Из (3) и (4) находим искомый коэффициент прохождения

$$D = |B|^2 = \frac{1}{1 + e^{-2\pi\varepsilon}}.$$

Эта формула справедлива при любых E. Если энергия отрицательна и велика по абсолютной величине, получаем $D \approx e^{-2\pi|\varepsilon|}$ в согласии с формулой (50,5). При $E > 0$ величина

$$R = 1 - D = \frac{1}{1 + e^{2\pi\varepsilon}}$$

есть коэффициент надбарьерного отражения.

§ 51. Вычисление квазиклассических матричных элементов

Непосредственное вычисление матричных элементов какой-либо физической величины f с помощью квазиклассических волновых функций представляет большие трудности. Мы предполагаем, что энергии состояний, для перехода между которыми вычисляется матричный элемент, не близки друг к другу, так что последний не сводится к компоненте Фурье от величины f (§ 48). Трудности связаны с тем, что в силу экспоненциального (с большой мнимой экспонентой) характера волновых функций, подынтегральное выражение оказывается быстро осциллирующей величиной.

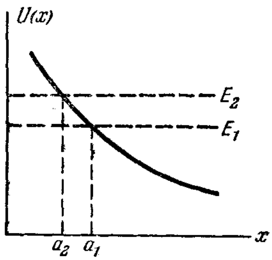

Рис. 17

Будем рассматривать одномерный случай (движение в поле $U(x)$) и предположим для простоты, что оператор физической величины f есть просто функция координаты x. Пусть ψ_1 и ψ_2 — волновые функции, соответствующие некоторым значениям E_1 и E_2 энергии частицы (причем $E_2 > E_1$, рис. 17); будем считать, что ψ_1, ψ_2 выбраны вещественными. Мы должны вычислить интеграл

$$f_{12} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 f \psi_2 \, dx. \tag{51,1}$$

Согласно (47,5) волновая функция ψ_1 в областях по обе стороны от точки поворота $x = a_1$ (в достаточном удалении от нее) имеет вид

$$\begin{aligned} &\text{при } x < a_1: \ \psi_1 = \frac{C_1}{2\sqrt{|p_1|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a_1}^{x} p_1\,dx\right|\right), \\ &\text{при } x > a_1: \ \psi_1 = \frac{C_1}{\sqrt{p_1}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{x} p_1\,dx - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \tag{51,2}$$

и аналогично для ψ_2 (с заменой индекса 1 индексом 2).

Однако вычисление интеграла (51,1) путем подстановки в него этих асимптотических выражений для волновых функций дало бы неправильный результат. Дело в том, что, как мы увидим ниже, этот интеграл является экспоненциально малой величиной, между тем как подынтегральная функция сама по себе не мала. Поэтому уже относительно малое изменение последней изменяет, вообще говоря, порядок величины интеграла. Эта трудность может быть обойдена следующим образом.

Функцию ψ_2 представим в виде суммы $\psi_2 = \psi_2^+ + \psi_2^-$, разложив косинус (в области $x > a_2$) на сумму двух экспоненциальных выражений. Согласно (50,2) будем иметь

$$\begin{aligned} &\text{при} \quad x < a_2: \quad \psi_2^+ = \frac{-iC_2}{2\sqrt{|p_2|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\left|\int_{a_2}^{x} p_2\,dx\right|\right), \\ &\text{при} \quad x > a_2: \quad \psi_2^+ = \frac{C_2}{2\sqrt{p_2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{a_2}^{x} p_2\,dx - \frac{i\pi}{4}\right); \end{aligned} \tag{51,3}$$

функция ψ_2^- комплексно сопряжена с ψ_2^+ $[\psi_2^- = (\psi_2^+)^*]$.

Интеграл (51,1) тоже разобьется на сумму двух комплексно сопряженных интегралов, $f_{12} = f_{12}^+ + f_{12}^-$, вычислением которых мы и займемся. Предварительно заметим, что интеграл

$$f_{12}^+ = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 f \psi_2^+\,dx$$

сходится. Действительно, хотя функция ψ_2^+ в области $x < a_2$ экспоненциально возрастает, но зато функция ψ_1 в области $x < a_1$ еще быстрее экспоненциально убывает (поскольку везде в области $x < a_2$ имеем $|p_1| > |p_2|$).

Будем рассматривать координату x как комплексную переменную и сместим путь интегрирования с вещественной оси в верхнюю полуплоскость. Когда x получает положительное мнимое приращение, в функции ψ_1 (в области $x > a_1$) появляется возрастающий член, но зато функция ψ_2^+ убывает быстрее, так как везде в области $x > a_1$ имеем $p_2 > p_1$. Поэтому подынтегральное выражение убывает.

Смещенный путь интегрирования не проходит уже через точки $x = a_1$, a_2 на вещественной оси, вблизи которых квазиклассическое приближение неприменимо. Поэтому на всем пути можно пользоваться для ψ_1 и ψ_2^+ функциями, являющимися их асимптотическими выражениями в верхней полуплоскости. Это будут функции

$$\psi_1 = \frac{C_1}{2\,[2m(U-E_1)]^{1/4}} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_1}^{x} \sqrt{2m(U-E_1)}\,dx\right),$$

$$\psi_2^{+} = \frac{-iC_2}{2\,[2m(U-E_2)]^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_2}^{x} \sqrt{2m(U-E_2)}\,dx\right), \tag{51,4}$$

где корни определяются так, что на вещественной оси в области $x < a$ они положительны.

В интеграле

$$f_{12}^{+} = \frac{-iC_1C_2}{4\sqrt{2m}} \int \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_1}^{x} \sqrt{2m(U-E_1)}\,dx - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{\hbar}\int\limits_{a_2}^{x} \sqrt{2m(U-E_2)}\,dx\right) \frac{f(x)\,dx}{[(U-E_1)(U-E_2)]^{1/4}} \tag{51,5}$$

поставим себе целью сместить путь интегрирования таким образом, чтобы, по возможности, уменьшить экспоненциальный множитель. Экспонента имеет экстремум лишь в точках, где $U(x) = \infty$ (при $E_1 \neq E_2$ ее производная по x не обращается в нуль ни в каких других точках). Поэтому смещение контура интегрирования в верхнюю полуплоскость ограничивается лишь необходимостью обходить особые точки функции $U(x)$; согласно общей теории линейных дифференциальных уравнений они совпадают с особыми точками волновых функций $\psi(x)$. Конкретный выбор контура зависит от конкретного вида поля $U(x)$. Так, если функция $U(x)$ имеет в верхней полуплоскости всего одну особую точку $x = x_0$, то интегрирование можно производить по пути изображенного на рис. 18 типа. Главную роль в интеграле играет непосредственная окрестность особой точки, так что искомый матричный элемент $f_{12} = 2\operatorname{Re} f_{12}^{+}$ в основном пропорционален экспоненциально малому выражению, которое можно представить в виде

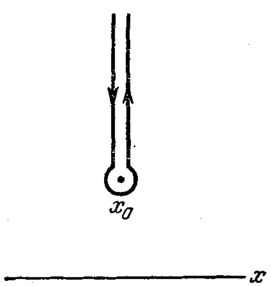

Рис. 18

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\operatorname{Im}\left[\int^{x_0} \sqrt{2m(E_2-U)}\,dx - \int^{x_0} \sqrt{2m(E_1-U)}\,dx\right]\right) \tag{51,6}$$

(*Л. Д. Ландау*, 1932)[1]). В качестве нижних пределов интегралов можно выбрать любые точки в классически доступных областях; конкретный их выбор не влияет, очевидно, на мнимую часть интегралов. Если функция $U(x)$ имеет несколько особых точек в верхней полуплоскости, то в качестве x_0 в (51,6) надо выбрать ту, для которой экспонента имеет наименьшее по абсолютной величине значение[2]).

Формула (51,6) упрощается в случае, когда энергии E_1 и E_2 близки, так что матричный элемент сводится, согласно результатам § 48, к компоненте Фурье по времени классической величины $f[x(t)]$. Полагая $E_{2,1} = E \pm \frac{\hbar\omega_{21}}{2}$ и разлагая по $\hbar\omega_{21}$, получаем

$$f_{12} \sim \exp\left(-\omega_{21}\,\mathrm{Im}\int^{x_0}\sqrt{\frac{m}{2(E-U)}}\,dx\right) = \exp(-\omega_{21}\,\mathrm{Im}\,\tau). \tag{51,6a}$$

Величину

$$\tau = \int^{x_0}\sqrt{\frac{m}{2(E-U)}}\,dx = \int^{x_0}\frac{dx}{v(x)}$$

можно рассматривать как *комплексное время*, за которое частица достигает точки x_0 в комплексной плоскости x. (Величина же $v(x) = \sqrt{\frac{2(E-U(x))}{m}}$ есть соответствующая «комплексная скорость».) Легко убедиться в том, что (51,6a) действительно дает приближенное выражение для компоненты Фурье $f[x(t)]$ при условии $\omega_{21}\,\mathrm{Im}\,\tau \gg 1$.

Вычисление квазиклассических матричных элементов для движения в центрально-симметричном поле производится тем же способом. Однако под $U(r)$ надо теперь понимать эффективную потенциальную энергию (сумма потенциальной и центробежной энергий), и для состояний с различными значениями l она будет различной. Имея в виду дальнейшие применения излагаемого метода, будем писать эффективные потенциальные энергии в двух состояниях в общем виде, как некоторые $U_1(r)$ и $U_2(r)$. Тогда показатель экспоненциального множителя в подынтегральном

---

[1]) Произведенная при выводе (51,5)—(51,6) замена волновых функций их асимптотическими выражениями законна, поскольку порядок величины интеграла, взятого по изображенному на рис. 18 контуру, определяется порядком величины подынтегрального выражения, и потому относительно малое изменение последнего не имеет существенного влияния на значение интеграла.

[2]) Мы предполагаем, что сама величина $f(x)$ особых точек не имеет.

Отметим также, что оценка (51,6) для матричного элемента предполагает «нормальный» порядок величины предэкспоненциального множителя. Возможна, конечно, ситуация, когда этот множитель аномально мал в силу специфики задачи. Простейшим примером является $f(x) = \mathrm{const}$. В этом случае матричный элемент равен нулю из-за ортогональности волновых функций, что не видно из выражения (51,6).

выражении в (51,5) будет иметь экстремум не только в точках, где $U_1(r)$ или $U_2(r)$ обращаются в бесконечность, но еще и в точках, где

$$U_2(r) - U_1(r) = E_2 - E_1. \tag{51,7}$$

Поэтому в формуле

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\operatorname{Im}\left[\int^{r_0}\sqrt{2m(E_2-U_2)}\,dr - \int^{r_0}\sqrt{2m(E_1-U_1)}\,dr\right]\right) \tag{51,8}$$

среди конкурирующих значений r_0 надо иметь в виду не только особые точки $U_1(r)$ и $U_2(r)$, но и корни уравнения (51,7).

Центрально-симметричный случай отличается еще и тем, что интегрирование по dr в (51,1) производится в пределах от 0 (а не от $-\infty$) до $+\infty$:

$$f_{12} = \int_0^\infty \chi_1 f \chi_2\,dr.$$

В этом отношении надо различать два случая. Если подынтегральное выражение есть четная функция от r, то интегрирование можно формально распространить на всю область от $-\infty$ до $+\infty$, так что никаких отличий от предыдущего не возникает. Этот случай может иметь место, если $U_1(r)$ и $U_2(r)$ — четные функции r $[U(-r) = U(r)]$. Тогда волновые функции $\chi_1(r)$ и $\chi_2(r)$ — либо четные, либо нечетные функции (см. § 21)[1], и если функция $f(r)$ тоже четна или нечетна, то произведение $\chi_1 f \chi_2$ может оказаться четным.

Если же подынтегральное выражение не является четным (что во всяком случае имеет место, если $U(r)$ не является четной), то начало пути интегрирования не может быть сдвинуто из точки $r = 0$, и в число конкурирующих в (51,8) значений r_0 надо включить также и значение $r_0 = 0$.

Задачи

1. Вычислить квазиклассические матричные элементы (ограничиваясь экспоненциальным множителем) в поле $U = U_0 e^{-\alpha x}$.

Решение. $U(x)$ обращается в бесконечность только при $x \to -\infty$. Соответственно этому, полагаем в (51,6) $x_0 = -\infty$. Интегрирование можно распространить до $+\infty$. Каждый из двух интегралов в отдельности расходится на

[1] При четном $U(r)$ радиальная волновая функция $R(r)$ четна (нечетна) при четном (нечетном) l, как это видно из ее поведения при малых r (где $R \sim r^l$).

пределе $-\infty$. Поэтому вычисляем их сначала в пределах от $-x$ до $+\infty$ и затем переходим к пределу $x \to \infty$. В результате получим

$$f_{12} \sim \exp\left[-\frac{\pi m}{\alpha\hbar}(v_2 - v_1)\right],$$

где $v_1 = \sqrt{2E_1/m}$, $v_2 = \sqrt{2E_2/m}$ — скорости частицы на бесконечности ($x \to \infty$), где движение является свободным.

2. То же в кулоновом поле $U = \frac{\alpha}{r}$ для переходов между состояниями с $l = 0$.

Решение. Единственной особой точкой функции $U(r)$ является точка $r = 0$. Соответствующий интеграл вычислен в задаче 2 § 50. В результате получаем по формуле (51,8)

$$f_{12} \sim \exp\left[\frac{\pi\alpha}{\hbar}\left(\frac{1}{v_2} - \frac{1}{v_1}\right)\right].$$

3. То же для ангармонического осциллятора с потенциальной энергией

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \beta x^4$$

при условии

$$\hbar\omega \ll E_1,\ E_2 \ll \frac{m^2\omega^4}{\beta}. \tag{1}$$

Решение. Обобщение рассуждений в тексте на случай финитного движения показывает, что формула (51,6) по-прежнему справедлива. В качестве x_0 следует выбрать точки $x \to \pm\infty$, причем обе дают вклад одного порядка. Имеем

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\left[\int_{a_2}^{-\infty}\sqrt{2m(U - E_2)}\,dx - \int_{a_1}^{-\infty}\sqrt{2m(U - E_1)}\,dx\right]\right).$$

При условии (1) главный вклад дает область

$$\sqrt{\frac{E_1}{m\omega^2}},\ \sqrt{\frac{E_2}{m\omega^2}} \ll |x| \ll \sqrt{\frac{m\omega^2}{\beta}}, \tag{2}$$

в которой

$$\frac{m\omega^2}{2}x^2 \gg E_1,\ E_2,\ \beta x^4.$$

Разлагая показатель экспоненты по степеням $(E_{1,2}/U)$ (причем члены нулевого порядка сокращаются) и пренебрегая βx^4, имеем:

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{E_2}{\hbar\omega}\int\frac{d|x|}{|x|} + \frac{E_1}{\hbar\omega}\int\frac{d|x|}{|x|}\right).$$

Логарифмически расходящиеся интегралы следует обрезать на границах области (2), т. е. при $x \sim \sqrt{\frac{m\omega^2}{\beta}}$ сверху и $x \sim a_2 \sim \sqrt{\frac{E_2}{m\omega^2}}$, $x \sim a_1 \sim \sqrt{\frac{E_1}{m\omega^2}}$ снизу. В результате

$$f_{12} \sim \exp\left(-\frac{E_2}{2\hbar\omega}\ln\frac{m^2\omega^4}{\beta E_2} + \frac{E_1}{2\hbar\omega}\ln\frac{m^2\omega^4}{\beta E_1}\right).$$

Вводя номера состояний

$$n_1 \approx (E_1/\hbar\omega), \quad n_2 \approx (E_2/\hbar\omega),$$

запишем ответ в виде

$$f_{12} \sim \frac{n_2^{n_2/2}}{n_1^{n_1/2}} \left(\frac{\beta\hbar}{m\omega^3}\right)^{\frac{n_2-n_1}{2}}.$$

Поскольку в решении существенны большие значения x, ответ справедлив для $f(x)$ не слишком быстро растущей на бесконечности. Если $f(x)$ представляет собой полином, то его степень должна быть мала по сравнению с $(n_2 - n_1)$.

§ 52. Вероятность перехода в квазиклассическом случае

Прохождение через потенциальный барьер является примером процесса, который в классической механике вообще невозможен. В квазиклассическом случае вероятность таких процессов экспоненциально мала. Соответствующий показатель экспоненты может быть определен следующим образом.

Рассматривая переход какой-либо системы из одного состояния в другое, решаем соответствующие классические уравнения движения и находим «траекторию» перехода, оказывающуюся, однако, комплексной в соответствии с неосуществимостью процесса в классической механике. В частности, оказывается, вообще говоря, комплексной «точка перехода» q_0, в которой имеет место формальный переход системы из одного состояния в другое; положение этой точки определяется классическими законами сохранения. Далее, вычисляем действие $S_1(q_1, q_0) + S_2(q_0, q_2)$ для движения системы в первом состоянии от некоторого исходного положения q_1 до «точки перехода» q_0 и затем во втором состоянии от q_0 до окончательного положения q_2. Искомая вероятность процесса определится тогда формулой

$$w \sim \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\operatorname{Im}\left[S_1(q_1, q_0) + S_2(q_0, q_2)\right]\right\}. \tag{52,1}$$

Если положение «точки перехода» неоднозначно, должно быть выбрано то из них, для которого показатель в (52,1) имеет наименьшее по абсолютной величине значение (в то же время, разумеется, это значение должно быть достаточно велико для того, чтобы формула (52,1) была вообще применима)[1].

Формула (52,1) находится в соответствии с полученным в предыдущем параграфе правилом вычисления квазиклассических

[1]) Если потенциальная энергия системы сама имеет особые точки, то эти точки тоже должны входить в число конкурирующих значений q_0.