сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-80-199

К.К.Мусабаев

ПОЛУЧЕНИЕ МЕТОДОМ ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОГО ФАКТОРА КЕМБЛА

1980

ВВЕДЕНИЕ

Одним из способов нахождения квазиклассических решений уравнения Шредингера является метод комплексной плоскости [1,2]. Суть его в следующем: решения по разные стороны от точек поворота рассматриваются на комплексной плоскости независимого переменного и после обхода точек поворота, по определенным образом выбранным путям, сшиваются с учетом явления Стокса. Однако при этом не сохраняется плотность потока вероятности. Чтобы устранить этот недостаток, было предложено [3] перенормировать амплитуду падающей волны, введя в нее множитель, который находится [3] из условия сохранения тока. В обозначениях [2] этот множитель /фактор Кембла/ имеет следующий вид:

$$h = \{1 + \exp[-2k]\}^{1/2}, \qquad /1/$$

где k - вещественная величина, зависящая от параметров квантовой системы. Этот простой метод уже нашел практическое применение в целом ряде работ /см., например, [4-6] /.

Однако такое, по сути рецептурное, введение фактора Кембла еще не имеет строгого обоснования [7,8]. Последнее представляется возможным сделать в рамках метода фазовых функций /МФФ/.

В предлагаемой работе методом ФФ рассматривается квазиклассическая одномерная $(-\infty, +\infty)$ задача надбарьерного отражения. При этом получена система зацепляющихся дифференциальных уравнений первого порядка, которые обладают решениями в виде абсолютно и равномерно сходящихся рядов. Показано, что ограничение первым членом в этих рядах в конечном итоге приводит к фактору Кембла. Учет второго члена дает поправку к последнему, которая может оказаться существенной в задачах с точками поворота более двух.

1. ОДНОМЕРНЫЕ ФАЗОВЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ РЕШЕНИЯ

Пусть частица падает на одномерный $(-\infty, +\infty)$ потенциальный барьер $V(x)$, двигаясь слева направо вдоль оси x, и описывается уравнением Шредингера типа [9]

$$d^2\psi(x)/dx^2 + \frac{1}{\hbar^2} p^2(x)\psi(x) = 0, \qquad /2/$$

где $p(x) = [2m(E - \max V(x))]^{1/2}$ - классический локальный импульс частицы, $\hbar$ - постоянная Планка, деленная на 2π. $\psi(x)$ - волновая функция системы.

Относительно функции $V(x)$ предполагается, что всюду на оси x она меньше энергии частицы E и является достаточно гладкой /ниже это уточняется/.

Для дальнейшего целесообразно перейти к новым безразмерным переменным, положив / y_0 - произвольная точка на вещественной оси y /

$$u = \beta^{-1}\int_{y_0}^{y} q(y_1)\,dy_1 \,;\ \Phi(u) = \sqrt{q(y)}\,\psi(y)\,, \qquad /3/$$

где

$$y = x/a;\ q(y) = p(x)/p_c\,. \qquad /4/$$

Здесь a, p_c - параметры размерности длины, импульса соответственно*. Безразмерный параметр имеет вид

$$\beta = \hbar/a \cdot p_c\,. \qquad /5/$$

Его удобно интерпретировать как эффективную константу взаимодействия, определив следующим образом:

$$\beta = \hbar/a[2m(E - \max V(x))]^{1/2}\,. \qquad /6/$$

При этом условие применимости квазиклассического приближения выступает как малость эффективной константы взаимодействия:

$$\beta \ll 1\,. \qquad /7/$$

В терминах новых переменных /3/ уравнение /2/ записывается в виде

$$\frac{d^2}{du^2}\Phi(u) + [1 - Q(u)]\Phi(u) = 0\,, \qquad /8/$$

где

$$Q(u) = \beta^2[2q''(y)\,q(y) - 3(q'(y))^2]/4q^4(y) \qquad /9/$$

содержит эффективную константу взаимодействия β и поэтому играет роль потенциала в преобразованном уравнении Шредингера[8]. Напомним, что это уравнение в работе[10] рассматривается в некоторой области комплексного переменного u. Это оказывается[10] удобным для получения основного члена в квазиклассическом разложении коэффициента надбарьерного отражения. Однако получение поправочных членов, как отмечается в[10], представляет большие практические трудности.

Мы будем рассматривать уравнение /8/ на вещественной оси u. Переход в комплексную плоскость будем совершать только при получении окончательных результатов. Такой подход позволяет избежать трудностей, встречающихся в[10].

1. Решение уравнения /8/ представим в виде, широко используемом в методе фазовых функций:

$$\Phi(u) = L^{-1/2}(u)\,[\,A(u)\cdot\exp(i\cdot\phi(u)) + C(u)\cdot\exp(-i\phi(u))]\,, \qquad /10/$$

где $A(u)$, $C(u)$ - локальные амплитуды падающей и отраженной волн соответственно;

$$L(u) = [1 - Q(u)]^{1/2}\ ;\ \phi(u) = \int_{u_0}^{u} L(u_1)\cdot du_1\,. \qquad /11/$$

При этом коэффициенты отражения и прохождения определяются как

$$R = |C(-\infty)/A(-\infty)|^2\ ;\ D = |A(-\infty)|^{-2}\,. \qquad /12/$$

2. Чтобы для величин $A(u)$, $C(u)$ получить дифференциальные уравнения первого порядка, следует на них наложить некоторое дополнительное условие. Выберем его в следующем виде:

$$A'(u)\cdot e^{i\phi} + C'(u)\cdot e^{-i\phi} - \frac{L'(u)}{2L(u)}[A(u)\cdot e^{i\phi} + C(u)\cdot e^{-i\phi}] = 0\,. \qquad /13/$$

Для производной волновой функции соответственно имеем:

$$\Phi'(u) = iL^{1/2}(u)\,[A(u)\cdot e^{i\phi} - C(u)\cdot e^{-i\phi}]\,. \qquad /14/$$

3. Подставляя теперь в уравнение /8/ соотношения /10/, /14/, с учетом /13/ получим искомую систему двух зацепленных дифференциальных уравнений первого порядка, которые в терминах независимой безразмерной переменной y /4/ выглядят следующим образом:

$$\tilde{A}'(y;\beta) = \beta^2\cdot\sigma(y)\cdot\tilde{C}(y)\cdot\exp[-2i\beta^{-1}\int_{y_0}^{y} q(y_1)L(y_1)\cdot dy_1];\ \tilde{A}(+\infty) = 1\,, \qquad /15/$$

$$\tilde{C}'(y;\beta) = \beta^2\cdot\sigma(y)\cdot\tilde{A}(y)\cdot\exp[2i\beta^{-1}\int_{y_0}^{y} q(y_1)L(y_1)\cdot dy_1];\ \tilde{C}(+\infty) = 0\,. \qquad /16/$$

Эта система уравнений эквивалентна нелинейному уравнению типа Рикатти:

---

*Параметр a представляет собой характерный масштаб существенного изменения потенциала взаимодействия.

$$\tilde{B}'(y;\beta)=\beta^2\cdot\sigma(y)\{\exp[2i\beta^{-1}\int_{y_0}^{y} q(y_1)L(y_1)dy_1] - \tilde{B}^2(y)\cdot\exp[-2i\beta^{-1}\int_{y_0}^{y} q_1 L_1 dy_1]\}, \qquad /17/$$

где

$$\tilde{B}(y;\beta)=\tilde{C}(y;\beta)/\tilde{A}(y;\beta);\ \tilde{B}(+\infty)=0. \qquad /18/$$

В уравнениях /15-16/ величины $\tilde{A}(u)$, $\tilde{C}(u)$ связаны с прежними /см., например, /10// как

$$\tilde{A}(y;\beta)=A(u);\ \tilde{C}(y;\beta)=C(u). \qquad /19/$$

Общий для всех трех уравнений /15/-/17/ множитель, стоящий в их правых частях, имеет вид

$$\beta^2\cdot\sigma(y)=\beta^2[3(q'(y))^2-2q''(y)\,q(y)]/16q^4(y)\,L^2(y). \qquad /20/$$

Заметим, что эта величина в силу /5/ имеет порядок параметра β^2. Для выполнения условия применимости квазиклассического приближения /7/ необходимо потребовать существования конечной производной $q'''(y)$, что эквивалентно существованию производной третьего порядка от потенциала $V'''(y)$. Это условие на гладкость потенциала является более жестким, чем в ВКБ-методе [1,2].

Итак, для уравнений /15/-/17/ условие применимости квазиклассического приближения означает малость общего множителя $\beta^2|\sigma|$ в их правых частях. Подобное свойство коэффициента этих уравнений позволяет простым образом получить решения для соответствующей классической задачи. Действительно, переход к классической механике в данном случае соответствует предельному переходу по β в обеих частях /15/-/17/. При этом можно убедиться, что пределы существуют и равны нулю:

$$\{\lim_{\beta\to 0}\tilde{A}'(y;\beta)=0;\ \tilde{A}(+\infty)=1\} \Rightarrow \tilde{A}_{кл}(y)\equiv 1; \qquad /21/$$

$$\{\lim_{\beta\to 0}\tilde{C}'(y;\beta)=0;\ \tilde{C}(+\infty)=0\} \Rightarrow \tilde{C}_{кл}(y)\equiv 0; \qquad /22/$$

$$\{\lim_{\beta\to 0}\tilde{B}'(y;\beta)=0;\ \tilde{B}(+\infty)=0\} \Rightarrow \tilde{B}_{кл}(y)\equiv 0. \qquad /23/$$

Отсюда видно, что в классическом случае, как и должно быть [8], надбарьерное отражение отсутствует.

Следующий шаг состоит в нахождении квантовых поправок к классическим решениям /21/-/23/. Для этого уравнения /15/-/16/ будем решать методом последовательных приближений. Предварительно проинтегрируем обе части этих уравнений:

$$\tilde{A}(y)=\tilde{A}_{кл}(y)+\int_{\infty}^{y}\omega_-(y_1)\tilde{C}(y_1)\cdot dy_1;\quad \tilde{A}_{кл}(y)\equiv 1, \qquad /24/$$

$$\tilde{C}(y)=\tilde{C}_{кл}(y)+\int_{\infty}^{y}\omega_+(y_1)\tilde{A}(y_1)\cdot dy_1;\quad \tilde{C}_{кл}(y)\equiv 0, \qquad /25/$$

где

$$\omega\ (y)=\beta^2\cdot\sigma(y)\cdot\exp[\ 2i\beta^{-1}\int_{y_0}^{y}q(y_1)L(y_1)\cdot dy_1]. \qquad /26/$$

В соотношениях /24/-/25/ интегралы описывают вклад квантового эффекта. Далее, последовательно итерируя, имеем

$$\tilde{A}(y)=\sum_0^\infty\tilde{A}_n(y);\quad \tilde{C}(y)=\sum_0^\infty\tilde{C}_n(y). \qquad /27/$$

Здесь

$$\tilde{A}_0=\tilde{A}_{кл}=1;\quad \tilde{C}_0=\tilde{C}_{кл}=0;$$

$$\tilde{A}_n(y)=\int_{\infty}^{y}\omega_-(y_1)\tilde{C}_n(y_1)dy_1;\quad \tilde{C}_n(y)=\int_{\infty}^{y}\omega_+(y_1)\tilde{A}_{n-1}(y_1)dy_1;\ n\geq 1. \qquad /28/$$

И, наконец, рассмотрим вопрос о сходимости рядов /27/. Заметим, во-первых, что непрерывность подынтегральных функций в соотношениях /28/ всюду на вещественной оси y приводит к непрерывности функций $\tilde{A}_n(y)$, $\tilde{C}_n(y)$. Во-вторых, величины A_0, $|\tilde{C}_1|$ и $|\omega(y)|$ являются конечными. Эти два обстоятельства позволяют записать следующие неравенства:

$$|\tilde{A}_n(y)|\leq\int_{\infty}^{y}|\omega_-(y_1)dy_1|\int_{\infty}^{y_1}|\omega_+(y_2)dy_2|\cdots\int_{\infty}^{y_{2n-1}}|\omega_+(y_{2n})\,dy_{2n}|;\quad n\geq 1. \qquad /29/$$

$$|\tilde{C}_n(y)|\leq\int_{\infty}^{y}|\omega_+(y_1)dy_1|\int_{\infty}^{y_1}|\omega_-(y_2)dy_2|\cdots\int_{\infty}^{y_{2n-2}}|\omega_+(y_{2n-1})\,dy_{2n-1}|;\ n\geq 1. \qquad /30/$$

Далее, производя в них последовательное интегрирование, получим следующие оценки:

$$|A_n(y)|\leq\frac{1}{(2n)!}[\int_{\infty}^{y}|\omega(y_1)dy_1|]^{2n};\quad |C_n(y)|\leq\frac{1}{(2n-1)!}[\int_{\infty}^{y}|\omega(y_1)dy_1|]^{2n-1}, \qquad /31/$$

которые справедливы во всем интервале $(-\infty,+\infty)$.

Таким образом, можем заключить, что вследствие ограниченности функции $|\omega(y)|$ всюду на оси y ряды /27/ будут сходиться абсолютно и равномерно, причем быстрота сходимости будет зависеть, конечно, от степени малости $|\omega(y)|$ $(=\beta^2|\sigma(y)|)$.

Для рассматриваемого случая последняя много меньше единицы, и поэтому ряды должны сходиться достаточно быстро, что позволяет ограничиться учетом их первых нескольких членов.

2. ФАКТОР КЕМБЛА

Для удобства еще раз выпишем формулы для коэффициентов надбарьерного отражения и прохождения /12/:

$$R = |\tilde{C}(-\infty)/\tilde{A}(-\infty)|^2 \ ; \ D = |\tilde{A}(-\infty)|^{-2} . \qquad /32/$$

Отсюда для нулевого приближения с учетом /28/ имеем:

$$R^{(0)} = |C_0/A_0|^2 = 0; \ D^{(0)} = |A_0|^{-2} = 1; \ R^{(0)} + D^{(0)} = 1 , \qquad /33/$$

где последнее соотношение описывает сохранение тока.

Найдем теперь следующее приближение. Для этого из /27-28/, получая соотношения для $C^{(1)}$ и $A^{(1)}$ и затем подставляя их в /32/ с последующим взятием квадрата модуля, придем к следующим соотношениям:

$$R^{(1)} = \beta^4 \left| \int_{\infty}^{-\infty} \omega_+(y)\, dy \right|^2 / \left(1 + \beta^4 \left| \int_{\infty}^{-\infty} \omega_+(y)\, dy \right|\right)^2 ; \qquad /34/$$

$$D^{(1)} = \left[1 + \beta^4 \left| \int_{\infty}^{-\infty} \omega_+(y)\, dy \right|^2 \right]^{-1} . \qquad /35/$$

Для того, чтобы эти соотношения удовлетворяли закону сохранения тока, член с β^8 был в них опущен.

Запишем интеграл, возникающий в /34-35/,с учетом /26/, /20/ в явном виде:

$$\beta^2 \int_{\infty}^{-\infty} \frac{[3(q'(y))^2 q^{-4}(y) - 2q''(y) q^{-3}(y)]'}{16L^2(y)} \exp[2i\beta^{-1} \int_{y_0}^{y} q_1 L_1 dy_1]. \qquad /36/$$

Для случая надбарьерного отражения и одной точки поворота он был вычислен в /11/. В наших обозначениях /36/ принимает вид

$$|\beta^2 \int_{\infty}^{-\infty} \ldots dy|^2 = \exp[-2\beta^{-1} \operatorname{Im} \int_{z_0}^{z_0} q(z)\, dz], \qquad /37/$$

где $q(z_0)$ - комплексно-сопряженные корни уравнения, причем показатель экспоненты равен величине $-2k$ в соотношении Кембла /1/. И наконец, подставляя /37/ в /34/-/35/,

$$R^{(1)} = \frac{\exp(-2k)}{1 + \exp(-2k)} ; \quad D^{(1)} = [1 + \exp(-2k)]^{-1} . \qquad /38/$$

приходим к известным /1,2/ формулам, в которых знаменатели представляют квадрат фактора Кембла /1/.

Для перехода к подбарьерному прохождению линейный интеграл в /37/ следует представить в виде интеграла по замкнутому контуру, охватывающего берега разреза между точками поворота /в надбарьерном случае это комплексно-сопряженные точки; в подбарьерном прохождении - это две действительные точки поворота/.

Итак, метод фазовых функций в отличие от метода комплексной плоскости позволяет получить фактор Кембла более последовательным образом.

Представляет интерес уточнить фактор Кембла. Во-первых, если есть конкурирующие точки поворота /например, в задаче подбарьерного прохождения через потенциальный барьер типа $V_0 \operatorname{ch}^{-2} y$ наряду с двумя действительными точками поворота существует бесконечное множество комплексно-сопряженных/, то уточнение возможно уже в рамках первого приближения/ это вклад в вычет интеграла /36/ конкурирующих точек/. В общем случае уточнение связано с нахождением второго приближения:

$$R^{(2)} \approx \frac{|C_1|^2 + C_1 C_2^* + C_1^* C_2}{1 + |C_1|^2 + |A_1|^2 + A_2 + A_2^*} ; \ D^{(2)} \approx [1 + |C_1|^2 + |A_1|^2 + A_2 + A_2]^{-1} . \qquad /39/$$

Здесь

$$C_1 C_2 = \int_{\infty}^{-\infty} \omega_+(y)\, dy \int_{\infty}^{-\infty} \omega_-(y_1) \int_{\infty}^{y} \omega_+(y_2) \int_{\infty}^{y_1} \omega_-(y_2)\, dy\, dy_1\, dy_2 ; \qquad /40/$$

$$|A_1|^2 = \left| \int_{\infty}^{-\infty} \omega_-(y) \int_{\infty}^{y} \omega_+(y_1) \right|^2 ; \ A_2 = \int_{\infty}^{-\infty} \omega_- \int_{\infty}^{y} \omega_+ \int_{\infty}^{y_1} \omega_- \int_{\infty}^{y_2} \omega_+\, dy\, dy_1 dy_2 dy_3 . \qquad /41/$$

Взять эти многократные интегралы для произвольного вида потенциала не представляется возможным.Однако если учесть,что они описывают вклад многократно отраженных взаимодействующих между собой волн и что это взаимодействие в квазиклассическом случае пренебрежимо мало, то верхние пределы всех интегралов можно будет положить равными верхнему пределу первого интеграла. При этом будем иметь

$$R^{(2)} \approx \frac{|C_1|^2 + 2|C_1|^4}{1 + |C_1|^2 + 2|C_1|^4} ; \quad D^{(2)} \approx [1 + |C_1|^2 + 2|C_1|^4]^{-1} . \qquad /42/$$

При получении /42/ было учтено, что при переходе к бесконечным пределам интегрирования в /41/

$$A_2 + A_2^* = |A_1|^2 = |C_1|^4 ,$$

где $|C_1|^2$ дается формулой /37/. Следовательно, для фактора Кембла в рассматриваемом приближении получаем выражение вида

$$h = [1 + \exp(-2k) + \exp(-4k)]^{1/2} .$$

Такое уточненное выражение для фактора Кембла может оказаться существенным в задачах о надбарьерном отражении частиц, когда имеется две точки поворота.

Пользуясь случаем, хочу выразить свою искреннюю благодарность В.К.Лукьянову, Л.И.Пономареву и М.Х.Ханхасаеву за обсуждение и полезные советы, а также за доброжелательную поддержку в вопросах, касающихся моей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов /метод ВКБ/. "Мир", М., 1965.
2. Пономарев Л.И. Лекции по квазиклассике. ИТФ-67-53, Киев, 1968.
3. Kemble E.C. Phys.Rev., 1935, 48, p.549.
4. Livingston P.M. J.Chem.Phys., 1966, v.45, No.2.
5. Мастеров В.С., Серегин А.А. Препринт ФЭИ-749, Обнинск, 1977.
6. Мастеров В.С., Серегин А.А. ЯФ, 1978, т.28, вып.5/11/.
7. Фреман Н., Фреман П.У. ВКБ-приближение. "Мир", М., 1967.
8. Колкунов В.А., Мельников В.Н. ЯФ, 1973, т.17, вып.4, с.866.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Физматгиз, 1974
10. Бабиков В.В. ОИЯИ, Р4-4567, Дубна, 1969.
11. Соколов С.Н. ОИЯИ, Д-690, Дубна, 1961.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 марта 1980 года.