потока и на δ-функцию импульса, деленного на $2\pi\hbar$. При этом $d\nu = dp'/2\pi\hbar$, где p' — импульс после отражения. Произведя в (43,1) интегрирование по dp' (с учетом наличия δ-функции), получим

$$R = \frac{m^2}{\hbar^2 p^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} U(x)e^{2ipx/\hbar}dx\right|^2. \quad (1)$$

Эта формула справедлива, если выполняется условие применимости теории возмущений: $Ua/\hbar v \ll 1$, где a — ширина барьера (см. примечание на стр. 199), и в то же время $pa/\hbar \lesssim 1$. Последнее условие обеспечивает неэкспоненциальный характер зависимости $R(p)$; в противном случае вопрос о применимости формулы (1) требует дальнейшего исследования.

3. Определить коэффициент надбарьерного отражения от квазиклассического барьера в случае, когда функция $U(x)$ при $x = x_0$ имеет излом.

Решение. Если функция $U(x)$ имеет какую-либо особенность при вещественном x, коэффициент отражения определяется в основном полем вблизи этой точки и для его вычисления можно формально применить теорию возмущений, не требуя при этом соблюдения условия ее применимости при всех x; достаточно выполнения условия квазиклассичности. Мы приходим тогда к формуле (1) задачи 2 с той лишь разницей, что вместо импульса падающей частицы в ней должно стоять значение функции $p(x)$ при $x = x_0$.

Выбирая в данном случае точку излома в качестве точки $x = 0$, имеем вблизи нее:

$$U = -F_1 x \quad \text{при } x > 0, \qquad U = -F_2 x \text{ при } x < 0$$

с различными F_1 и F_2. Интегрирование по dx производится путем введения в подынтегральное выражение затухающего множителя $e^{\pm\lambda x}$ (после чего полагаем $\lambda \to 0$). В результате найдем

$$R = \frac{m^2\hbar^2}{16p_0^6}(F_2 - F_1)^2,$$

где $p_0 = p(0)$.

§ 53. Переходы под влиянием адиабатических возмущений

Мы уже упоминали в § 41, что в пределе сколь угодно медленно меняющегося со временем возмущения вероятность перехода системы из одного состояния в другое стремится к нулю. Рассмотрим теперь этот вопрос количественно, вычислив вероятность перехода под влиянием медленно меняющегося (адиабатического) воозмущения (*Л. Д. Ландау*, 1961).

Пусть гамильтониан системы есть медленно меняющаяся функция времени, стремящаяся к определенным пределам при $t \to \pm\infty$. Пусть, далее, $\psi_n(q, t)$ и $E_n(t)$ — собственные функции и собственные значения энергии (зависящие от времени, как от параметра), получающиеся в результате решения уравнения Шредингера $\hat{H}(t)\psi_n = E_n\psi_n$; ввиду адиабатического характера временного изменения $\hat{H}$ зависимости E_n и ψ_n от времени также являются медленными. Стоящая перед нами задача состоит в определении вероятности w_{21} нахождения системы при $t \to +\infty$ в некотором состоянии ψ_2, если при $t \to -\infty$ она находилась в состоянии ψ_1.

Медленность возмущения приводит к большой длительности «процесса перехода», и потому изменение действия за это время (даваемое интегралом $-\int E(t)\,dt$) велико. В этом смысле поставленная задача имеет квазиклассический характер и в определении искомой вероятности перехода существенную роль играют те значения $t = t_0$, для которых

$$E_1(t_0) = E_2(t_0) \tag{53,1}$$

и которые как бы соответствуют «моменту перехода» в классической механике (ср. § 52); в действительности, разумеется, такой переход классически невозможен, что выражается комплексностью корней уравнения (53,1). В связи с этим возникает необходимость в исследовании свойств решений уравнения Шредингера при комплексных значениях параметра t в окрестности точки $t = t_0$, в которой два собственных значения энергии становятся равными.

Как мы увидим, вблизи этой точки собственные функции ψ_1, ψ_2 сильно зависят от t. Для определения этой зависимости введем предварительно их линейные комбинации (обозначим их как φ_1, φ_2), удовлетворяющие условиям

$$\int \varphi_1^2\,dq = \int \varphi_2^2\,dq = 0, \quad \int \varphi_1\varphi_2\,dq = 1. \tag{53,2}$$

Этого всегда можно достичь надлежащим выбором комплексных коэффициентов (функций от t). Функции φ_1, φ_2 уже не имеют особенности при $t = t_0$.

Будем теперь искать собственные функции в виде линейных комбинаций

$$\psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2. \tag{53,3}$$

При этом надо иметь в виду, что при комплексных значениях «времени» t зависящий от него оператор $\hat{H}(t)$ (вида (17,4)) по-прежнему совпадает со своим транспонированным ($\hat{H} = \tilde{\hat{H}}$), но уже не является эрмитовым ($\hat{H} \neq \tilde{\hat{H}}^*$), поскольку потенциальная энергия $U(t) \neq U(t)^*$.

Подставим (53,3) в уравнение Шредингера и, умножив его слева один раз на φ_1, а другой раз на φ_2, проинтегрируем по dq. Введя обозначения

$$H_{ik}(t) = \int \varphi_i \hat{H} \varphi_k\,dq \tag{53,4}$$

и учитывая, что $H_{12} = H_{21}$ ввиду указанного свойства гамильтониана, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} H_{11}a_1 + H_{12}a_2 &= Ea_2, \\ H_{12}a_1 + H_{22}a_2 &= Ea_1. \end{aligned} \tag{53,5}$$

Условие разрешимости этой системы дает уравнение $(H_{12} - E)^2 = H_{11}H_{22}$, корни которого определяют собственные значения энергии

$$E = H_{12} \pm \sqrt{H_{11}H_{22}}. \tag{53,6}$$

После этого из (53,5) находим

$$\frac{a_2}{a_1} = \pm \sqrt{\frac{H_{11}}{H_{22}}}. \tag{53,7}$$

Из (53,6) видно, что для совпадения в точке $t = t_0$ двух собственных значений в ней должно обращаться в нуль H_{11} или H_{22}; пусть это будет H_{11}. Обращение функции в нуль в регулярной точке происходит, вообще говоря, пропорционально $t-t_0$. Поэтому

$$E(t) - E(t_0) = \pm \operatorname{const} \cdot \sqrt{t - t_0}, \tag{53,8}$$

т. е. $E(t)$ имеет при $t = t_0$ точку ветвления. При этом и $a_2 \sim \sqrt{t - t_0}$, так что в точке $t = t_0$ имеется всего одна собственная функция, совпадающая с φ_1.

Мы видим теперь, что поставленная задача формально полностью аналогична рассмотренной в § 52 задаче о надбарьерном отражении. Мы имеем дело с «квазиклассической по времени» волновой функцией $\Psi(t)$ (вместо квазиклассической по координате функции в § 52), и требуется определить член вида $c_2\psi_2 \exp(-iE_2t/\hbar)$ в волновой функции при $t \to +\infty$, если при $t \to -\infty$ волновая функция $\Psi(t) = \psi_1 \exp(-iE_1t/\hbar)$ (аналогично задаче об определении отраженной волны при $x \to -\infty$ по прошедшей волне при $x \to +\infty$); искомая вероятность перехода $w_{21} = |c_2|^2$. При этом действие $S = -\int E(t)\,dt$ выражается интегралом по времени от функции, имеющей комплексные точки ветвления (подобно тому, как имела комплексные точки ветвления функция $p(x)$ в интеграле $\int p\,dx$). Поэтому рассматриваемая задача решается путем обхода в плоскости комплексного переменного t (от больших отрицательных к большим положительным значениям), полностью аналогично тому, как это было сделано в § 52 в плоскости переменного x, и мы не будем повторять здесь соответствующих рассуждений.

Будем считать, что на вещественной оси $E_2 > E_1$; тогда обход должен совершаться в верхней полуплоскости комплексного t (при смещении в которую отношение $\exp(-iE_2t/\hbar)/\exp(-iE_1t/\hbar)$ растет). В результате получим формулу (аналогичную формуле (52,2))

$$w_{21} = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\operatorname{Im}\int_{C'} E(t)\,dt\right), \tag{53,9}$$

где интегрирование производится по изображенному на рис. 19 контуру, но в направлении слева направо.

На левой ветви этого контура $E = E_1$, а на правой $E = E_2$. Поэтому можно переписать (53,9) в виде

$$w_{21} = \exp\left(-2\,\mathrm{Im}\int_{t_1}^{t_0} \omega_{21}(t)\,dt\right), \qquad (53,10)$$

где $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$; t_1 — любая точка на вещественной оси t, а в качестве t_0 должен быть взят тот из находящихся в верхней полуплоскости корней уравнения (53,1), для которого показатель экспоненты в (53,10) имеет наименьшее по абсолютной величине значение[1]). Кроме того, с прямым переходом из состояния *1* в состояние *2* могут конкурировать также «пути перехода» через различные промежуточные состояния, вероятности которых выражаются аналогичными формулами. Так, для перехода по «пути» *1* → *3* → *2* интеграл в (53,10) заменяется суммой интегралов

$$\int^{t_0^{(31)}} \omega_{31}(t)\,dt + \int^{t_0^{(23)}} \omega_{23}(t)\,dt,$$

в верхних пределах которых стоят «точки пересечения» соответственно термов $E_1(t)$, $E_3(t)$ и $E_2(t)$, $E_3(t)$; этот результат получается путем обхода по контуру, охватывающему обе эти комплексные точки[2]).

Задача

Определить изменение адиабатического инварианта классического осциллятора, подчиняющегося уравнению

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2(t)\,x = 0 \qquad (1)$$

при медленном изменении частоты $\omega(t)$ от ее значения ω_1 при $t \to -\infty$ до ω_2 при $t \to \infty$ (*А. М. Дыхне*, 1960).

Решение. Уравнение (1) получается из уравнения Шредингера переобозначениями

$$\psi \to x, \quad x \to t; \quad p(x)/\hbar = k(x) \to \omega(t),$$

после чего задача оказывается формально эквивалентной задаче об отражении от потенциального барьера, рассмотренной в § 25. Это позволяет свести вычисление изменения адиабатического инварианта к вычислению амплитуды отражения.

---

[1]) В числе конкурирующих значений t_0 должны учитываться также и точки, в которых $E(t)$ обращается в бесконечность (но для таких точек предэкспоненциальный коэффициент в (53,10) был бы другим).

[2]) Случай промежуточных состояний, относящихся к непрерывному спектру, требует особого рассмотрения.

Запишем решение (1) при $t \to \mp \infty$ как

$$x = A_1 e^{i\omega_1 t} + A_1^* e^{-i\omega_1 t}, \quad x \to -\infty,$$

$$x = A_2 e^{i\omega_2 t} + A_2^* e^{-i\omega_2 t}, \quad x \to \infty.$$

Согласно (25,6)

$$A_2 = \alpha A_1 + \beta A_1^*. \tag{2}$$

Адиабатический инвариант для осциллятора равен E/ω, так что

$$I_1 = m\omega_1 \overline{x^2} = 2m\omega_1 |A_1|^2, \quad I_2 = 2m\omega_2 |A_2|^2,$$

или, подставляя (2):

$$I_2 = 2m\omega_2 \left[\left(|\alpha|^2 + |\beta|^2\right|A_1|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left(\alpha\beta^* A_1^2\right)\right].$$

Используя соотношение (25,7), имеющее в наших обозначениях вид $|\alpha|^2 = |\beta|^2 + \omega_1/\omega_2$, находим:

$$I_2 - I_1 = 4m\omega_2 \left[|\beta|^2 |A_1|^2 + \mathrm{Re}\left(\alpha\beta^* A_1^2\right)\right]. \tag{3}$$

Рассматриваемый случай медленного изменения $\omega(t)$ соответствует в задаче об отражении от барьера квазиклассической ситуации предыдущего параграфа. В такой ситуации β экспоненциально мало, а $|\alpha|^2 \approx \omega_1/\omega_2$. (Предполагается, что $\omega^2(t)$ не имеет особенностей или нулей на вещественной оси t.) Изложенный в предыдущем параграфе метод вычисления амплитуды отражения дает для $I_2 - I_1$ оценку

$$\Delta I = I_2 - I_1 \sim |\beta| \sim \exp\left(-2\,\mathrm{Im}\int_{t_1}^{t_0} \omega(t)\,dt\right),$$

где t_0 — особая точка в верхней полуплоскости t, дающая наибольший вклад в ΔI. Эта формула совпадает с результатами I, § 51 для рассматриваемого случая гармонического осциллятора. В случае, когда $\omega^2(t)$ имеет в верхней полуплоскости простой нуль, формулы предыдущего параграфа позволяют найти и предэкспоненциальный множитель. (См. примечание на стр. 234).

Отметим, что второй — главный — член в (3) зависит от начальной фазы колебаний. При усреднении по этой фазе он обращается в нуль, так что

$$\overline{\Delta I} \approx 2RI_1,$$

где $R \approx \dfrac{\omega_2}{\omega_1}\left|\beta\right|^2$ — «коэффициент отражения».