

Семинар 12. Туннельные эффекты. Надбарьерное отражение

24 ноября 2018 года

Двухъямный потенциал¹

Применим теперь наш матричный формализм к решению задачи о туннельном расщеплении уровня в квазиклассическом двухъямном потенциале. Если туннельный барьер достаточно высок, а вероятность проникновения через него — мала, то каждую из двух ям с хорошей точностью можно считать независимыми. Если при этом потенциал симметричный, то в каждой из двух ям имеется набор квазиклассических уровней энергии, даваемых правилом Бора-Зоммерфельда.

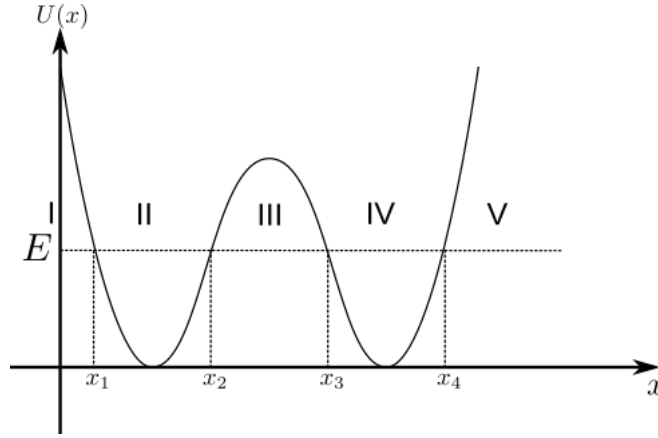


Рис. 1: Двухъямный потенциал

Однако, учёт возможности туннелирования — хоть и экспоненциально маленькое, но конечное перекрытие волновых функций в каждой из ям — приводит к гибридизации. Двукратно вырожденные уровни энергии слабо (в меру малости проницаемости барьера) расщепляются на пары, соответствующие симметричным и анти-симметричным волновым функциям, которые с некоторой точностью являются простыми линейными комбинациями волновых функций в отдельных ямах, $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle)$ и $|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle)$ ($|\psi_{S,A}\rangle$ — симметричная и антисимметричная волновые функции, а $|\psi_{L,R}\rangle$ — волновые функции, локализованные в левой и правой ямах соответственно). Такое расщепление называют **туннельным расщеплением**. Такую ситуацию мы уже рассматривали на примере двух мелких ям, $U(x) = -U_0(\delta(x-a) + \delta(x+a))$; теперь же рассмотрим такую задачу в квазиклассическом приближении.

В области V фиксируется экспоненциально затухающее решение ψ_- : $c_V = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Проводя дальнейшую последовательную сшивку с помощью трансфер-матриц, мы приходим к следующим амплитудам в области I:

$$c_I = \hat{A}^\dagger \hat{S}_{12} \hat{A} \hat{S}_{23} \hat{A}^\dagger \hat{S}_{34} \hat{A} c_V, \quad \hat{S}_{12} = \hat{S}_{34} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{23} = \begin{pmatrix} e^{-S_T} & 0 \\ 0 & e^{S_T} \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} S &= \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - U(x))} dx \\ S_T &= \int_{x_2}^{x_3} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \end{cases} \quad (1)$$

что, после соответствующего перемножения, и нехитрых преобразований, приводит нас к следующему ответу:

$$c_I = \begin{pmatrix} \sin 2S \left(\frac{1}{4} e^{-S_T} + e^{S_T} \right) \\ 4e^{S_T} \cos^2 S - e^{-S_T} \sin^2 S \end{pmatrix} \quad (2)$$

Как и ранее, для связанных состояний мы требуем $c_I^- = 0$, что даёт следующее уравнение:

$$\cot^2 S = \frac{1}{4} e^{-2S_T} \Rightarrow \cot S(E) = \pm \frac{1}{2} e^{-S_T(E)} \quad (3)$$

¹Иной способ решения этой задачи изложен в [ЛЛ], глава 7 «квазиклассический случай», §50 «прохождение через потенциальный барьер», задача 3]. Разумеется, приводит он к такому же ответу.

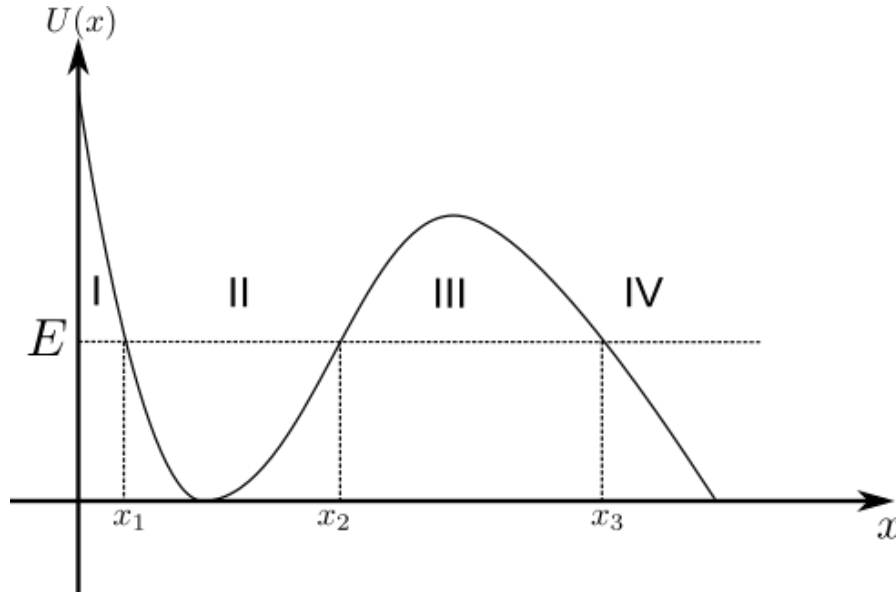


Рис. 2: Квазистационарное состояние

В рамках квазиклассического приближения, $S_T \gg 1$, поэтому справа стоит малая величина. В ведущем приближении, уровни энергии тем самым определяются условием $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$ — что тождественно совпадает с правилом Бора-Зоммерфельда в каждой отдельной яме (в полном согласии с тем, что было сказано в начале параграфа). Чтобы учесть вклад правой части, необходимо разложиться:

$$\cot(S_0(E_n^{(0)} + \delta E_n)) \approx \cot\left(S_0 + \frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n\right) \approx -\frac{\partial S_0}{\partial E} \delta E_n \quad (4)$$

Поскольку $S_0(E) = \int_{x_2}^{x_1} p_E(x) dx$, то $\frac{\partial S_0}{\partial E} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{\partial E / \partial p} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{dx}{v} = \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\omega}$ (где $T = \frac{2\pi}{\omega}$ — период *классического* периодического движения в каждой из ям на уровне энергии E). Тем самым, мы получаем окончательный ответ (тут восстановлен $\hbar$ по размерности):

$$E = E_n^{(0)} \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_3}^{x_2} |p_E(x)| dx} \quad (5)$$

Важно отметить, что интегрирование тут происходит между квазиклассическими точками остановки (а не, например, между минимумами ям)! Расщепление действительно оказалось экспоненциально маленьким (сравните с задачей о двух мелких ямах). Кроме того, стоит отметить, что данный ответ, вообще говоря, был получен только для высоких по энергии уровней, то есть $n \gg 1$; однако, даже для основного состояния $n = 0$ он даёт правильную экспоненциальную зависимость, и правильную параметрическую зависимость предэкспоненты. Неправильным оказывается лишь число в предэкспоненте, которое требует гораздо более нетривиальных вычислений.

Распад метастабильного состояния

О метастабильных состояниях имелаась задача в семинаре 4 «Непрерывный спектр». Тем не менее, мы изложим тут основные свойства метастабильных состояний. Пусть имеется яма, отделённая туннельным барьером. В такой задаче, вообще говоря, не имеется дискретного спектра, а движение является инфинитным — всякая частица рано или поздно «уйдёт» на бесконечность. Однако, из физических соображений понятно, что если барьер достаточно высок, туннельная проницаемость его мала, а частица была «посажена» в эту яму в состоянии, близкие к собственным для данной ямы, то частица будет оставаться в яме достаточно продолжительное время, и в течении этого времени волновая функция будет вести себя практически как стационарная. Такие состояния называют **квазистационарными**, или **метастабильными**.

Как правило, уход частицы из такой ямы определяется экспоненциальным законом, $P(t) = |\psi(t)|^2 \sim e^{-\Gamma t}$, с некоторой малой величиной Γ . Оказывается возможным утверждать, что часть волновой функции, отвечающая яме, с некоторой точностью эволюционирует согласно $\psi(t) \sim e^{-iEt - \Gamma t/2}$, что позволяет интерпретировать обратное время жизни квазистационарного уровня $\Gamma = \tau^{-1}$ как комплексную добавку к энергии: $E - i\frac{\Gamma}{2}$ (обратите внимание, что знак этой мнимой добавки важен!). Величину Γ также часто называют **шириной уровня**².

²Это связано, к примеру, с туннельной плотностью состояний. Для отдельного уровня, плотность состояний устроена как $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i0} = \delta(E - E_0)$; в свою очередь, для квазистационарного состояния она устроена как $\nu(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}} = \frac{1}{\pi} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$, то есть уровень действительно оказывается уширенным.

Искать метастабильные состояния можно по-разному. Наиболее прямолинейным способом является решение нестационарного уравнения Шрёдингера, используя разложение по непрерывному спектру, и явный поиск этой самой вероятности (о чём и имеется соответствующая задача). Однако это может оказаться достаточно трудоёмкой задачей, и имеется более простой способ. Дело в том, что квазистационарным состояниям, как правило, соответствуют решения *стационарного* уравнения Шрёдингера, с асимптотикой волновой функции, соответствующей только вылетающим из ямы частицам. Такое решение очевидным образом нарушает унитарность эволюции, поэтому может существовать только с комплексной энергией, и оно ненормируемо (на одной из бесконечностей оно будет экспоненциально расходиться). Это решение как раз отвечает метастабильному состоянию; а мнимая часть энергии — ширине уровня.

Квазиклассическое приближение

Из вышесказанного следует, что нас интересует решение, которое в области IV соответствует $c_{IV} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Проводя сшивки, в области I мы получаем:

$$c_I = \underbrace{\hat{A}^\dagger}_{x_1} \underbrace{\hat{S}_{12}}_{II} \underbrace{\hat{A}}_{x_2} \underbrace{\hat{S}_{23}}_{III} \underbrace{\hat{A}^\dagger}_{x_3} c_{IV}, \quad \hat{S}_{12} = \begin{pmatrix} e^{-iS} & 0 \\ 0 & e^{iS} \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{23} = \begin{pmatrix} e^{-S_T} & 0 \\ 0 & e^{S_T} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Получаем:

$$c_I = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} e^{-S_T + i\pi/4} \cos S + e^{S_T - i\pi/4} \sin S \\ 2e^{S_T - i\pi/4} \cos S - \frac{1}{2} e^{-S_T + i\pi/4} \sin S \end{pmatrix} \quad (7)$$

Поскольку в области I имеется только затухающее решение, мы требуем $c_I^- = 0$ и получаем:

$$\cot S(E) = \frac{i}{4} e^{-2S_T(E)} \quad (8)$$

Как и раньше, в ведущем приближении $S_0(E_n^{(0)}) = \pi(n + \frac{1}{2})$ отвечало ведущему приближению — правилу Бора-Зоммерфельда; а при разложении, мы получаем $E_n = E_n^{(0)} - i\frac{\Gamma_n}{2}$, причём:

$$\Gamma_n = \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_2}^{x_3} |p_E(x)| dx} \quad (9)$$

Обратим внимание, что время жизни такого уровня даётся $\tau = \Gamma^{-1} \equiv D^{-1}T$, где $T = \frac{2\pi}{\omega}$ — период классического движения, а $D = \exp(-2 \int_{x_2}^{x_3} |p(x)| dx)$ — туннельная проницаемость потенциального барьера. Таким образом, полученный результат имеет сугубо классическую интерпретацию: в яме колеблется классическая частица, и каждый раз отражаясь от точки поворота, она может протуннелировать с конечной вероятностью D . При этом среднее число соударений со стенкой будет равно D^{-1} , а время жизни — $D^{-1}T$.

Метод WKВ в комплексной плоскости

На прошлом семинаре изменение амплитуд при различных квазиклассических решениях объяснялся тем, что в одномерной области, разделённые точкой остановки, не связаны. В действительности это не совсем так — если формально рассмотреть уравнение Шрёдингера для *комплексных* координат x , то область применимости квазиклассического приближения становится односвязной: оно нарушается по-прежнему лишь в окрестности точек остановки. В таком случае скачки в амплитудах при квазиклассических решениях могут вызывать вопросы. Для разрешения данного парадокса предлагается подробно исследовать решения в окрестности обычной точки остановки. Соответствующее уравнение Шрёдингера записывается следующим образом:

$$-\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \quad (10)$$

Квазиклассический импульс имеет вид $p^2(z) = z \Rightarrow p(z) = \sqrt{z}$. Поскольку мы имеем дело с комплексной плоскостью, нам нужно определить ветвь квадратного корня — направим её вдоль мнимой оси вниз ($\arg z = -\frac{\pi}{2}$). Квазиклассическое действие имеет вид $S(z) = \int_0^z p(z) dz = \frac{2}{3} z^{3/2}$, и произвольное решение (во всей комплексной плоскости, куда работает квазиклассическое приближение — то есть при $|z| \gg 1$) раскладывается по паре линейно независимых решений следующего вида:

$$\psi(z) = C_+ \psi_+(z) + C_- \psi_-(z), \quad \psi_\pm(z) = \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3} i z^{3/2}\right) \quad (11)$$

Структура решений WKB

Давайте исследуем, как устроены представленные тут решения в комплексной плоскости, при $z = |z|e^{i\varphi}$ (напомним, наш выбор разреза соответствует выбору фазы $\varphi \in (-\frac{\pi}{2}; \frac{3\pi}{2})$):

$$\psi_{\pm}(|z|e^{i\varphi}) = \frac{e^{-i\varphi/4}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}ie^{3i\varphi/2}|z|^{3/2}\right) \quad (12)$$

У этого решения имеются специальные линии, где показатель экспоненты — чисто вещественный, а решения имеют не осциллирующую природу, а экспоненциально возрастающие и затухающие. Эти линии носят название **линий Стокса**, и в данной задаче они устроены следующим образом:

$$\text{Stokes' lines: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/12}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \pi & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/4}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = -\frac{\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/12}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}|z|^{3/2}\right) \end{cases} \quad (13)$$

В противовес им, имеются **линии анти-Стокса**³, на которых решения — чисто осциллирующие:

$$\text{anti-Stokes' lines: } \begin{cases} \arg z = 0 & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \frac{2\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/6}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \\ \arg z = \frac{4\pi}{3} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/3}}{|z|^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{2}{3}i|z|^{3/2}\right) \end{cases} \quad (14)$$

Структура линий Стокса очень важна с точки зрения метода WKB. С каждым WKB-решением связан целый асимптотический ряд, который можно оптимальным образом просуммировать, получив его *суперасимптотику* — а также неустранимую ошибку, погрешность этого асимптотического ряда. Погрешность, как правило, экспоненциально мала — но если одно решение экспоненциально большое, а второе — экспоненциально маленькое, то может так оказаться, что ошибка экспоненциально большого решения оказывается *больше* экспоненциально маленького решения — в связи с чем сохранение этого решения, вообще говоря, незаконно. Именно это, как правило, происходит на линиях Стокса, где разница между решениями максимальна. В свою очередь это означает, что на линиях Стокса (и только на них!) коэффициент при экспоненциально маленьком решении может измениться скачкообразно. Такой скачок носит названия *явления Стокса*, и это явление будет ключевым для нашего анализа. Давайте проследим, как проявляет себя явление Стокса для функции Эйри.

Функция Эйри

Итак, функция Эйри определяется как решение рассматриваемого нами дифференциального уравнения⁴, которое при $z < 0$ содержит чисто экспоненциально затухающее решение. Важно, что $z < 0$ — это линия Стокса, и зафиксировать решение, выбрав только *экспоненциально растущее решение* на линии Стокса невозможно (т.к коэффициент при экспоненциально затухающем в таком случае был бы не определён):

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad \arg z = \pi \quad (15)$$

Обход сверху Давайте проследим, как это решение устроено в комплексной плоскости, «обходя» точку остановки сверху — вдоль контура $z = |z|e^{i\varphi}$, $\varphi \in (\pi, 0)$.

- $\pi > \arg z > \frac{\pi}{3}$: покуда мы не пересекаем линии Стокса, коэффициенты $C_{\pm}$ измениться не могут — из чего мы заключаем следующее:

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad \pi > \arg z > \frac{\pi}{3} \quad (16)$$

- $\arg z = \frac{\pi}{3}$. На этой линии решение $\psi_+(z)$, которое было экспоненциально растущим, становится экспоненциально маленьким — в связи с чем коэффициент C_+ может измениться произвольным образом. С другой стороны, решение $\psi_-(z)$, которое было затухающим, стало растущим, и коэффициент при нём измениться не может!
- $-\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3}$: вплоть до следующей линии Стокса мы тем самым можем записать:

$$\begin{cases} C_+ = ? \\ C_- = 1 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3} \quad (17)$$

³Терминология, увы, порой разнится. В частности, в математической литературе иногда определения поменяны местами

⁴На самом деле, у функции Эйри коэффициент при линейной части имеет другой знак, поэтому решения нашего уравнения — это $\text{Ai}(-z)$

Таким образом, мы дошли до вещественной оси $z > 0$, обойдя комплексную точку остановки сверху, и смогли определить один из коэффициентов. Второй коэффициент можно найти двумя способами, и мы изложим оба.

Вещественность Первый аргумент прост, но менее универсален. Заметим, что решение $\tilde{\psi}(z) = e^{i\pi/4}\psi(z)$ при $z < 0$ чисто вещественно, поэтому оно обязано быть вещественным и при $z > 0$. С другой стороны, при $z > 0$ имеем:

$$\tilde{\psi}(z > 0) = \frac{C_+ e^{i\pi/4}}{z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3}iz^{3/2}\right) + \frac{e^{i\pi/4}}{z^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3}iz^{3/2}\right) \quad (18)$$

Полученная комбинация вещественна только при $C_+ = e^{-i\pi/2} = -i$. Из этого мы заключаем:

$$\begin{cases} C_+ &= -i \\ C_- &= 1 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} < \arg z < \frac{\pi}{3}, \quad (19)$$

а само решение $\tilde{\psi}(z)$ на вещественной оси имеет следующий вид⁵:

$$\tilde{\psi}(z) = \begin{cases} \frac{1}{|z|^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}, & z < 0 \\ \frac{2}{z^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}z^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right), & z > 0 \end{cases} \quad (20)$$

Обход снизу Второй способ следующий. Предлагается посмотреть, что же будет происходить при обходе снизу.

- $\frac{3\pi}{2} > \arg z > \pi$: имеется небольшое отличие от предыдущего способа — а именно, наш обход сперва упирается в разрез, который был пущен вдоль $\arg z = \frac{3\pi}{2}$, на котором коэффициенты тоже, вообще говоря, могут измениться:

$$\begin{cases} C_+ &= 0 \\ C_- &= 1 \end{cases}, \quad \frac{3\pi}{2} > \arg z > \pi \quad (21)$$

- $\arg z = \frac{3\pi}{2} \vee \arg z = -\frac{\pi}{2}$. Изменение коэффициентов на разрезе определяется очень просто. Дело в том, что построенный нами разрез — вещь фиктивная: само решение, конечно, является однозначной функцией во всей комплексной плоскости. Разрез мы сделали сами (при этом мы могли пустить его куда угодно), и он был нужен нам для определения WKВ-решений. В частности, решения при $\arg z = \frac{3\pi}{2}$ и $\arg z = -\frac{\pi}{2}$ должны тождественно совпадать:

$$C_+ \psi_+(|z|e^{3i\pi/2}) + C_- \psi_-(|z|e^{3i\pi/2}) \equiv C'_+ \psi_+(|z|e^{-i\pi/2}) + C'_- \psi_-(|z|e^{-i\pi/2}) \quad (22)$$

Если аргумент z изменить на 2π (обойти против часовой стрелке точку ветвления, остановившись на другом берегу разреза), то решения попросту поменяются местами (с точностью до фаз):

$$\psi_{\pm}(ze^{2\pi i}) = \frac{-i}{z^{1/4}} \exp\left(\mp \frac{2}{3}iz^{3/2}\right) = -i\psi_{\mp}(z) \quad (23)$$

и поэтому условие однозначности функции сводится к следующему простому условию шивки:

$$\begin{cases} C'_+ &= -iC_- \\ C'_- &= -iC_+ \end{cases}, \quad \arg z = \frac{3\pi}{2} \vee -\frac{\pi}{2} \quad (24)$$

- $-\frac{\pi}{2} < \arg z < -\frac{\pi}{3}$: тем самым, от разреза и до следующей линии Стокса, коэффициенты имеют следующий вид:

$$\begin{cases} C_+ &= -i \\ C_- &= 0 \end{cases}, \quad -\frac{\pi}{3} > \arg z > -\frac{\pi}{2} \quad (25)$$

- $\arg z = -\frac{\pi}{3}$: тот факт, что решения поменялись местами на разрезе, нам очень помогает — потому что именно решение $\psi_+(z)$ на этой линии Стокса экспоненциально растущее, и коэффициент C_+ измениться не может. C_- же изменяется произвольным образом — но нам оно не интересно, ведь мы его уже нашли, обойдя точку остановки снизу! Тем самым, мы подтверждаем вывод, сделанный из аргумента вещественности.

⁵В этом решении мы немедленно узнаём функцию Эйри $\tilde{\psi}(z) \equiv \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \text{Ai}(-z)$.

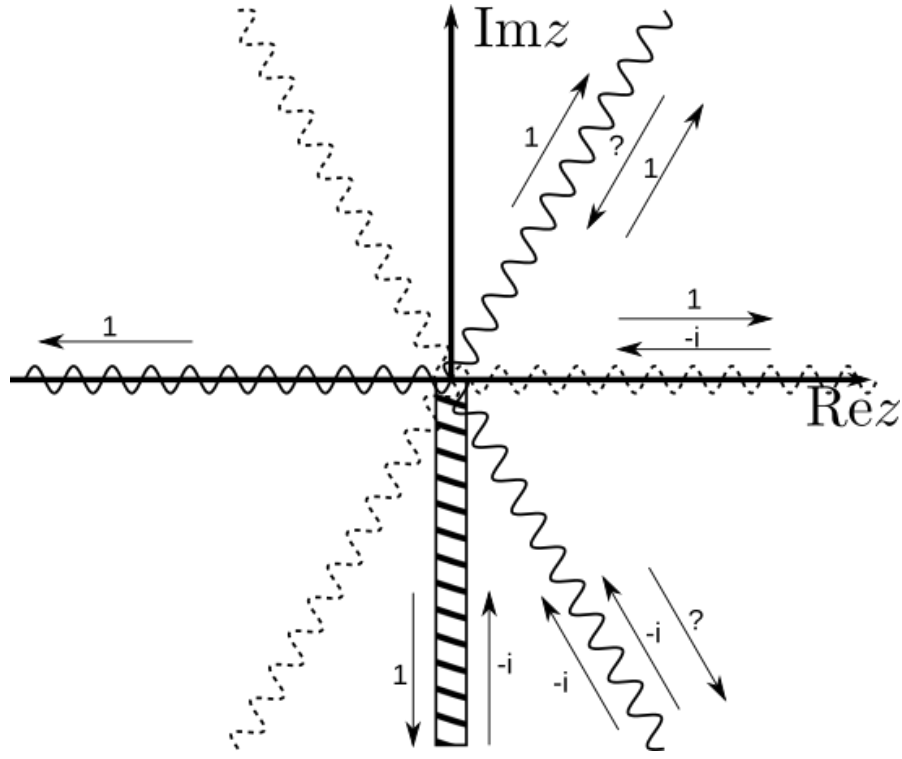


Рис. 3: Структура комплексной плоскости для функции Эйри. Заштрихованная область — разрез. Волнистые сплошные линии — линии Стокса; пунктирные — линии анти-Стокса. Стрелка, направленная к центру — решение $\psi_+(z)$; от центра — решение $\psi_-(z)$.

Квадратичный потенциал

Теперь, продемонстрировав метод на простом примере, давайте его применим к чуть более сложному — к задаче надбарьерного отражения над потенциалом $U(x) = -\frac{m\omega^2 x^2}{2}$, $E > 0$. Линии Стокса определяются из условия $\text{Im}S(z) = \text{Im}S(x_{1,2})$, а анти-Стокса — условием $\text{Re}S(z) = \text{Re}S(x_{1,2})$; они изображены на рисунке.

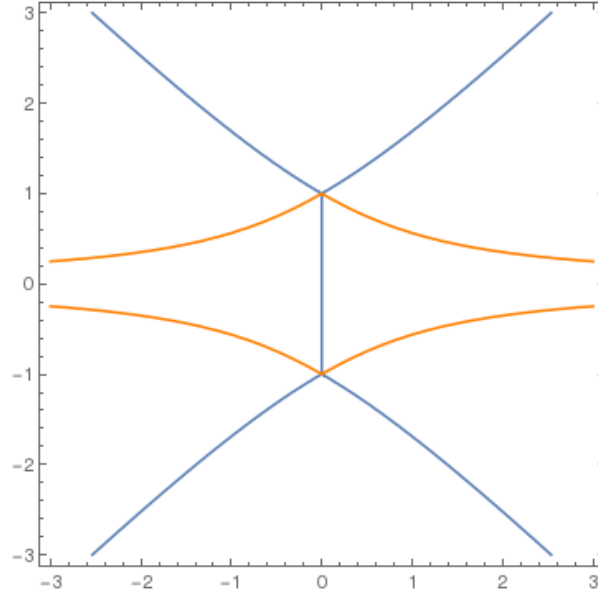


Рис. 4: Линии Стокса (синие) и анти-Стокса (оранжевые) квазиклассических решений в комплексной плоскости ($\text{Re}x$, $\text{Im}x$) в потенциале $U(x) = -\frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Оси в единицах x_0 . Третью линию анти-Стокса, которая должна быть направлена вдоль мнимой оси, Mathematica рисовать отказалась — видимо, из-за совпадения последней с разрезом.

Видно, что проблема заключается в том, что при движении по вещественной оси мы пересекаем одну из линий Стокса (даже не замечая этого) — и теряем отражённую волну. Для того, чтобы её найти, мы сделаем следующую процедуру: вдоль одной из линий анти-Стокса мы пройдем до одной из комплексных точек остановки; используя анализ, проделан-

ный выше, мы найдём амплитуды обеих волн на второй линии анти-Стокса; а затем мы по ней спустимся обратно на вещественную ось. Таким способом мы сможем найти связь коэффициентов прохождения и отражения⁶.

Квазиклассический импульс имеет следующий вид:

$$p(x) = \sqrt{2m \left(E + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} = m\omega \sqrt{x_0^2 + x^2} \quad (26)$$

Можно пустить разрезы $(x_1, i\infty)$ и $(-i\infty, x_2)$, но чуть левее линий анти-Стокса, и зафиксировать физическую ветвь естественным условием вещественности на вещественной оси⁷. Сшивки мы будем проводить, скажем, в окрестности точки остановки ix_0 , где УШ имеет следующий приближённый (обезразмеренный) вид:

$$-\psi''(z) - iz\psi(z) = 0, \quad z = (2m^2\omega^2 x_0)^{1/3}(x - ix_0) \quad (27)$$

Сшивка вблизи $x_1 = ix_0$ Сразу можно обсудить применимость изложенного метода. Квазиклассическое приближение для этого уравнения будет работать при $|z| \gg 1$, а само разложение потенциала работает пока $|x - x_1| \ll x_0 \Leftrightarrow |z| \ll (\frac{E}{\omega})^{2/3}$. Тем самым, имеется ненулевая область применения только если $E \gg \omega$ — что довольно естественно. С учётом этого, импульс и действие, а также квазиклассические решения имеют вид:

$$p(z) = \sqrt{iz} = e^{i\pi/4} z^{1/2}, \quad S(z) = \frac{2}{3} e^{i\pi/4} z^{3/2}, \quad \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/8}}{z^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} i e^{i\pi/4} z^{3/2}} \quad (28)$$

Разрез корня уходит вверх, $\arg z \in (-\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, а условие, фиксирующее ветвь — при $z = -i|z|$, $p(z)$ вещественно (что как раз соответствует «физической» ветви). На линиях Стокса и анти-Стокса решения принимают следующие значения:

$$\text{Stokes: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/6}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{\pi}{2} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{1}{|z|^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{7\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/6}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \end{cases}, \quad \text{anti-Stokes: } \begin{cases} \arg z = \frac{\pi}{2} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/4}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{-i\pi/12}}{|z|^{1/4}} e^{\pm \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \\ \arg z = -\frac{5\pi}{6} & \Rightarrow \psi_{\pm}(z) = \frac{e^{i\pi/12}}{|z|^{1/4}} e^{\mp \frac{2}{3} i |z|^{3/2}} \end{cases} \quad (29)$$

- На линии анти-Стокса $\arg z = -\frac{\pi}{6}$, решение $\psi_+(z)$ соответствует прошедшей волне, а $\psi_-(z)$ — падающей. Поскольку мы решаем задачу рассеяния, мы фиксируем решение следующим образом:

$$\begin{cases} C_+ = \tilde{t} \\ C_- = 0 \end{cases}, \quad \arg z = -\frac{\pi}{6} \quad (30)$$

- $\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{\pi}{2}$: обходим сверху. На линии Стокса $\arg z = \frac{\pi}{6}$, решение $\psi_+(z)$ экспоненциально затухает, а $\psi_-(z)$ — растёт. Коэффициент C_- тем самым не может измениться; однако, поскольку он равен 0, то измениться не может также и C_+ . Поэтому написанные выше коэффициенты, в действительности, работают вплоть до разреза $\arg z = \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{cases} C_+ = \tilde{t} \\ C_- = 0 \end{cases}, \quad \frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{\pi}{2} \quad (31)$$

- $-\frac{7\pi}{6} > \arg z > -\frac{3\pi}{2}$: сшивка на разрезе делается аналогично из требования однозначности функции. При обходе точки ветвления снизу против часовой стрелке, решения опять-таки меняются местами с дополнительной фазой: $\psi_{\pm}(ze^{2\pi i}) = -i\psi_{\mp}(z)$, поэтому слева (вплоть до линии Стокса $\arg z = -\frac{7\pi}{6}$) и справа от разреза коэффициенты связаны: $C'_{\pm} = -iC_{\mp}$. В частности:

$$\begin{cases} C_+ = 0 \\ C_- = -i\tilde{t} \end{cases}, \quad -\frac{7\pi}{6} > \arg z > -\frac{3\pi}{2} \quad (32)$$

- $-\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6}$: наконец, на линии Стокса $\arg z = -\frac{7\pi}{6}$, решение ψ_- экспоненциально растёт, поэтому C_- не меняется. Мы заключаем:

$$C_- = -i\tilde{t}, \quad -\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6} \quad (33)$$

- Теперь давайте устроим обход снизу. Он устроен куда проще, ведь на ближайшей линии Стокса $\arg z = -\frac{\pi}{2}$, решение ψ_+ экспоненциально растёт — поэтому C_+ не меняется, а значит в этом же секторе имеем:

$$C_+ = \tilde{t}, \quad -\frac{\pi}{2} > \arg z > -\frac{7\pi}{6}$$

Тем самым, мы получили слева как падающую (ψ_+), так и отражённую (ψ_-) волны.

⁶Удобней всего «ходить» именно по линиям анти-Стокса, потому что на них оба решения всегда всегда законно сохранять; а кроме того, поскольку на вещественной оси решения тоже чисто осциллирующие, то линии анти-Стокса, связанные с точкой остановки, асимптотически с ней приближаются.

⁷Выбор разрезов и ветвей, конечно же, совершенно произволен. Единственное — может быть неудобно, если разрез совпадает буквально с линией Стокса или анти-Стокса, с которыми мы будем работать

Вещественная ось Теперь давайте вернёмся на вещественную ось, и найдём коэффициенты прохождения и отражения. Вещественное решение определено следующим образом:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} e^{i \int_0^x p(x) dx} + \frac{r}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int_0^x p(x) dx}, & x < 0 \\ \frac{t}{\sqrt{p(x)}} e^{-i \int_0^x p(x) dx}, & x > 0 \end{cases} \quad (34)$$

(в отличие от решения $\psi_{\pm}$, тут интегрирование ведётся от нуля — или во всяком случае, от произвольной точки на вещественной оси — это важно!). Это же решение переписывается в следующем виде:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_+(x) + r e^{-i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_-(x), & \text{Re } x < 0 \\ t e^{i \int_0^{x_1} p(x) dx} \psi_+(x), & \text{Re } x > 0 \end{cases} \quad (35)$$

Сравнивая с найденным выше квазиклассическим решением, мы получаем:

$$\begin{cases} r &= -i e^{2i \int_0^{x_1} p(x) dx} \\ t &= 1 \end{cases} \quad (36)$$

(отличие t от 1 уже находится за пределами квазиклассического приближения — условие $|t|^2 + |r|^2 = 1$ гарантирует, что поправка к t должна быть того же порядка, что и $|r|^2$). Тем самым, мы получили ключевую формулу для коэффициента отражения:

$$\boxed{R = |r|^2 = e^{-4 \text{Im} \int_0^{x_1} p(x) dx}} \quad (37)$$

Поскольку $x_1 = ix_0$, то $\text{Im}(dx) > 0$ и, тем самым, ответ действительно экспоненциально мал. В действительности, для данной формулы совершенно неважен вид потенциала, и коэффициент отражения определяется таким интегралом, взятым до ближайшей к вещественной оси комплексной точки остановки, лежащей в верхней комплексной полуплоскости. Неважен также и нижний предел интегрирования — интегрировать можно от любой точки, лежащей на действительной оси, т.к. добавляемый при этом интеграл по вещественной оси чисто вещественный и вклада не даёт. Интересные модификации этой задачи включают в себя случаи, когда параметрически близко к комплексной точке остановки располагается полюс⁸, или если имеется несколько комплексных точек остановки, лежащих на одинаковом расстоянии от вещественной оси⁹. Для нашей же задачи осталось лишь сосчитать тривиальный интеграл, воспроизводящий часть точного ответа

$$\int_0^{x_1} p(x) dx = i m \omega x_0^2 \int_0^1 \sqrt{1 - z^2} dz = i \frac{\pi E}{2\omega} \Rightarrow \boxed{R = e^{-2\pi E/\omega}} \quad (38)$$

Список литературы

[ЛЛ] Ландау, Лифшиц, курс теоретической физики, том 3 «Квантовая механика (нерелятивистская теория)», 5-е изд. (2002)

⁸Что не так экзотично, как может показаться. Действительно, точка остановки определяется условием $E = U(x)$, и если энергия большая, то большим также должен быть и потенциал. А как правило, потенциал как раз расходится вблизи полюсов. В таком случае, решать уравнение Шрёдингера в окрестности приходится точнее.

⁹В таком случае может существовать линия анти-Стокса, их соединяющая — приходится проводить несколько сшивок вблизи каждой из точек остановки. При этом может возникнуть интересные интерференционные явления — интерференция волн в комплексной плоскости между точками остановки...