac{1}{4}\int \exp\left(2i\int^{\xi_1}\sqrt{1 + \frac{5}{36\xi_1^2}}\, d\xi_1\right) d\ln\left(1 + \frac{5}{36\xi_1^2}\right) = i \cdot 1{,}0000007\ .. \tag{19}$$

(контур интегрирования проходит ниже точки $\xi_1 = -i\frac{\sqrt{5}}{6}$ и замыкается в верхней полуплоскости) и оценивая $S_{21} - R$ при помощи (14), для относительной погрешности оценки $\bar{R}$ имеем

$$\left|\frac{S_{21} - \bar{R}}{\bar{R}}\right| = \left|\frac{c - r}{r}\right| < \frac{\bar{\rho}^{\,2}\tfrac{1}{2}\int|d\ln v|}{|\bar{R}|} \leqq 3^3 2^{-16} \min_{a}\left[e^{2\frac{\sigma}{a}}\left(\frac{\sigma}{a}\right)^{-8}\right] = 2\cdot 10^{-5}. \tag{20}$$

Сравнение (19) с точным значением $c = i$, полученным в работе /2/ довольно сложным образом[x)], показывает, что $\bar{R}$ имеет на самом деле значительно меньшую погрешность, чем это допускается неравенством (20).

---

x) В /2/ коэффициент отражения написан по ошибке везде с обратным знаком (см. примечание на стр. 8 и ср. с /3/).

В то время как формальная сторона только что изложенного обсуждения квазиклассической асимптотики довольно тривиальна, физическое значение полученных результатов далеко не так прозрачно. Действительно, возможность экспериментальной проверки существования n -ой производной или, тем более, некоторых аналитических свойств потенциала $w(\xi)$ на комплексной плоскости более чем сомнительна. С другой стороны, полученные выше результаты показывают, что аппроксимация $w(\xi)$ некоторой функцией с известными свойствами, что обычно считается возможным, является ненадежной и неадэкватной процедурой в квазиклассическом случае.

7. Обсуждение и дальнейшие проблемы

Как было указано Герштейном С.С., матричное уравнение (8) и последующий формализм может оказаться полезным обобщить на случай системы зацепленных одномерных уравнений Шредингера, возникающих в теории столкновений молекулярных ионов.

Явление отражения от неровностей потенциала имеет глубокое родство с явлением несохранения классических адиабатических инвариантов в квантовой механике. Поэтому возможно, что предложенный здесь подход окажется полезным также и при рассмотрении этих последних явлений.

Полученные результаты приводят к новой точке зрения на природу квазиклассического приближения Вентцеля-Крамерса -Бриллюэна. Обычно в качестве источника этого приближения указывается асимптотическое разложение по степеням[7] $\hbar$. Однако это разложение имеет отвратительные математические свойства и не позволяет ни улучшить ВКБ приближение, ни проанализировать серьезно область его применимости. Более того, разложение по $\hbar$ неспособно дать даже качественное объяснение, почему именно два первых членов этого разложения, а, скажем, не один или три, дают исключительно хорошее приближение ВКБ. Между тем, при подходе, предложенном в настоящей работе, особая роль ВКБ приближения является естественной и очевидной.

В заключение автор хотел бы выразить благодарность Я.А.Смородинскому и С.С.Герштейну за постоянную помощь.

Литература

1. И.И.Гольдман, А.Б.Мигдал. ЖЭТФ, 28, 394 (1955).
2. В.Л.Покровский, С.К.Саввиных, Ф.Р.Улинич. ЖЭТФ, 34, 1272 (1958).
3. В.Л.Покровский, Ф.Р.Улинич, С.К.Саввиных. ЖЭТФ, 34, 1629 (1958).
4. В.Л.Покровский, И.М.Халатников. ЖЭТФ, 40, 1713 (1961).
5. F. Glauber. Lectures in theoretical physics. Vol. 1, Interscience publishers. New York, 1959.
6. L . Schiff. 'Quantum Mechanics'. New York, 1955.
7. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, том 1, Гостехиздат 1948, стр. 192-193.
8. R. Feynman. Phys.Rev. 84, 108 (1951).
9. Ф.Р.Гантмахер. Теория матриц, гл. X1У, ГИТТЛ 1953.
10. S.N. Sokolov. ' S-matrix for the one-dimensional Schrodinger equation'. Preprint ОИЯИ, Dubna, 1961.
11. R.E. Langer. Phys. Rev. 51, 669 (1937).

Рукопись поступила в издательский отдел
23 января 1962 года.