СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 7183

В.В. Бабиков, К.К. Мусабаев

К ТЕОРИИ ОТРАЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ОДНОМЕРНЫМИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ БАРЬЕРАМИ

1973

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7183

В.В. Бабиков, К.К. Мусабаев

К ТЕОРИИ ОТРАЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ОДНОМЕРНЫМИ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ БАРЬЕРАМИ

В монографии /I/ была рассмотрена одномерная задача надбарьерного отражения частиц, когда энергия $E > V(x)$ ($V(x)$ – потенциальная функция). Получено /I/ точное нелинейное уравнение для функции отражения $B(x)$:

$$B'(x) = \frac{p'(x)}{2p(x)} \left\{ e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x')dx'} - B^2(x)\, e^{-\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p(x')dx'} \right\} \qquad (I)$$

с начальным условием

$$B(+\infty) = 0. \qquad (2)$$

Здесь $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$ – классический импульс частицы, x_0 – произвольная точка на действительной оси x . Коэффициент отражения определяется соотношением вида :

$$R = |B(-\infty)|^2. \qquad (3)$$

Для нахождения квазиклассического приближения для решения уравнения (I) было предположено, что

$$|B(x)|^2 \ll 1 . \qquad (4)$$

В итоге коэффициент надбарьерного отражения (КНО) в первом квазиклассическом приближении стал равен

$$R_{кв.} = \varkappa\, \ell n^2\left(\frac{\sigma}{\hbar}\right) e^{-\frac{4}{\hbar} Im \int_{x_0}^{z_0} p(z)dz}, \qquad (5)$$

(где $\varkappa$ и σ – некоторые параметры, зависящие от конкретного вида потенциала).

С другой стороны известно [2], что предэкспоненциальный множитель не зависит от параметра $\hbar$. Очевидно, что появление этого множителя (см. примечание в работе [3]) является следствием применения условия (4).

В работе [3] получено правильное выражение для КНО в первом квазиклассическом приближении :

$$R_{кв.} = 4\cos^2\frac{\pi}{2(1+\alpha)}\, e^{-\frac{4}{\hbar}\,\mathrm{Im}\int_{x_0}^{z_0} p(z)dz}, \tag{6}$$

где α – наибольший порядок нуля функции $p(z)$ в точке z_0, ближайшей к оси x.

В этой работе естественным было бы попытаться оценить поправочные члены к основному $R_{кв.}$. Однако получение поправочных членов для физически интересных случаев ($\beta < 2+3\alpha$) представляет "... большие практические трудности". Заметим, что эти трудности являются следствием учёта лишь одного нуля (z_0) функции $p(z)$ при построении системы уравнений (I6) [3].

В настоящей работе предлагается метод построения замкнутого выражения коэффициента надбарьерного отражения. Потенциальная функция $V(x)$ предполагается аналитической всюду на действительной оси x и имеет экспоненциальные асимптотики при $x \to \pm\infty$. При этом на параметры потенциала (например, a – характерный размер) не накладывается какое-либо ограничение. Будем исходить из уравнения (I), аналитически и однозначно продолженного с действительной оси x в комплексную плоскость переменной z $(\mathrm{Re}(z)=x)$:

$$B'(z) = \frac{p'(z)}{2p(z)}\left\{\exp\left[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{z} p(z')dz'\right] - B^2(z)\exp\left[-\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{z} p(z')dz'\right]\right\} \tag{7}$$

с прежним начальным условием

$$B(+\infty) = 0.$$

Однозначность достигается проведением разрезов функции $p(z)$. Для удовлетворения начального условия $B(+\infty)=0$ разрезы $p(z)$ в комплексной плоскости z должны быть проведены так, чтобы классический импульс $p(x)=|p(x)|$ находился всюду на оси х. (При этом для коэффициента отражения справедлива формула (3)). Экспоненциальный характер асимптотик функции $V(x)$ обуславливает для функции $p(z)$ появление множества регулярных (нули z_i) и нерегулярных (полюса ξ_j целого или нецелого порядка) особых точек. (Вообще говоря, могут появиться и существенно особые точки, например, в случае потенциала Гаусса).

Требование аналитичности функции $B'(z)$ всюду в рассматриваемой области (включая и особые точки функции $p(z)$) выполняется, если выражение, стоящее в фигурных скобках уравнения (7), в точках z_i и ξ_j приравнять к нулю. (Это необходимо, поскольку функция $p'(z)/p(z)$ в точках z_i и ξ_j имеет полюс первого порядка). А это сразу приводит к соотношениям, устанавливающим прямую связь между функцией $B(z)$ и ВКБ – интегралом (входящим в правую часть уравнения (I)), в точках z_i и ξ_j :

$$B(z_i) = \pm\exp\left[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{z_i} p(z)dz\right], \tag{8а}$$

$$B(\xi_j) = \pm\exp\left[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{\xi_j} p(z)dz\right]. \tag{8б}$$

Величины $B(z_i)$ и $B(\xi_j)$ будут конечными при $i(j) \to \max\{i(j)\}$, если

$$\mathrm{Im}\int_{x_0}^{z_i} p(z)dz > 0 \quad и \quad \mathrm{Im}\int_{x_0}^{\xi_j} p(z)dz > 0. \tag{9}$$

Учитывая, что $Re[p(z)] \leq (p(x)>0)$, из неравенств (9) находим :

$$Im(z_i) > 0 \quad и \quad Im(\zeta_j) > 0 . \tag{I0}$$

Отсюда следует, что физической областью определения функции $B(z)$ является верхняя полуплоскость (включая, конечно, действительную ось x). Чтобы выбрать определенный знак перед экспонентами в соотношениях (8а,б), воспользуемся формулой (I2) работы /4/ :

$$B_o(z) = \frac{p(z)-p_+}{p(z)+p_+} \tag{II}$$

(следует отличать $B_o(z)$ от $B(z_o)$).

Если ближайшие к оси x особые точки z_o и ζ_o функции $p(z)$ не расположены на линии $Re(z) = const$, то, имея в виду (II), запишем :

$$p(z_o) = 0 \ , \quad B(z_o) = -exp\Big[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_o}^{z_o} p(z)dz\Big], \tag{I2a}$$

$$p(\zeta_o) = \infty \ , \quad B(\zeta_o) = exp\Big[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_o}^{\zeta_o} p(z)dz\Big]. \tag{I2б}$$

В противном случае будем иметь:

$$B(z_o) = -exp\Big[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_o}^{z_o} p(z)dz\Big], \tag{I3a}$$

$$B(\zeta_o) = B(z_o)\, exp\Big[\frac{2i}{\hbar}\int_{z_o}^{\zeta_o} p(z)dz\Big]. \tag{I3б}$$

Относительно знаков остальных величин $B(z_i)$ и $B(\zeta_j)$ ($i,j \neq 0$) уточним ниже.

Теперь перейдем к построению выражения для коэффициента отражения. Заметим, что формула (6) при $\alpha = \frac{1}{2}$ приобретает вид :

$$R_{кв.} = e^{-\frac{4}{\hbar} Im\int_{x_o}^{z_o} p(z)dz} .$$

Запишем это выражение в удобном для нас представлении:

$$R_{кв.} = \Big| -e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{x_o}^{z_o} p(z)dz} \Big| . \tag{I4}$$

Сопоставляя экспоненту в (I4) с правой частью соотношения (I2а), видим, что они эквивалентны.

Отсюда следует, что

$$R_{кв.} = |B(z_o)|^2, \tag{I5}$$

т.е. основной член в выражении для КНО в квазиклассическом приближении ($R_{кв.}$) определяется наибольшей величиной, взятой из совокупности

$$\{|B(z_i)|, |B(\zeta_j)|\} .$$

В связи с этим представляется разумным допустить, что в точное значение коэффициента отражения должна входить вся совокупность величин $B(z_i)$ и $B(\zeta_j)$ в определенной комбинации. Имея в виду данное предположение, представим значение функции отражения $B(z)$ в точке $x = -\infty$ в виде линейной комбинации $B(z_i)$ и $B(\zeta_j)$:

$$B(-\infty) = \sum_{i=0}^{M} B_i(z_i) + \sum_{j=0}^{N} B_j(\zeta_j) . \tag{I6}$$

Здесь индексом i и j (для $B(z)$) введены для удобства.

Соответственно для коэффициента отражения имеем

$$R = \left| \sum_{i=0}^{M} B_i(z_i) + \sum_{j=0}^{N} B_j(\xi_j) \right|^2 . \qquad (17)$$

Рассмотрим выражение (I7) для конкретных потенциалов. В качестве одного из них возьмем "решаемый" потенциал Эккарта

$$V(x) = V_0 / [1 + \exp(-x/a)] ,$$

для которого известно /2/ точное выражение для КНО :

$$R = \frac{sh^2\left[\frac{a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- - P_+)\right]}{sh^2\left[\frac{a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- + P_+)\right]} . \qquad (18)$$

Далее обозначим :

$$\frac{a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- - P_+) \equiv \theta_1 , \quad \frac{a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- + P_+) \equiv \theta_2 . \qquad (19)$$

Формулу (I8) (имея в виду (I9)) распишем в экспоненциальном виде :

$$R = e^{-2(\theta_2 - \theta_1)} \Big\{ -1 + e^{-2\theta_1} - e^{-2\theta_2} + e^{-2(\theta_1 + \theta_2)} - e^{-4\theta_2} + e^{-2(2\theta_2 + \theta_1)} - e^{-6\theta_2} + e^{-2(3\theta_2 + \theta_1)} - e^{-8\theta_2} + e^{-2(4\theta_2 + \theta_1)} - e^{-10\theta_2} + \cdots \Big\}^2 . \qquad (20)$$

Теперь обратимся к нашей формуле (I7).
Во-первых, $j \equiv i$. Топология функции $\rho(z)$ напоминает "лестницу", нижней ступенью которой является разрез $z_0 \to \xi_0$, параллельный оси x (см. рис. I). Поэтому знаки величин $B(z_0)$ и $B(\xi_0)$ определяются согласно соотношениям (I2а,б).

Естественно будет предположить, что знаки всех величин $B_i(z_i)$, $B_j(\xi_i)$ для i - четных будут идентичны знакам соответствующих величин $B_0(z_0)$ и $B_0(\xi_0)$. Для i - нечетных знаки должны быть обратными знакам $B_0(z_0)$ и $B_0(\xi_0)$.
Учитывая вышесказанное, запишем формулу (I7) в виде :

$$R = \left| \sum_{i=0}^{M} \left(-e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{z_i} \rho(z)dz} \right)_i + \left(e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{\xi_i} \rho(z)dz} \right) \right|^2 .$$

Далее множитель $\exp\left[\frac{2i}{\hbar}\int_{x_0}^{z_0} \rho(z)dz\right]$ вынесем за знак суммы и модуля, тогда КНО запишется как

$$R = e^{-\frac{4}{\hbar} Im \int_{x_0}^{z_0} \rho(z)dz} \Big\{ -1 + e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{\xi_0} \rho(z)dz} - e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{\xi_1} \rho(z)dz} + e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{z_1} \rho(z)dz} - e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{z_2} \rho(z)dz} + e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{\xi_2} \rho(z)dz} - e^{\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{\xi_3} \rho(z)dz} + \cdots \Big\}^2 . \qquad (21)$$

Для вычисления интегралов, во-первых, перейдем от независимой переменной z к независимой переменной $\rho(z)$ (интеграл при этом сводится к табличному /5/); во-вторых, контуры интегрирования проведем так, как показано на рис. 2 и 3. Сравнивая соответствующие первые члены (выписанные в явном виде) выражения (2I) с первыми членами выражения (20), видим, что они полностью совпадают. При этом нетрудно заметить, что в выражении (2I) появляются члены, одинаковые по структуре, поэтому можно легко выписать и i $\underline{\text{ый}}$-член, что далее позволяет быстро просуммировать все члены с одинаковой структурой :

I). i - четные $(M \to \infty)$.

$$\sum_{i=0}^{M} B_i(z_i) = -\frac{1}{1 - e^{-\frac{4a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- + P_+)}} ,$$

$$\sum_{i=0}^{M} B_i(\xi_i) = \frac{\exp\left(-\frac{2a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- - P_+)\right)}{1 - \exp\left(-\frac{4a\tilde{\pi}}{\hbar}(P_- + P_+)\right)} .$$

2) i - нечётные $(M \to \infty)$.

$$\sum_{i=1}^{M} B_i(z_i) = \frac{-\exp\left(-\frac{4a\pi}{\hbar}\rho_-\right)}{1-\exp\left(-\frac{4a\pi}{\hbar}(\rho_- + \rho_+)\right)},$$

$$\sum_{i=1}^{M} B_i(\xi_i) = \frac{-\exp\left(-\frac{2a\pi}{\hbar}(\rho_- + \rho_+)\right)}{1-\exp\left(-\frac{4a\pi}{\hbar}(\rho_- + \rho_+)\right)}.$$

Учитывая I) и 2), выражение (2I) запишем в виде :

$$R = e^{-\frac{4a\pi}{\hbar}\rho_+}\left\{\frac{\left[1+\exp\left(-\frac{2a\pi}{\hbar}(\rho_- + \rho_+)\right)\right]\left[\exp\left(-\frac{2a\pi}{\hbar}(\rho_- - \rho_+)\right)-1\right]}{1-\exp\left(-\frac{4a\pi}{\hbar}(\rho_- + \rho_+)\right)}\right\}^2.$$

Нетрудно установить, что последнее выражение совпадает с известной точной формулой (I8).

В качестве второго "решаемого" потенциала возьмем

$$V(x) = V_0 / ch^2(x/a), \qquad \text{(имеет „горб"),}$$

для которого также известно точное выражение для КНО :

$$R_{горб} = \frac{ch^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}-1}\right)}{sh^2\left(\frac{a\pi}{\hbar}\rho_-\right) + ch^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}-1}\right)}. \qquad (22)$$

В формуле (22) $sh^2(\ldots) > ch^2(\ldots)$, поэтому правую часть разложим по степеням $\left(ch^2(\ldots)/sh^2(\ldots)\right)^K$, тогда

$$R_{горб} = \frac{ch^2(\ldots)}{sh^2(\ldots)} - \frac{ch^4(\ldots)}{sh^4(\ldots)} + \frac{ch^6(\ldots)}{sh^6(\ldots)} - \ldots \qquad (23)$$

Для данного потенциала также $i \equiv j$. Все точки z_i и ξ_i располагаются на линии $Im(z) = 0$, следовательно, знаки $B_i(z_i)$ и $B_i(\xi_i)$ определяются соотношением (I3а,б), т.е. у них знаки должны быть идентичны. Однако, в отличие от случая потенциала Эккарта, функцию $\rho(z)$ нужно привести к квазиклассическому виду. Для этого представим выражение функции $\rho(z)$ в явном виде в окрестности полюса ξ_i :

$$\rho(z) \approx \sqrt{2m\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{S(S+1)}{(z-\xi_i)^2}\right)}$$

(где $S = \frac{1}{2}\left(-1 + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}-1}\right)$, см /2/).

Пользуясь аналогией с квазиклассикой, произведем замену:

$$S(S+1) \to \left(S+\tfrac{1}{2}\right)^2, \quad \text{тогда}$$

$$\rho(z) \approx \sqrt{2m\left(E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\left(S+\frac{1}{2}\right)^2}{(z-\xi_i)^2}\right)}.$$

С учётом этих замечаний возьмем, например, интеграл в пределах от z_0 до ξ_0 :

$$\exp\left[\frac{2i}{\hbar}\int_{z_0}^{\xi_0}\rho(z)dz\right] = \exp\left[-\frac{\pi}{2}\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}-1}\right].$$

Для взятия интеграла в пределах, например, от x_0 до z_0, нужно вновь перейти от переменной z к переменной $\rho(z)$ (последняя считается приведенной к квазиклассическому виду). Тогда интеграл сведется к табличному /5/. Оказывается, что если формулу (I7) записать в явном виде, то она совпадает с первыми членами выражения (23). Это позволяет и в общем случае для всех потенциалов с "горбом"(асимптотики которых - экспоненты) коэффициент надбарьерного отражения искать в виде :

$$R_{горб} = R - R^2 + R^3 - R^4 + \ldots \qquad \text{или}$$

в более компактной форме

$$R_{горб} = R/(1+R), \qquad (24)$$

где R определяется формулой (17). По-видимому, данный метод вычисления коэффициента надбарьерного отражения нетрудно обобщить на случай двух и более потенциальных барьеров.

ВЫВОДЫ

1. Показано, что в рамках этого метода для некоторого класса потенциалов (например, $V(x) = V_0/[1+\exp(-\frac{x}{a})]$ и $V(x) = V_0/ch^2(x/a)$), удается получить точное аналитическое выражение для коэффициента отражения.

2. Предлагаемый метод вычисления коэффициента отражения позволяет в принципе оценить поправочные члены в выражении для R в случае "нерешаемых" потенциалов, для которых функция ($p(z)$) имеет множество нулей $\{z_c\}$ (возможно, и полюсов).

В заключение один из авторов (К.Мусабаев) искренне благодарит В.К. Лукьянова за интерес к работе и полезные замечания при ее обсуждении, а также И. Амирханова, Б.Н.Захарьева, И.Н. Михайлова, С. Ниязгулова, С. Титова и М. Ханхасаева за полезные беседы по данной теме.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.В. Бабиков. Метод фазовых функций в квантовой механике, Наука М., 1968.
2. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963 . стр. 221, 105, 106.
3. В.В. Бабиков. Сообщение ОИЯИ, Р4-4567, Дубна, 1969 .
4. В.В. Бабиков, К.К. Мусабаев. Препринт ОИЯИ, Р4-6330, Дубна, 1972 .
5. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Наука. М., 1971, стр. 83, 85

Рукопись поступила в издательский отдел
25 мая 1973 года.

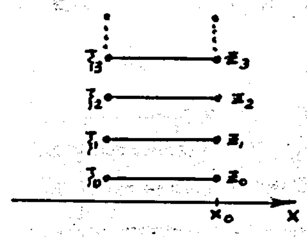

Рис. 1. Расположение особых точек функции $p(z)$ и способ проведения соответствующих разрезов (потенциал Эккарта).

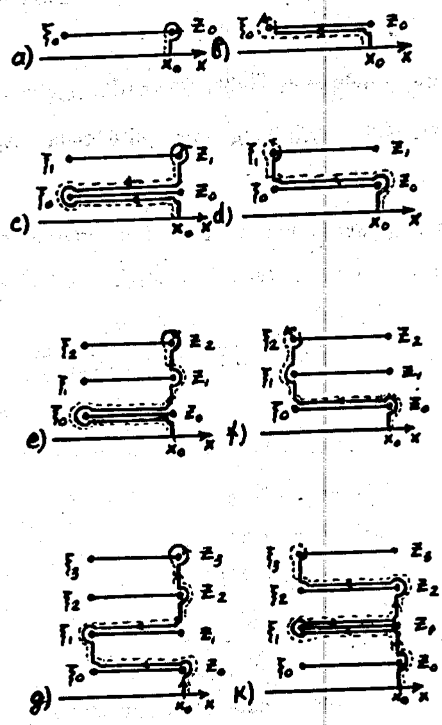

Рис.2,3. Контуры интегрирования для потенциала Эккарта (симметричная часть замкнутых контуров здесь не показана).