

О КВАНТОВАНИИ АМПЛИТУДЫ ПОТЕНЦИАЛА В ОДНОМЕРНОМ УРАВНЕНИИ ШРЕДИНГЕРА

*Б. Я. Балагуров**

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 1 марта 2004 г.

Предложена последовательная схема квантования амплитуды потенциала в одномерном уравнении Шредингера при отрицательных энергиях (область дискретного спектра). Рассмотрены свойства соответствующих собственных функций $\varphi_n(x)$ и собственных значений α_n при нулевой, малой и большой по модулю энергии $E < 0$. С помощью разложения по системе $\{\varphi_n(x)\}$ построена регулярная теория возмущений (в области $E < 0$) и найдено общее выражение для функции Грина стационарного уравнения Шредингера. Тем же методом дано решение некоторых физических задач — поляризуемость слабосвязанной квантовомеханической системы, двухцентровая проблема, а также задача о прохождении медленных частиц через потенциальный барьер (потенциальную яму). Показано, в частности, что коэффициент прохождения таких частиц в случае потенциала притяжения принимает аномально большую, порядка единицы, величину при некоторых критических значениях глубины ямы. Предлагаемый подход обладает определенным преимуществом, так как не требует привлечения состояний непрерывного спектра энергии.

PACS: 03.65.-w, 03.65.Ca, 03.65.Ge

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных задач нерелятивистской квантовой механики является отыскание состояний частицы (для всего спектра энергии) в заданном потенциале, см. [1, 2]. Решение этой задачи позволяет исследовать разнообразные характеристики такой квантовомеханической системы. Это, например, функции отклика (поляризуемость и т. п.) на внешние возмущающие воздействия. Поэтому формальный аппарат квантовой механики в значительной степени представляет собой различные варианты теории возмущений (см. [1, 2]), в основе которых лежит разложение искомой волновой функции по полной системе некоторых «нулевых» (невозмущенных) волновых функций. Соответствующие методы дают регулярные схемы решения разнообразных задач, особенно простые и удобные в тех случаях, когда в рассматриваемом потенциале имеются только связанные состояния (например, для осциллятора).

Ситуация, однако, кардинально меняется при пе-

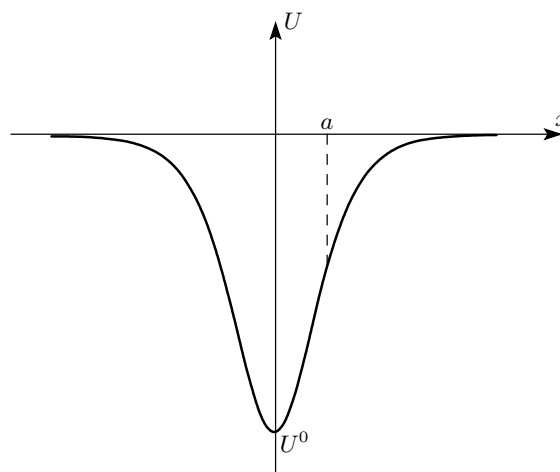


Рис. 1.

реходе к реалистическим, исчезающим на бесконечности потенциалам (см. рис. 1), когда в задаче имеется непрерывный спектр энергии E . В этом случае волновые функции связанных состояний (при $E < 0$) уже не обладают полнотой и для получения полной системы к ним нужно добавить волно-

*E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru

вые функции состояний непрерывного спектра (при $E > 0$), см. [1, 2]. Поэтому при использовании теории возмущений необходимо учитывать оба типа состояний, что приводит к существенному усложнению задачи. Представляет несомненный интерес поиск такого подхода к задачам, относящимся к области отрицательных энергий, при котором отпадает необходимость в привлечении состояний непрерывного спектра.

Для реализации подобного подхода в настоящей работе рассмотрена одна из возможных схем квантования, когда в качестве его объекта выбирается не энергия E , а амплитуда потенциала, т. е. «глубина» потенциальной ямы. Суть такого квантования состоит в следующем: связанное состояние частицы с некоторой фиксированной энергией $E < 0$ в потенциале заданного вида $U(x) = U^0 v(x)$ может быть получено при бесконечном наборе амплитуд U_n^0 ($n = 0, 1, 2, \dots$). При этом величины $U_n^0 = U_n^0(E)$ играют роль собственных значений задачи, а соответствующие волновые функции $\varphi_n(x)$ — роль собственных функций. Поэтому произвольная волновая функция $\psi(x)$, отвечающая некоторому состоянию с энергией $E < 0$, может быть представлена в виде разложения по системе $\{\varphi_n(x)\}$, которая, как можно ожидать, является полной.

В работе рассмотрены основные свойства собственных функций $\varphi_n(x)$ и соответствующих собственных значений (обозначим их через α_n) для одномерного уравнения Шредингера. Для системы функций $\{\varphi_n(x)\}$ установлены соотношения ортонормированности и полноты. Выяснен асимптотический (при $x \rightarrow \pm\infty$) вид функции $\varphi_n(x)$, в том числе и при $E = 0$. Достаточно подробно изучены свойства α_n и $\varphi_n(x)$ при нулевой, малой и большой по модулю энергии E ($E < 0$), а также в квазиклассическом приближении при $n \gg 1$. С помощью разложения по системе собственных функций $\{\varphi_n(x)\}$ построена регулярная теория возмущений (в области $E < 0$), не требующая привлечения состояний непрерывного спектра энергии. Найдено общее выражение (при $E < 0$) для функции Грина стационарного уравнения Шредингера.

Для выяснения возможностей предлагаемого метода рассмотрены некоторые физические задачи — поляризуемость слабосвязанной квантовомеханической системы, двухцентровая проблема, а также задача о прохождении медленных частиц через потенциальный барьер (или над потенциальной ямой). Во всех этих случаях даны последовательные схемы вычисления соответствующих физических величин с помощью разложения по системе собственных функ-

ций $\{\varphi_n(x)\}$. Показано, в частности, что коэффициент прохождения частиц с малой энергией ($E \rightarrow 0$) для потенциалов притяжения принимает аномально большую, порядка единицы, величину при некоторых критических значениях глубины ямы. Для иллюстрации основных положений предлагаемого метода в разд. 12 рассмотрен точно решаемый пример, когда собственные функции и собственные значения могут быть найдены явно в сравнительно простом аналитическом виде. В этом случае полнота системы $\{\varphi_n(x)\}$ доказывается непосредственно.

Заметим, что как частный случай квантование потенциала применялось ранее. Так, например, для трехмерного кулона соответствующие собственные функции — так называемые функции Штурма — рассматривались в [3–5], где они использовались для решения некоторых квантовомеханических задач. В то же время в [3–5] отсутствует общий подход к этой проблеме в случае потенциалов произвольного вида. Отметим также, что в известной мере сходное по форме «квантование» диэлектрической проницаемости макроскопических тел происходит по методу собственных функций, предложенному в [6, 7] для решения различных электростатических задач. Некоторые технические приемы, использованные в [6, 7], могут оказаться полезными и при квантовании амплитуды потенциалов с конечным радиусом действия.

2. СИСТЕМА СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Пусть частица находится в одномерном потенциале типа изображенного на рис. 1. Представим потенциальную энергию $U(x)$ в виде $U(x) = U^0 v(x)$, где U^0 — амплитуда потенциала ($U^0 < 0$), а функция $v(x)$ ($0 \leq v(x) \leq 1$) задает его форму, см. рис. 2. Тогда стационарное уравнение Шредингера может быть записано в виде

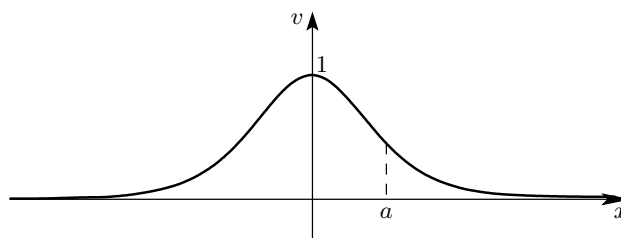


Рис. 2.

$$\begin{aligned} \psi''(x) + \varepsilon \psi(x) &= \alpha v(x)\psi(x), \\ \varepsilon &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \alpha = \frac{2mU^0}{\hbar^2}. \end{aligned} \tag{1}$$

Рассматриваем область отрицательных энергий E , так что $\varepsilon < 0$. Относительно функции $v(x)$ будем предполагать, что при $x \rightarrow \pm\infty$ она достаточно быстро (например, экспоненциально) обращается в нуль. На волновую функцию $\psi(x)$ накладываются обычные условия: конечность и непрерывность (вместе с производной) при всех x , а также обращение в нуль при $x \rightarrow \pm\infty$. При стандартном способе квантования [1] из этих условий определяются уровни энергии E_n и волновые функции $\psi_n(x)$ связанных состояний.

Возможен, однако, альтернативный подход, когда в уравнении (1) в качестве объекта квантования выбирается величина α . В этом случае α (а значит, и амплитуда потенциала) принимает дискретные значения α_n ($n = 0, 1, 2, \dots$), являющиеся собственными значениями задачи. Соответствующие собственные функции $\varphi_n(x)$ удовлетворяют уравнению

$$\varphi_n''(x) + \varepsilon \varphi_n(x) = \alpha_n v(x)\varphi_n(x). \tag{2}$$

При таком подходе энергия ε играет роль параметра, от которого зависят как собственные значения $\alpha_n = \alpha_n(\varepsilon)$, так и собственные функции $\varphi_n = \varphi_n(\varepsilon; x)$. Как отмечалось во Введении, система функций $\{\varphi_n(x)\}$ может быть использована для решения различных квантовомеханических задач (при $E < 0$). Необходимо поэтому исследовать основные свойства собственных функций $\varphi_n(x)$ и собственных значений α_n .

Прежде всего из (2) находим асимптотическое поведение собственной функции $\varphi_n(x) \propto \exp(-\kappa|x|)$ (где $\kappa = \sqrt{-\varepsilon}$) при $x \rightarrow \pm\infty$. Далее, умножая (2) на комплексно-сопряженную функцию $\varphi_n^*(x)$ и интегрируя по x от $-\infty$ до $+\infty$, получаем

$$\begin{aligned} \alpha_n &= - \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n'(x)|^2 dx - \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx \right\} \times \\ &\quad \times \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(x)|^2 v(x) dx \right]^{-1}. \end{aligned} \tag{3}$$

Из (3) следует, что величины α_n действительны и при рассматриваемых $\varepsilon < 0$ и $v(x) \geq 0$ отрицательны:

$$\alpha_n < 0.$$

В силу вещественности α_n собственные функции $\varphi_n(x)$ можно выбрать действительными, что в дальнейшем будем предполагать выполненным.

Проведем в (2) замены энергии $\varepsilon \rightarrow \tilde{\varepsilon}$ и индекса $n \rightarrow m$, так что уравнение для соответствующих собственных функций $\tilde{\varphi}_m(x)$ будет иметь вид

$$\tilde{\varphi}_m''(x) + \tilde{\varepsilon} \tilde{\varphi}_m(x) = \tilde{\alpha}_m v(x)\tilde{\varphi}_m(x), \quad \tilde{\alpha}_m = \alpha_m(\tilde{\varepsilon}).$$

Умножим это равенство на $\varphi_n(x)$, уравнение (2) на $\tilde{\varphi}_m(x)$, вычтем их друг из друга и проинтегрируем по всем x . В результате получим

$$\begin{aligned} (\alpha_n - \tilde{\alpha}_m) \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x)\tilde{\varphi}_m(x)v(x) dx &= \\ = (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}) \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x)\tilde{\varphi}_m(x) dx. \end{aligned} \tag{4}$$

Положив в (4) $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon$, заключаем, что при $\alpha_n \neq \alpha_m$ функции $\varphi_n(x)$ и $\varphi_m(x)$ ортогональны с весом $v(x)$. Поэтому соотношение ортонормированности системы $\{\varphi_n(x)\}$ запишем в виде

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x)\varphi_m(x)v(x) dx = \delta_{nm}, \tag{5}$$

где функции $\varphi_n(x)$ и $\varphi_m(x)$ относятся к одной и той же энергии.

Есть основания полагать, что для широкого класса потенциалов система собственных функций $\{\varphi_n(x)\}$ является полной (см. ниже). В этом случае по системе $\{\varphi_n(x)\}$ можно разложить произвольную функцию $f(x)$, причем коэффициенты f_n этого разложения определяются с помощью условия ортонормированности (5):

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n f_n \varphi_n(x), \\ f_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\varphi_n(x)v(x) dx. \end{aligned} \tag{6}$$

Для сходимости такого разложения к самой функции $f(x)$ должно выполняться равенство

$$v(x) \sum_n \varphi_n(x)\varphi_n(x') = \delta(x - x'), \tag{7}$$

являющееся соотношением полноты для системы $\{\varphi_n(x)\}$. Здесь функции $\varphi_n(x)$ и $\varphi_n(x')$ относятся к одной и той же энергии. Отметим, что для потенциалов с конечным радиусом действия соотношение полноты (7) выполняется только при тех x и x' , для которых $v(x) \neq 0$ и $v(x') \neq 0$.

Положим в (4) $m = n$ и перейдем к пределу $\tilde{\varepsilon} \rightarrow \varepsilon$. Тогда из (4) с учетом (5) получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\varphi_n(x)]^2 dx = \frac{d\alpha_n(\varepsilon)}{d\varepsilon}, \quad (8)$$

откуда следует, что

$$\frac{d\alpha_n}{d\varepsilon} > 0. \quad (9)$$

Из (3) с учетом (5) и (8) находим

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [\varphi'_n(x)]^2 dx = \varepsilon \frac{d\alpha_n(\varepsilon)}{d\varepsilon} - \alpha_n(\varepsilon),$$

откуда следует неравенство

$$\varepsilon \frac{d\alpha_n}{d\varepsilon} > \alpha_n. \quad (10)$$

Введем нулевую функцию Грина $G_0(x - x')$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} G_0(x - x') + \varepsilon G_0(x - x') &= \delta(x - x'), \\ G_0(x - x') &= -\frac{1}{2\kappa} \exp(-\kappa|x - x'|), \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon}. \end{aligned} \quad (11)$$

С помощью (11) уравнение (2) может быть переписано в интегральной форме

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \\ &= -\frac{\alpha_n}{2\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\kappa|x - x'|) \varphi_n(x') v(x') dx'. \end{aligned} \quad (12)$$

Из (12) находим асимптотическое выражение для $\varphi_n(x)$:

$$\begin{aligned} x \rightarrow \pm\infty: \quad \varphi_n(x) &\approx -\frac{\alpha_n u_n(\pm)}{2\kappa} \exp(-\kappa|x|), \\ u_n(\pm) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm\kappa x} \varphi_n(x) v(x) dx. \end{aligned} \quad (13)$$

Равенство (12) является однородным интегральным уравнением Фредгольма второго рода с так называемым полярным ядром. Оно может быть приведено к уравнению с симметричным ядром, если ввести функции (ограничиваемся рассмотрением случая $v(x) > 0$)

$$\Omega_n(x) = \sqrt{v(x)} \varphi_n(x). \quad (14)$$

В результате из (12) получаем

$$\Omega_n(x) = \mu_n \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, x') \Omega_n(x') dx'; \quad \mu_n = -\alpha_n,$$

где

$$K(x, x') = \frac{1}{2\kappa} \sqrt{v(x)} \exp(-\kappa|x - x'|) \sqrt{v(x')} \quad (15)$$

— симметричное и, как можно показать, положительно определенное ядро. Как известно (см., например, [8]), при некоторых ограничениях интегральное уравнение с таким ядром имеет положительные собственные значения $\mu_n > 0$ (чему отвечает $\alpha_n < 0$) и обладает ортонормированной и полной системой собственных функций $\{\Omega_n(x)\}$:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_n(x) \Omega_m(x) dx &= \delta_{nm}, \\ \sum_n \Omega_n(x) \Omega_n(x') &= \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (16)$$

В этом случае, как следует из (16) и (14), для системы функций $\{\varphi_n(x)\}$ выполняются соотношения ортонормированности и полноты в виде (5) и (7).

Из сравнения (13) и (6) следует, что $u_n(\pm)$ являются коэффициентами разложения по системе $\{\varphi_n(x)\}$ для $f(x) = \exp(\pm\kappa x)$, так что

$$e^{\pm\kappa x} = \sum_n u_n(\pm) \varphi_n(x),$$

где величины $u_n(\pm)$ и функции $\varphi_n(x)$ берутся при $\varepsilon = -\kappa^2$. Устремив $x \rightarrow -\infty$ в разложении для $\exp(\kappa x)$, с учетом асимптотики (13) получаем соотношение

$$-\frac{1}{2\kappa} \sum_n \alpha_n u_n(+u_n(-)) = 1.$$

Далее, заменив в уравнении (12) x' на x'' , умножим его на $(\alpha_n)^{-1} \varphi_n(x')$ и просуммируем по всем n . Тогда с учетом соотношения полноты (7) найдем

$$\begin{aligned} G_0(x - x') &= -\frac{1}{2\kappa} \exp(-\kappa|x - x'|) = \\ &= \sum_n \frac{\varphi_n(x) \varphi_n(x')}{\alpha_n}. \end{aligned} \quad (17)$$

Равенство (17) представляет собой разложение функции $f(x) = G_0(x - x')$ по системе $\{\varphi_n(x)\}$ и может быть получено также с помощью формул (6). Для вычисления соответствующих коэффициентов f_n нужно воспользоваться уравнениями (2) и (11).

В частном случае $x' = 0$ из (17) следует разложение

$$\exp(-\kappa|x|) = -2\kappa \sum_n \frac{\varphi_n(0)}{\alpha_n} \varphi_n(x).$$

Отсюда при $x \rightarrow \pm\infty$ с учетом (13) находим

$$\sum_n \varphi_n(0) u_n(\pm) = 1.$$

Положив в (17) $x = x'$, получаем соотношение

$$\sum_n \frac{1}{\alpha_n} [\varphi_n(x)]^2 = -\frac{1}{2\kappa},$$

справедливое при произвольных x . Умножим обе части этого равенства на $v(x) dx$ и проинтегрируем по всем x . В результате (с учетом условия нормировки, см. (5)) находим «правило сумм»

$$\sum_n \frac{1}{\alpha_n} = -\frac{a}{\kappa}, \quad a = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} v(x) dx. \quad (18)$$

3. ЗАДАЧА О СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ

Рассмотрим теперь, как в рамках предлагаемого подхода решается задача о дискретном спектре частицы в потенциале $\alpha v(x)$, где амплитуда α — заданная величина ($\alpha < 0$). Будем искать волновую функцию связанного состояния $\psi(x)$ в виде разложения по системе собственных функций этого потенциала $\{\varphi_m(x)\}$

$$\psi(x) = \sum_m C_m \varphi_m(x).$$

Подстановка этого выражения в (1) с учетом (2) дает

$$\sum_m C_m (\alpha_m - \alpha) v(x) \varphi_m(x) = 0.$$

Умножая это равенство на $\varphi_n(x)$ и интегрируя по всем x , получим соотношение $C_n(\alpha_n - \alpha) = 0$, откуда следует, что $C_n \neq 0$, если

$$\alpha_n(\varepsilon) = \alpha. \quad (19)$$

При этом прочие C_m с $m \neq n$ равны нулю. Соотношения (19) являются уравнениями (при $n = 0, 1, 2, \dots$) для определения энергий связанных состояний $\varepsilon_n = \varepsilon_n(\alpha)$.

Прежде всего отметим тот физически очевидный факт, что в силу неравенства $\alpha_n < 0$ уравнения (19) могут иметь решения только при $\alpha < 0$, т.е. для потенциала притяжения. Далее, из неравенства (9) следует, что $|\alpha_n|$ — монотонно возрастающая функция $|\varepsilon|$, так что при заданном n уравнение (19) может иметь только одно решение $\varepsilon_n = \varepsilon_n(\alpha)$. Поэтому

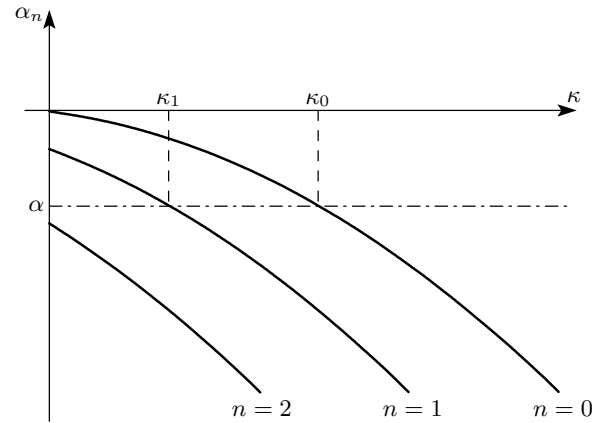


Рис. 3.

в отсутствие вырождения нормированная на единицу волновая функция $\psi_n(x)$ связанного состояния с энергией ε_n имеет вид

$$\psi_n(x) = C_n \cdot \varphi_n(\varepsilon_n; x),$$

$$C_n = \left(\left[\frac{d\alpha_n}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=\varepsilon_n} \right)^{-1/2} = \left[\frac{d\varepsilon_n(\alpha)}{d\alpha} \right]^{1/2}. \quad (20)$$

При выводе (20) использовано равенство (8) и соотношение

$$\left[\frac{d\alpha_n}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=\varepsilon_n} \left[\frac{d\varepsilon_n}{d\alpha} \right] = 1,$$

следующее из (19). При $|x| \rightarrow \pm\infty$ из (20) и (13) находим асимптотическое выражение для $\psi_n(x)$:

$$\psi_n(x) \approx A_n(\pm) e^{-\kappa_n |x|},$$

$$A_n(\pm) = - \left[C_n \frac{\alpha_n u_n(\pm)}{2\kappa} \right]_{\varepsilon=\varepsilon_n}, \quad (21)$$

где $\kappa_n = \sqrt{-\varepsilon_n}$.

На рис. 3 схематически изображена зависимость трех первых ($n = 0, 1, 2$) собственных значений α_n от $\kappa = \sqrt{-\varepsilon}$. (Обращение $\alpha_0(\varepsilon)$ в нуль при $\varepsilon \rightarrow 0$ является спецификой одномерного случая — см. разд. 4 и 5). В изображенной на рис. 3 ситуации уравнения (19) имеют два решения при $n = 0$ и $n = 1$: $\varepsilon_0 = -\kappa_0^2$ и $\varepsilon_1 = -\kappa_1^2$. В то же время при $n = 2$ величине α_2 соответствует виртуальный уровень, так как относительно небольшое увеличение $|\alpha|$ превращает его в реальный.

Если в потенциальной яме имеется несколько связанных состояний, то их волновые функции, задаваемые выражением (20), в соответствии с (4) ортогональны при $\varepsilon_n \neq \varepsilon_m$ (при этом $\alpha_n(\varepsilon_n) = \alpha_m(\varepsilon_m) = \alpha$). Поэтому для системы

$\{\psi_n(x)\}$ имеем обычное условие ортонормированности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x)\psi_m(x) dx = \delta_{nm}.$$

Однако волновые функции $\psi_n(x)$, в противоположность системе $\{\varphi_n(x)\}$, не образуют полного набора.

4. СОСТОЯНИЯ С НУЛЕВОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Прежде чем рассматривать представляющий значительный интерес случай малых энергий, необходимо выяснить основные свойства состояний с $\varepsilon = 0$.

1. Собственные функции $\zeta_n(x) = \varphi_n(0; x)$ и собственные значения $\lambda_n = \alpha_n(0)$ состояний с нулевой энергией удовлетворяют уравнению, следующему из (2) при $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\zeta_n''(x) = \lambda_n v(x)\zeta_n(x). \quad (22)$$

Потребуем, чтобы производная $\zeta_n'(x) \rightarrow 0$ при $|x| \rightarrow \infty$. В этом случае из (22) обычным образом следует ортогональность $\zeta_n(x)$ и $\zeta_m(x)$ с весом $v(x)$ при $\lambda_n \neq \lambda_m$, так что соотношение ортонормированности можно записать в виде, аналогичном (5):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \zeta_n(x)\zeta_m(x)v(x) dx = \delta_{nm}. \quad (23)$$

Из этого же требования следует, что на бесконечности функция $\zeta_n(x)$ не обращается в нуль: $\zeta_n(x) \rightarrow \zeta_n(\pm\infty) \neq 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$. Сделаем также естественное предположение, что соотношение полноты (7), справедливое при любых $\varepsilon \neq 0$, сохраняет силу и в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$. Тем самым предполагается, что выполняется равенство

$$v(x) \sum_n \zeta_n(x)\zeta_n(x') = \delta(x - x'). \quad (24)$$

Отметим, что соответствующие величинам λ_n амплитуды потенциала U_n^0 являются теми критическими значениями глубины потенциальной ямы, при которых появляются (или исчезают) уровни с нулевой энергией связи.

При $\varepsilon = 0$ в качестве нулевой функции Грина (подчиняющейся уравнению (11) с $\varepsilon = 0$) выберем $g_0(x - x') = |x - x'|/2$. С помощью $g_0(x - x')$ уравнение (22) может быть записано в интегральной форме

$$\zeta_n(x) = \lambda_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|x - x'|}{2} \zeta_n(x')v(x') dx' + \frac{1}{2}[\zeta_n(+\infty) + \zeta_n(-\infty)]. \quad (25)$$

Заметим, что при предельном переходе $\kappa \rightarrow 0$ в уравнении (12) существуют две возможности. В первом случае для одного из состояний (будем называть его основным и приписывать ему номер $n = 0$) собственное значение линейно по κ обращается в нуль при $\kappa \rightarrow 0$, так что $\lambda_0 = 0$. (Это отвечает тому известному факту, что для одномерной системы имеется связанное состояние при сколь угодно малом притяжении, см. [1]). Основному состоянию, как следует из (12), (22) и (25), отвечает постоянная (не зависящая от x) собственная функция

$$\zeta_0(x) = \zeta_0 = \frac{1}{\sqrt{2a}}, \quad \lambda_0 = 0. \quad (26)$$

Функция $\zeta_0(x)$ нормирована согласно (23) с a из (18). Собственное значение основного состояния в линейном по κ приближении также может быть найдено из уравнения (12): $\alpha_0^{(1)} = -\kappa/a$ (подробнее см. разд. 5).

Во втором случае ($n \neq 0$), когда $\lambda_n = \alpha_n(0) \neq 0$, для возможности предельного перехода $\kappa \rightarrow 0$ в (12) должно выполняться равенство

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \zeta_n(x)v(x) dx = 0, \quad n \neq 0.$$

Это соотношение выполняется автоматически, так как является, согласно (23), условием ортогональности $\zeta_n(x)$ (при $n \neq 0$) к собственной функции основного состояния $\zeta_0 = \text{const}$. Можно показать, что последовательный предельный переход $\kappa \rightarrow 0$ в (12) приводит к уравнению (25).

Положив в (25) $x = 0$ и исключив с помощью полученного соотношения член $[\zeta_n(+\infty) + \zeta_n(-\infty)]/2$, приведем уравнение (25) к эквивалентному виду

$$\zeta_n(x) - \zeta_n(0) = \lambda_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} [|x - x'| - |x| - |x'|] \times \zeta_n(x')v(x') dx'.$$

Здесь слагаемое с $|x|/2$, не дающее вклада в интеграл, добавлено для симметризации ядра.

2. В силу соотношений (23) и (24) произвольная функция $f(x)$ может быть разложена в ряд по формулам (6) с заменой $\varphi_n(x)$ на $\zeta_n(x)$. Так, для $f(x) = x$ и $f(x) = |x|$ получаем

$$x = \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} t v(t) dt + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) - \zeta_n(+\infty)] \zeta_n(x), \quad (27)$$

$$|x| = \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} |t| v(t) dt - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty) - 2\zeta_n(0)] \zeta_n(x). \quad (28)$$

Здесь интегральные члены отвечают $n = 0$, а коэффициенты разложений при $n \neq 0$ определены с помощью уравнения (22) — умножением его соответственно на x и $|x|$ с последующим интегрированием по всем x .

Вычтя разложения (27) и (28) друг из друга, находим

$$\frac{x - |x|}{2} = \frac{1}{4a} \int_{-\infty}^{+\infty} (t - |t|) v(t) dt + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) - \zeta_n(0)] \zeta_n(x). \quad (29)$$

Левая (а следовательно, и правая) часть равенства (29) обращается в нуль при всех $x > 0$. В частности, при $x \rightarrow +\infty$ из (29) следует соотношение

$$\frac{1}{4a} \int_{-\infty}^{+\infty} (t - |t|) v(t) dt + \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) - \zeta_n(0)] \zeta_n(+\infty) = 0. \quad (30)$$

Далее, положив в (29) $x = 0$ и вычтя полученное равенство из (30), найдем соотношение

$$\sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty) - \zeta_n(0)] \zeta_n(0) = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} \zeta_n(-\infty) \zeta_n(+\infty). \quad (31)$$

Аналогичным образом может быть установлено разложение для функции

$$f(x) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |x - t| v(t) dt = \frac{1}{2a} I - 2a \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty)] \zeta_n(x), \quad (32)$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} |t - t'| v(t) v(t') dt dt'.$$

Положим в (32) $x = 0$ и исключим интегральный член в левой части получившегося равенства с помощью разложения (28) при $x = 0$. В результате придем к соотношению

$$\sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} \zeta_n(-\infty) \zeta_n(+\infty) = \frac{1}{8a^2} I \quad (33)$$

с I из (32).

Разложение функции $f(x) = |x - x'|$ по системе $\{\zeta_n(x)\}$ имеет вид

$$|x - x'| = \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} |t - x'| v(t) dt - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty) - 2\zeta_n(x')] \zeta_n(x).$$

Положив здесь $x = x'$, получим

$$\frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} |t - x| v(t) dt = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty) - 2\zeta_n(x)] \zeta_n(x).$$

Умножив это равенство на $v(x) dx$ и проинтегрировав по всем x , найдем еще одно полезное соотношение

$$\sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} = -\frac{1}{4a} I \quad (34)$$

с тем же, что и в (32), интегралом I .

3. Для вычисления величин λ_n и функций $\zeta_n(x)$ при $n \gg 1$ может быть использовано квазиклассическое приближение, аналогичное стандартному [1]. В данном случае, однако, этот метод обладает определенной спецификой, так как при $\varepsilon = 0$ точки поворота находятся при $x = \pm\infty$ и область «вне ямы» отсутствует. В то же время квазиклассическое приближение при $|x| \rightarrow \infty$ становится непригодным, так что на таких расстояниях необходимо использовать точное решение уравнения (22) с асимптотическим

выражением для функции $v(x)$. Такое решение может быть найдено, например, для потенциалов с экспоненциальной асимптотикой.

Пусть функция $v(x)$ четна и имеет следующую асимптотику:

$$|x| \rightarrow \infty : v(x) \approx v_0 e^{-2\gamma|x|}, \quad (35)$$

где $v_0 \sim 1$ и $\gamma \sim 1/a$. Квазиклассическое приближение для функции $\zeta_n(x)$, справедливое при $\exp(-\gamma|x|) \gg 1/n$, имеет вид

$$\zeta_n(x) = \sqrt{\frac{2}{b}} \frac{(-1)^n}{\sqrt[4]{v(x)}} \times \cos \left\{ \sqrt{|\lambda_n|} \int_{-\infty}^x \sqrt{v(t)} dt + \theta \right\}. \quad (36)$$

С другой стороны, для потенциала (35) имеем следующее точное решение уравнения (22):

$$\zeta_n(x) = \zeta_n(\pm\infty) J_0 \left(\mu_n e^{-\gamma|x|} \right), \quad (37)$$

$$\mu_n = \frac{1}{\gamma} \sqrt{|\lambda_n| v_0}.$$

Здесь $J_0(z)$ — функция Бесселя, знаки «плюс» и «минус» в $\zeta_n(\pm\infty)$ относятся соответственно к случаям $x > 0$ и $x < 0$, константа b из (36) определена в (38).

Выражения (36) и (37) должны «сшиваться» в областях $1/n \ll \exp(-\gamma|x|) \ll 1$ (при $x > 0$ и $x < 0$). Сшивка при отрицательных x позволяет найти постоянную часть фазы: $\theta = -\pi/4$. Сшивка же при положительных x дает правило квантования

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{|\lambda_n| v(x)} dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi,$$

откуда

$$\sqrt{|\lambda_n|} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{b},$$

так что

$$\lambda_n \approx -n(n+1) \left(\frac{\pi}{b} \right)^2, \quad b = \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{v(x)} dx, \quad (38)$$

где $b \sim 1/\gamma \sim a$. В (38) опущено слагаемое $\sim n^0$, для точного определения которого необходим учет члена $\sim 1/n$ в правиле квантования.

Из шивки (36) и (37) находим также выражение для $\zeta_n(\pm\infty)$:

$$\zeta_n(+\infty) = \frac{\pi}{b} \sqrt{\frac{1}{\gamma} \left(n + \frac{1}{2} \right)},$$

$$\zeta_n(-\infty) = (-1)^n \zeta_n(+\infty).$$

Наконец, из (36) с учетом $v(0) = 1$ получаем

$$\zeta_n(0) = \sqrt{\frac{2}{b}} \cos \frac{n\pi}{2}.$$

Отметим, что при вычислении нормировочного интеграла использовано выражение (36), причем, как и в [1], квадрат быстроосциллирующего косинуса заменен на $1/2$.

Для потенциала со степенной асимптотикой

$$|x| \rightarrow \infty : v(x) \approx \frac{g}{|x|^\nu}$$

(где $g \sim a^\nu$, $\nu > 2$) квазиклассическое приближение (36) справедливо при $(a/|x|)^{(\nu-2)/2} \gg 1/n$, а точное решение уравнения (22) при $|x| \gg a$ имеет вид

$$\zeta_n(x) = \zeta_n(\pm\infty) \Gamma \left(\frac{\nu-1}{\nu-2} \right) \left(\frac{2}{\mu_n} \right)^{1/(\nu-2)} \times \sqrt{|x|} J_\tau \left(\frac{\mu_n}{|x|^{(\nu-2)/2}} \right),$$

$$\tau = \frac{1}{\nu-2}, \quad \mu_n = \frac{2\sqrt{|\lambda_n|g}}{\nu-2}.$$

Здесь $J_\tau(z)$ — функция Бесселя с индексом τ . Сшивка этих решений в областях $1/n \ll (a/|x|)^{(\nu-2)/2} \ll 1$ дает

$$\sqrt{|\lambda_n|} = \left[n + \frac{\nu}{2(\nu-2)} \right] \frac{\pi}{b}, \quad \theta = -\frac{\nu\pi}{4(\nu-2)},$$

$$\zeta_n(+\infty) = \frac{1}{\Gamma \left(\frac{\nu-1}{\nu-2} \right)} \left[\frac{2\pi}{b\sqrt{g}} \right]^{1/2} \left[\frac{\sqrt{|\lambda_n|g}}{\nu-2} \right]^\rho,$$

$$\rho = \frac{\nu}{2(\nu-2)}.$$

Здесь b — то же, что и в (38).

5. СОСТОЯНИЯ С МАЛОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Рассмотрим теперь свойства величин α_n и функций $\varphi_n(x)$ при малых энергиях ($\kappa a \ll 1$). Подставив в (2) (с $\varepsilon = -\kappa^2$) $\varphi_n(x)$ в виде

$$\varphi_n(x) = B_n(x) e^{-\kappa|x|}, \quad (39)$$

для $B_n(x)$ получим уравнение

$$B_n''(x) - 2\kappa \operatorname{sign} x B_n'(x) - \alpha_n v(x) B_n(x) = 2\kappa B_n(0) \delta(x). \quad (40)$$

Здесь $\text{sign } x = +1$ при $x > 0$ и $\text{sign } x = -1$ при $x < 0$. Решение уравнения (40) ищем в виде ряда по системе собственных функций с нулевой энергией:

$$B_n(x) = \sum_n b_{nm} \zeta_m(x). \quad (41)$$

Подставим (41) в (40), умножим на $\zeta_k(x)$ и проинтегрируем по x от $-\infty$ до $+\infty$. В результате с учетом (22) и (23) получаем

$$(\alpha_n - \lambda_k) b_{nk} + 2\kappa \sum_m b_{nm} M_{mk} = 0. \quad (42)$$

Здесь

$$M_{mn} = \zeta_m(0)\zeta_n(0) + \int_{-\infty}^{\infty} \zeta_m'(x)\zeta_n(x) \text{sign } x \, dx, \\ M_{nn} = \frac{1}{2} \{ [\zeta_n(-\infty)]^2 + [\zeta_n(+\infty)]^2 \}, \quad (43)$$

$$M_{n0} = \zeta_0[\zeta_n(-\infty) + \zeta_n(+\infty) - \zeta_n(0)], \quad M_{0n} = \zeta_0\zeta_n(0).$$

Система уравнений (42) при малых κ обычным образом может быть решена с помощью теории возмущений — разложением по степеням κ :

$$b_{nm} = \delta_{nm} + b_{nm}^{(1)} + b_{nm}^{(2)} + \dots, \\ \alpha_n = \lambda_n + \alpha_n^{(1)} + \alpha_n^{(2)} + \dots$$

В линейном по κ приближении из (42) находим

$$\alpha_n^{(1)} = -2\kappa M_{nn} = \\ = -\kappa [\zeta_n(-\infty)]^2 + [\zeta_n(+\infty)]^2, \quad (44)$$

$$n \neq m: \quad b_{nm}^{(1)} = \frac{2\kappa M_{nm}}{\lambda_m - \lambda_n} \quad (45)$$

с M_{nm} из (43). Условие применимости рассматриваемого приближения является малость $|\alpha_n^{(1)}| \sim \kappa/a$ по сравнению с $|\lambda_n| \sim 1/a^2$, т. е. $\kappa a \ll 1$. При больших n , как следует из результатов разд. 4, соответствующее условие имеет вид $\kappa a \ll n + 1/2$.

В том же приближении из соотношения ортонормированности (5) следует

$$b_{nm}^{(1)} + b_{mn}^{(1)} = 2\kappa \int_{-\infty}^{\infty} |x| \zeta_n(x)\zeta_m(x) v(x) \, dx, \quad (46)$$

откуда

$$b_{nn}^{(1)} = \kappa \int_{-\infty}^{\infty} |x| [\zeta_n(x)]^2 v(x) \, dx.$$

Выражение для M_{nm} из (43) после некоторых преобразований может быть приведено к виду

$$M_{nm} = \frac{1}{2} [\zeta_n(-\infty)\zeta_m(-\infty) + \zeta_n(+\infty)\zeta_m(+\infty)] - \\ - \frac{1}{2} (\lambda_n - \lambda_m) \int_{-\infty}^{\infty} |x| \zeta_n(x)\zeta_m(x) v(x) \, dx. \quad (47)$$

Нетрудно убедиться, что $b_{nm}^{(1)}$ из (45) с M_{nm} из (47) удовлетворяет соотношению (46).

В квадратичном по κ приближении получаем

$$\alpha_n^{(2)} = 4\kappa^2 \sum_{m \neq n} \frac{M_{nm}M_{mn}}{\lambda_n - \lambda_m}, \quad (48)$$

где M_{nm} — то же, что и в (43). Аналогичным приведенному выше способу могут быть найдены коэффициенты $b_{nm}^{(2)}$, а также и высшие по κ приближения.

Для основного состояния ($n = 0$) из (44) с учетом (26) находим

$$\alpha_0^{(1)} = -\frac{\kappa}{a} \quad (49)$$

с a из (18). Из уравнения (19) с $\alpha_0^{(1)}$ из (49) получаем $\varepsilon_0 = -(\alpha a)^2$ или, в обычных единицах,

$$E_0 = -\frac{m}{2\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(x) \, dx \right]^2$$

— известную формулу для энергии слабосвязанного состояния [1]. При $n = 0$ из (48) следует выражение для $\alpha_0^{(2)}$, которое с учетом соотношений (31) и (33) принимает вид

$$\alpha_0^{(2)} = -\frac{2\kappa^2}{a} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} \zeta_n(-\infty)\zeta_n(+\infty) = -\frac{\kappa^2}{4a^3} I \quad (50)$$

с интегралом I из (32).

Заметим, что первые члены разложения $\alpha_0(\kappa)$ по степеням κ можно найти из соотношения (18). В линейном по κ приближении получаем (49), в квадратичном — выражение

$$\alpha_0^{(2)} = \frac{\kappa^2}{a^2} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n},$$

совпадающее в силу равенства (34) с (50). Для поправки третьего порядка находим

$$\alpha_0^{(3)} = \frac{[\alpha_0^{(2)}]^2}{\alpha_0^{(1)}} - [\alpha_0^{(1)}]^2 \sum_{n \neq 0} \frac{\alpha_n^{(1)}}{\lambda_n^2}$$

с $\alpha_n^{(1)}$ из (44).

Для величин $u_n(\pm)$, определенных согласно (13), из (39) и (41) получаем

$$u_n(\pm) = -\frac{2\kappa}{\alpha_n} \sum_m b_{nm} \zeta_m(\pm\infty).$$

Отсюда, используя предыдущие результаты, находим

$$u_0^{(0)}(\pm) = \sqrt{2a},$$

$$u_0^{(1)}(+)= -u_0^{(1)}(-) = \kappa\sqrt{2a} \times \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} [\zeta_n(+\infty) - \zeta_n(-\infty)] \zeta_n(0),$$

$$n \neq 0: \quad u_n^{(0)}(\pm) = 0, \quad u_n^{(1)}(\pm) = -\frac{2\kappa}{\lambda_n} \zeta_n(\pm\infty).$$

При выводе выражений для $u_0^{(1)}(\pm)$ интеграл, входящий в коэффициент $b_{00}^{(1)}$, исключен с помощью равенства, следующего из (28) при $x = 0$, а также учтены соотношения (31) и (33). С помощью же соотношения, следующего из (27) при $x = 0$, формулам для $u_0^{(1)}(\pm)$ можно придать вид

$$u_0^{(1)}(+)= -u_0^{(1)}(-) = \frac{\kappa}{\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{+\infty} x v(x) dx.$$

Для четного потенциала $u_0^{(1)}(+)= u_0^{(1)}(-) = 0$.

6. СОСТОЯНИЯ С БОЛЬШИМИ $|\varepsilon|$

При $|\varepsilon| \rightarrow \infty$ величины $|\alpha_n|$ также неограниченно растут. Как следует из неравенства (10), рост $|\alpha_n|$ происходит не быстрее, чем линейно по $|\varepsilon|$. С другой стороны, если $v(x)$ конечно при всех x , то $|\alpha_n|$ не может расти медленнее, чем первая степень $|\varepsilon|$, так как иначе уровень с достаточно большим $|\varepsilon|$ «не поместится» в потенциальной яме. Таким образом, величина $|\alpha_n|$ линейно зависит от $|\varepsilon|$ при $|\varepsilon| \rightarrow \infty$. Если потенциал имеет минимум при $x = 0$ (см. рис. 1), причем $v(0) = 1$, то соответствующий коэффициент пропорциональности равен единице, так что ($\varepsilon = -\kappa^2$)

$$|\varepsilon| \rightarrow \infty: \quad \alpha_n = -\kappa^2(1 + \Delta_n + \dots), \quad (51)$$

где $|\Delta_n| \ll 1$. Для упрощения дальнейших формул ограничимся рассмотрением четного потенциала.

Для вычисления поправки Δ_n заметим, что при $|\varepsilon| \rightarrow \infty$ значения α_n (для не слишком больших n)

определяются поведением $v(x)$ вблизи $x = 0$. Предположим, что при $x \rightarrow 0$

$$v(x) \approx 1 - x^2\delta^2 \quad (|x| \ll 1/\delta),$$

где $\delta \sim 1/a$. В этом случае задача на собственные значения сводится к задаче о гармоническом осцилляторе [1]. Поэтому в осцилляторном приближении получаем

$$\Delta_n = (2n + 1) \frac{\delta}{\kappa},$$

$$|x| \ll \frac{1}{\delta}: \quad \varphi_n(x) = \left(\frac{\kappa\delta}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \times \exp(-(\kappa\delta/2)x^2) H_n(\sqrt{\kappa\delta}x), \quad (52)$$

где $H_n(z)$ — полином Эрмита. Условием применимости этого приближения является малость поправки Δ_n по сравнению с единицей, т. е. $\kappa \gg (2n + 1)\delta$ или (с учетом $\delta \sim 1/a$) $\kappa a \gg n + 1/2$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Осцилляторное приближение (52) для $\varphi_n(x)$ пригодено в области $|x| \ll 1/\delta$. Для выяснения вида $\varphi_n(x)$ при $|x| > 1/\delta$ воспользуемся квазиклассическим приближением ($x \gg x_0 > 0$):

$$\varphi_n(x) = \frac{D_n}{\sqrt{k(x)}} \exp\left\{-\int_{x_0}^x k(y) dy\right\},$$

$$k(x) = \kappa [1 - (1 + \Delta_n)v(x)]^{1/2}, \quad x_0 = \frac{\sqrt{\Delta_n}}{\delta}, \quad (53)$$

$$D_n = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{\kappa\delta}{n!}} \left(\frac{2n + 1}{2e}\right)^{(2n+1)/4}.$$

Здесь $x_0 \ll 1/\delta$ и $e = 2.718\dots$ — основание натуральных логарифмов. Коэффициент D_n найден из сшивки выражений для $\varphi_n(x)$ из (52) и (53) в области $x_0 \ll x \ll 1/\delta$. Подчеркнем, что квазиклассическое приближение в виде (53) применимо для всех n , удовлетворяющих условию $n + 1/2 \ll \kappa/\delta$, в том числе и для $n = 0$.

При $x \rightarrow +\infty$ из (53) для $\varphi_n(x)$ получаем выражение вида (13), причем

$$u_n(+)= \frac{2}{\kappa} \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \sqrt{\frac{\delta}{n!}} \left(\frac{2\kappa}{\delta}\right)^{(2n+1)/4} \times \exp\left\{\frac{\kappa}{\delta} \left(I_1 + \frac{\Delta_n}{2} I_2\right)\right\},$$

$$\frac{I_1}{\delta} = \int_0^\infty [1 - \sqrt{1 - v(x)}] dx, \quad (54)$$

$$\frac{I_2}{\delta} = \lim_{s \rightarrow 0} \left[\frac{1}{\delta} \ln(s\delta) + \int_s^\infty \frac{v(x) dx}{\sqrt{1 - v(x)}} \right],$$

с Δ_n из (52). Для рассмотренного четного потенциала $u_n(-) = (-1)^n u_n(+)$.

Как следует из полученных выше результатов, для рассмотренных потенциалов при $n \gg 1$ фактическим параметром разложения для собственных значений α_n является величина ka/n , так что, например, «малым» энергиям отвечает $ka \ll n$ (при этом возможна ситуация, когда $1 \ll ka \ll n$). Случай промежуточных энергий $ka \sim n \gg 1$ может быть рассмотрен с помощью квазиклассического приближения, аналогичного стандартному [1]. Соответствующее правило квантования для четных потенциалов имеет вид

$$\int_0^{x_1} \sqrt{\varepsilon - \alpha_n v(x)} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2},$$

где x_1 —нуль подкоренного выражения.

7. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Пусть в потенциале $U(x) = U^0 v(x)$ имеется связанное состояние с волновой функцией $\psi_n^{(0)}(x)$ и энергией $\varepsilon_n^{(0)}$. Требуется найти $\psi_n(x)$ и ε_n в случае, когда к гамильтониану добавляется малое возмущение $V'(x)$. Уравнение для $\psi_n(x)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_n''(x) + \varepsilon_n \psi_n(x) - \alpha v(x) \psi_n(x) &= V(x) \psi_n(x), \\ V(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} V'(x). \end{aligned} \tag{55}$$

Будем искать решение уравнения (55) с помощью разложения $\psi_n(x)$ по полной системе собственных функций $\{\varphi_m(x)\}$, введенных в разд. 2:

$$\psi_n(x) = \sum_m A_{nm} \varphi_m(x). \tag{56}$$

Здесь функции $\varphi_m(x)$ удовлетворяют уравнению (2) (с заменой n на m) при $\varepsilon = \varepsilon_n^{(0)}$, где энергия связанного состояния $\varepsilon_n^{(0)}$ определяется из уравнения (19). Соответственно волновая функция $\psi_n^{(0)}(x)$ этого состояния выражается через $\varphi_n(x)$ (при $\varepsilon = \varepsilon_n^{(0)}$) согласно (20).

Подставим (56) в (55), умножим на $\varphi_k(x)$ (также взятой при $\varepsilon = \varepsilon_n^{(0)}$) и проинтегрируем по всем x . В результате с использованием уравнения (2) и соотношения (5) получим

$$\begin{aligned} (\varepsilon_n - \varepsilon_n^{(0)}) \sum_m \langle k|m \rangle A_{nm} + (\alpha_k - \alpha_n) A_{nk} &= \\ &= \sum_m \langle k|V|m \rangle A_{nm}, \\ \langle k|m \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_k(x) \varphi_m(x) dx, \\ \langle k|V|m \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_k(x) V(x) \varphi_m(x) dx, \end{aligned} \tag{57}$$

причем, согласно (8) и (20), $\langle n|n \rangle = (C_n)^{-2}$. В (57) величина α в силу уравнения (19) заменена на $\alpha_n = \alpha_n(\varepsilon_n^{(0)})$.

Систему уравнений (57) решаем разложением по степеням $V(x)$:

$$\begin{aligned} A_{nm} &= A_{nm}^{(0)} + A_{nm}^{(1)} + A_{nm}^{(2)} + \dots, \\ \varepsilon_n &= \varepsilon_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

где $A_{nm}^{(0)} = C_n \delta_{nm}$ с C_n из (20) при $\varepsilon = \varepsilon_n^{(0)}$. В линейном по $V(x)$ приближении из (57) находим

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{\langle n|V|n \rangle}{\langle n|n \rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{(0)}(x) V(x) \psi_n^{(0)}(x) dx, \tag{58}$$

что, как и должно быть, совпадает с известным результатом, см. [1]. В том же приближении для $A_{nm}^{(1)}$ при $n \neq m$ из (57) получаем

$$n \neq m : A_{nm}^{(1)} = \frac{C_n}{\alpha_m - \alpha_n} [\langle m|V|n \rangle - \varepsilon_n^{(1)} \langle m|n \rangle], \tag{59}$$

где $\varepsilon_n^{(1)}$ дается выражением (58). Из условия нормировки для $\psi_n(x)$ в линейном по $V(x)$ приближении следует равенство

$$\sum_m \langle n|m \rangle A_{nm}^{(1)} = 0,$$

откуда с использованием (59) может быть найден коэффициент $A_{nn}^{(1)}$.

В квадратичном по $V(x)$ приближении из (57) получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_n^{(2)} &= (C_n)^2 \sum'_m \frac{1}{\alpha_m - \alpha_n} [\langle n|V|m \rangle - \varepsilon_n^{(1)} \langle n|m \rangle] \times \\ &\quad \times [\langle m|V|n \rangle - \varepsilon_n^{(1)} \langle m|n \rangle], \end{aligned} \tag{60}$$

где штрих у знака суммы означает, что слагаемое с $m = n$ опускается. Аналогичным образом могут

быть найдены коэффициенты $A_{nm}^{(2)}$, а также поправки высших приближений для ε_n и A_{nm} . Подчеркнем, что в выражения (56)–(60) входят функции $\varphi_n(x)$ и $\varphi_m(x)$, а также величины α_n и α_m , взятые при энергии $\varepsilon = \varepsilon_n^{(0)}$.

Теория возмущений может быть развита также для собственных значений α_n и собственных функций $\varphi_n(x)$. Соответствующее уравнение для $\varphi_n(x)$ имеет вид

$$\varphi_n''(x) + \varepsilon \varphi_n(x) - \alpha_n v(x) \varphi_n(x) = V(x) \varphi_n(x).$$

Линейная и квадратичная по $V(x)$ поправки к собственному значению даются следующими выражениями

$$\alpha_n^{(1)} = -\langle n|V|n \rangle, \quad \alpha_n^{(2)} = -\sum_m' \frac{\langle n|V|m \rangle \langle m|V|n \rangle}{\alpha_m^{(0)} - \alpha_n^{(0)}},$$

где $\langle n|V|m \rangle$ — то же, что и в (57). Здесь $\alpha_n^{(0)}$ и $\alpha_m^{(0)}$ — собственные значения, а $\varphi_n(x)$ и $\varphi_m(x)$ — собственные функции, определенные при $V(x) = 0$ и при произвольном ε . В ряде случаев может оказаться удобнее с помощью выражения для $\alpha_n = \alpha_n^{(0)} + \alpha_n^{(1)} + \alpha_n^{(2)} + \dots$ находить поправки к энергии связанного состояния из уравнения (19).

8. ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ

Пусть частица с зарядом e находится в основном связанном состоянии ($n = 0$), и эта система помещена в однородное электрическое поле напряженности \mathcal{E} . Тогда $V'(x) = -e\mathcal{E}$, так что $V(x) = -(2me\mathcal{E}/\hbar^2)x$. В этом случае из (60) с учетом $\langle 0|x|0 \rangle = 0$ получаем следующее выражение для поляризуемости Λ такой системы:

$$\Lambda = \frac{4me^2}{\hbar^2} (C_0)^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\langle 0|x|n \rangle)^2}{\alpha_0 - \alpha_n}. \quad (61)$$

Здесь $(C_0)^2 = d\varepsilon_0/d\alpha$ и величины $\alpha_n, \varphi_n(x)$ берутся при $\varepsilon = \varepsilon_0$, где ε_0 определяется из уравнения $\alpha_0(\varepsilon) = \alpha$.

Рассмотрим одномерную квантовомеханическую систему, в которой имеется только одно слабосвязанное состояние с энергией $\varepsilon_0 = -\kappa_0^2$, где $\kappa_0 = |\alpha|a \ll 1/a$, и собственной функцией $\varphi_0(x) \approx \zeta_0 \exp(-\kappa_0|x|)$ с ζ_0 из (26). Перепишем (61) в виде (при этом α_0 заменяем на α)

$$\Lambda = -\frac{4me^2}{\hbar^2} \frac{d\varepsilon_0(\alpha)}{d\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} x dx \varphi_0(x) \times \int_{-\infty}^{+\infty} x' dx' \varphi_0(x') \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x) \varphi_n(x')}{\alpha_n - \alpha}.$$

Используя представление (17) для $G_0(x - x')$, преобразуем входящую в это выражение сумму следующим образом:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x) \varphi_n(x')}{\alpha_n - \alpha} = G_0(x - x') - \frac{\varphi_0(x) \varphi_0(x')}{\alpha} + \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n(x) \varphi_n(x')}{\alpha_n(\alpha_n - \alpha)}.$$

Второй член в правой части этого равенства вклада в Λ не дает (в силу $\langle 0|x|0 \rangle = 0$), а третий по сравнению с первым имеет порядок $(\kappa_0 a)^2 \ll 1$. Таким образом, приближенно имеем

$$\Lambda \approx -\frac{4me^2}{\hbar^2} \frac{d\varepsilon_0(\alpha)}{d\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} x dx \varphi_0(x) \times \int_{-\infty}^{+\infty} x' dx' \varphi_0(x') G_0(x - x').$$

Подстановка в это выражение величин $\varphi_0(x) = (2a)^{-1/2} \exp(-\kappa_0|x|)$, $\varepsilon_0 = -\kappa_0^2 = -(\alpha a)^2$ и $G_0(x - x') = -(2\kappa_0)^{-1} \exp(-\kappa_0|x - x'|)$ дает

$$\Lambda \approx \frac{5}{4} \frac{me^2}{\hbar^2 \kappa_0^4}, \quad (62)$$

что только численным коэффициентом отличается от соответствующего результата для трехмерного случая — см. задачу 5 к § 76 из [1].

К результату (62) можно прийти и другим способом, сходным с примененным в задачах 4 и 5 к § 76 из [1]. В линейном по $V(x)$ приближении поправка $\psi^{(1)}(x)$ к невозмущенной волновой функции $\psi_0(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\psi^{(1)''}(x) + \varepsilon_0 \psi^{(1)}(x) - \alpha v(x) \psi^{(1)}(x) = V(x) \psi_0(x),$$

$$V(x) = -Bx, \quad B = \frac{2me\mathcal{E}}{\hbar^2}.$$

Здесь учтено, что $\varepsilon^{(1)} = 0$ при $\langle 0|x|0 \rangle = 0$. Будем искать $\psi^{(1)}(x)$ в виде $\psi^{(1)}(x) = f(x) \psi_0(x)$. Тогда для $f(x)$ получаем уравнение

$$f''(x) + 2 \frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} f'(x) = -Bx.$$

Для слабосвязанного состояния имеем $\psi_0(x) \approx (\kappa_0)^{1/2} \exp(-\kappa_0|x|)$, так что

$$f''(x) - 2\kappa_0 f'(x) \operatorname{sign} x = -Bx.$$

Интересующим нас решением этого уравнения является

$$f(x) = \frac{B}{4\kappa_0} \left(x|x| + \frac{x}{\kappa_0} \right).$$

Вычисляя среднее значение дипольного момента $d = ex$:

$$\bar{d} \approx 2e \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_0(x) \psi^{(1)}(x) dx = 2e \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) [\psi_0(x)]^2 dx,$$

приходим к выражению (62).

9. ДВУХЦЕНТРОВАЯ ЗАДАЧА

Своеобразная теория возмущений возникает в задаче об определении связанных состояний частицы, находящейся в поле двух одинаковых потенциальных ям, удаленных на расстояние $l \gg a$ друг от друга. Обозначим через x_1 и x_2 ($l = x_1 - x_2 > 0$) координаты «центров» этих потенциалов. Собственные функции $\varphi_\nu(x)$ двухцентрковой задачи удовлетворяют уравнению

$$\varphi_\nu''(x) + \varepsilon \varphi_\nu(x) = \alpha_\nu [v(x-x_1) + v(x-x_2)] \varphi_\nu(x), \quad (63)$$

Собственные функции $\varphi_n^{(i)}(x) \equiv \varphi_n(x-x_i)$ для уединенной i -й ямы подчиняются уравнению (2) с заменой $x \rightarrow x-x_i$. Каждая из систем функций $\{\varphi_n^{(i)}(x)\}$ ($i = 1, 2$) полна при любых x (если $v(x) \neq 0$ при всех x), так что $\varphi_\nu(x)$ можно разложить либо по $\{\varphi_n^{(1)}(x)\}$, либо по $\{\varphi_n^{(2)}(x)\}$.

Целесообразнее, однако, искать $\varphi_\nu(x)$ в виде двойного разложения

$$\varphi_\nu(x) = \sum_m \{A_{\nu m} \varphi_m^{(1)}(x) + B_{\nu m} \varphi_m^{(2)}(x)\}. \quad (64)$$

Подставим (64) в (63), умножим на $\varphi_n^{(1)}(x) = \varphi_n(x-x_1)$ и проинтегрируем по всем x ; аналогичным образом поступим с функцией $\varphi_n^{(2)}(x) = \varphi_n(x-x_2)$. В результате получим систему уравнений для коэффициентов $A_{\nu n}$ и $B_{\nu n}$:

$$\begin{aligned} & (\alpha_n - \alpha_\nu) A_{\nu n} + \sum_m (\alpha_m - \alpha_\nu) B_{\nu m} J_{nm}^{(1)}(-l) = \\ & = \alpha_\nu \sum_m \{A_{\nu m} J_{nm}^{(2)}(-l) + B_{\nu m} J_{nm}^{(1)}(l)\}, \\ & \sum_m (\alpha_m - \alpha_\nu) A_{\nu m} J_{mn}^{(1)}(l) + (\alpha_n - \alpha_\nu) B_{\nu n} = \\ & = \alpha_\nu \sum_m \{A_{\nu m} J_{nm}^{(1)}(-l) + B_{\nu m} J_{nm}^{(2)}(l)\}. \end{aligned} \quad (65)$$

Здесь

$$\begin{aligned} J_{nm}^{(1)}(\pm l) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x) \varphi_m(x \pm l) v(x) dx, \\ J_{nm}^{(2)}(\pm l) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x \pm l) \varphi_m(x \pm l) v(x) dx. \end{aligned} \quad (66)$$

При $l \gg a$, используя для $\varphi_n(x)$ асимптотическое выражение (13), для $J_{nm}^{(1)}$ и $J_{nm}^{(2)}$ получаем

$$\begin{aligned} J_{nm}^{(1)}(\pm l) &\approx -\frac{\alpha_m u_m(\pm) u_n(\mp)}{2\kappa} e^{-\kappa l}, \\ J_{nm}^{(2)}(\pm l) &\approx \frac{\alpha_n u_n(\pm) \alpha_m u_m(\pm)}{2\kappa} e^{-2\kappa l} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\mp 2\kappa x} v(x) dx. \end{aligned} \quad (67)$$

Перекрытием потенциалов пренебрегаем, считая их короткодействующими; в случае $v(x)$ с асимптотикой вида (35) для этого необходимо выполнение условия $\kappa < \gamma \sim 1/a$. Это же условие обеспечивает сходимость интеграла в (67).

Рассмотрим состояние ν , «близкое» к невозмущенному состоянию n . Пусть $\kappa l \gg 1$, так что в (65) можно пренебречь членами, содержащими $(\alpha_n - \alpha_\nu) J_{nm}^{(1)}$ и $J_{nm}^{(2)}$, которые пропорциональны $\exp(-2\kappa l)$. Ту же степень малости имеют члены с $m \neq n$. В результате из (65) следует, что для искомой величины α_ν имеются два решения $\alpha_{n\sigma}$ ($\sigma = 1, 2$), которым отвечают $B_{\nu n}/A_{\nu n} = -(-1)^\sigma$:

$$\begin{aligned} \alpha_{n\sigma} &= \alpha_n \{1 + (-1)^\sigma J_n\} \quad (\sigma = 1, 2), \\ J_n &= -\frac{1}{2\kappa} \alpha_n u_n(+) u_n(-) e^{-\kappa l}. \end{aligned} \quad (68)$$

Учет отброшенных в (65) слагаемых дает возможность последовательным образом находить высшие поправки к (68).

Подстановка (68) в уравнение (19) позволяет найти соответствующие уровни энергии

$$\varepsilon_{n\sigma}(l) = \varepsilon_n + (-1)^\sigma 2\kappa_n A_n(+) A_n(-) e^{-\kappa_n l} \quad (\sigma = 1, 2). \quad (69)$$

Здесь $A_n(\pm)$ — коэффициенты в асимптотиках (21) для волновой функции $\psi_n(x)$ связанного состояния в отдельной потенциальной яме с энергией $\varepsilon_n = -\kappa_n^2$, определяемой из уравнения $\alpha_n(\varepsilon) = \alpha$. Уровням энергии (69) отвечают волновые функции

$$\psi_{n\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_n(x - x_1) - (-1)^\sigma \psi_n(x - x_2) \},$$

совпадающие с используемыми при стандартном подходе к двухцентровой задаче.

Рассмотрим расщепление уровня с $n = 0$ при $l \gg a$, $\kappa a \ll 1$ и κl — произвольном. В этом случае из (67) с учетом результатов разд. 5 имеем

$$J_{00}^{(1)}(\pm l) \approx e^{-\kappa l}, \quad J_{00}^{(2)}(\pm l) \approx e^{-2\kappa l}.$$

Тогда, опуская в (65) члены с $m \neq 0$, малые по параметру $\kappa a \ll 1$, получим

$$\alpha_{0\sigma} \approx \frac{\alpha_0}{1 - (-1)^\sigma \exp(-\kappa l)}, \quad (70)$$

где $\alpha_0 = -\kappa/a$. Из (70) следует, что при $|\alpha|a^2 < a/l \ll 1$ имеется одно, а при $a/l < |\alpha|a^2 \ll 1$ — два связанных состояния. Для $\kappa l \gg 1$ (70) совпадает с (68) при $n = 0$ и $\kappa a \ll 1$. Результат (70) является точным для пары дельта-функциональных «потенциалов» вида $v(x) = 2a\delta(x)$, находящихся друг от друга на расстоянии l .

10. ФУНКЦИЯ ГРИНА

Функция Грина $G(x, x')$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \varepsilon - \alpha v(x) \right\} G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (71)$$

Решение уравнения (71) ищем с помощью разложения по системе функций $\{\varphi_n(x)\}$. В результате получаем

$$G(x, x') = \sum_n \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{\alpha_n - \alpha}. \quad (72)$$

При $\alpha = 0$ из (72) следует разложение (17) для нулевой функции Грина $G_0(x - x')$. С учетом (17) выражение для $G(x, x')$ может быть записано также в виде

$$G(x, x') = G_0(x - x') + \alpha \sum_n \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{\alpha_n(\alpha_n - \alpha)}, \quad (73)$$

эквивалентном (72).

Для потенциалов с конечным радиусом действия, когда $v(x) = 0$ вне интервала (x_1, x_2) , разложения (72) и (17) имеют место, если хотя бы одна из координат $(x$ или $x')$ принадлежит (x_1, x_2) ; при этом вторая координата произвольна. Если же обе координаты лежат вне (x_1, x_2) , то разложения (72) и (17) не существует. В этом случае для $G(x, x')$ справедливо выражение (73) с $G_0(x - x')$ из (11) — ср. с [7].

Запишем уравнение (71) в интегральном виде

$$G(x, x') = G_0(x - x') + \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} G_0(x - x_1)v(x_1)G(x_1, x') dx_1.$$

При достаточно малых α это уравнение может быть решено итерациями

$$G(x, x') = G_0(x - x') + G^{(1)}(x, x') + G^{(2)}(x, x') + \dots, \quad (74)$$

$$G^{(k)}(x, x') = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} G_0(x - x_1)v(x_1) \times G^{(k-1)}(x_1, x') dx_1 \quad (k \geq 1), \quad (75)$$

где $G^{(k)}(x, x')$ содержит k -ю степень α . Разложение (74), (75) представляет собой стандартную теорию возмущений, применимую в одномерном случае при $|\alpha|a^2 \ll \kappa a$ или в обычных единицах: $|U| \ll (\hbar^2/ma^2)\kappa a$ (см. [1, § 45]).

Из общего выражения для функции Грина (72) или (73) при $\alpha \rightarrow 0$ следует разложение вида (74), где в данном случае

$$G^{(k)}(x, x') = (\alpha)^k \sum_n \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{(\alpha_n)^{k+1}} \quad (k \geq 1). \quad (76)$$

Для выяснения соответствия между (75) и (76) заменим в уравнении (12) x' на x_1 , затем умножим его на $\alpha^k \varphi_n(x')(\alpha_n)^{-(k+1)}$ и просуммируем по всем n . В результате придем к рекуррентному соотношению (75), так что разложения (74), (75) и (74), (76) эквивалентны. Для справедливости разложения (74), (76) необходимо, чтобы $|\alpha/\alpha_n| \ll 1$ для всех n , в том числе и для $n = 0$. Согласно результатам разд. 5, при $\kappa a \ll 1$ имеем $|\alpha_0| \approx \kappa/a \ll |\alpha_n| \sim 1/a^2$. Поэтому при $\kappa a \ll 1$ условием применимости разложения (74), (76) является $|\alpha| \ll |\alpha_0|$ или $|\alpha|a^2 \ll \kappa a$, что совпадает с критерием, приведенным выше.

Таким образом, в одномерном случае потенциальную энергию можно рассматривать как возмущение (при $\kappa a \ll 1$) только при выполнении весьма жесткого условия $|\alpha|a^2 \ll \kappa a \ll 1$. Нетрудно видеть, однако, что выделение состояния с $n = 0$ позволяет расширить область применимости соответствующего разложения, сделав ее такой же, как и в трехмерном случае: $|\alpha|a^2 \ll 1$ (при $\kappa a \ll 1$).

Выделим в (73) вклад состояния с $n = 0$:

$$G(x, x') = G_0(x - x') + \frac{\alpha}{\alpha_0(\alpha_0 - \alpha)} \varphi_0(x)\varphi_0(x') + \tilde{G}(x, x'), \tag{77}$$

$$\tilde{G}(x, x') = \alpha \sum_{n \neq 0} \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{\alpha_n(\alpha_n - \alpha)}.$$

При $n \neq 0$ и $\kappa a \ll 1$ имеем $|\alpha_n| \sim 1/a^2$, так что при $|\alpha|a^2 \ll 1$ величину $\tilde{G}(x, x')$ можно разложить по степеням α :

$$\tilde{G}(x, x') = \alpha \sum_{n \neq 0} \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{(\alpha_n)^2} + \alpha^2 \sum_{n \neq 0} \frac{\varphi_n(x)\varphi_n(x')}{(\alpha_n)^3} + \dots$$

Входящие в это разложение суммы могут быть, как и выше, выражены (путем добавления и вычитания состояния с $n = 0$) через $G^{(k)}(x, x')$ из (75). В результате ряд теории возмущений для функции Грина примет вид

$$G(x, x') = G_0(x - x') + \frac{\alpha}{\alpha_0(\alpha_0 - \alpha)} \varphi_0(x)\varphi_0(x') + \alpha \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} G_0(x - x_1)v(x_1)G_0(x_1 - x') dx_1 - \frac{\varphi_0(x)\varphi_0(x')}{(\alpha_0)^2} \right\} + \dots \tag{78}$$

с аналогичной «перенормировкой» в членах высшего по α порядка. Условие применимости (78) является $|\alpha|a^2 \ll 1$ при $\kappa a \ll 1$.

Для «потенциала» $v(x) = 2a\delta(x)$ имеется только одно состояние с $\alpha_0 = -\kappa/a$ и $\varphi_0(x) = (2a)^{-1/2} \exp(-\kappa|x|)$. В этом случае, как нетрудно убедиться, точное выражение для функции Грина дается формулой (77) с $\tilde{G}(x, x') = 0$ (ср. с задачами 2.45 и 2.46 из [9]).

11. КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ МЕДЛЕННЫХ ЧАСТИЦ

Рассмотрим задачу о прохождении плоской волны через потенциальный барьер (или над потенциальной ямой). Представим волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{ikx} + F(x)e^{ik|x|}. \tag{79}$$

Амплитуда прошедшей (d) и отраженной (r) волн выражаются через $F(x)$ следующим образом:

$$d = 1 + F(+\infty), \quad r = F(-\infty).$$

Подстановка (79) в (1) (при $\varepsilon = k^2 > 0$) дает

$$F''(x) + 2ikF'(x) \operatorname{sign} x - \alpha v(x)F(x) + 2ikF(0)\delta(x) = \alpha v(x) \exp(ik(x - |x|)). \tag{80}$$

Решение уравнения (80) ищем в виде разложения по системе собственных функций состояний с нулевой энергией $\{\zeta_n(x)\}$:

$$F(x) = \sum_m F_m \zeta_m(x).$$

Для коэффициентов F_n обычным образом получаем систему уравнений

$$(\lambda_n - \alpha)F_n + 2ik \sum_m M_{mn}F_m = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-|x|)} \zeta_n(x)v(x) dx, \tag{81}$$

где M_{mn} — то же, что и в (43).

При $k \rightarrow 0$ ($\kappa a \ll 1$) ищем F_n с помощью разложения по степеням k : $F_n = F_n^{(0)} + F_n^{(1)} + F_n^{(2)} + \dots$. В нулевом приближении имеем $F_n^{(0)} = -\sqrt{2a} \delta_{n0}$, $F^{(0)}(x) = -1$, так что при $k = 0$ прошедшая волна очевидным образом отсутствует. В линейном по k приближении для $d^{(1)}$ находим

$$d^{(1)} = -\frac{ik}{\alpha a} \left\{ 1 + \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (x - |x|)v(x) dx - 2\alpha a \sum_{n \neq 0} \frac{1}{\lambda_n} \left[\zeta_n(0) + \frac{\alpha}{\lambda_n - \alpha} \zeta_n(-\infty) \right] \zeta_n(+\infty) \right\}.$$

Исключая отсюда интегральный член с помощью соотношения (30), получим окончательно

$$d^{(1)} = 2ik \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta_n(-\infty)\zeta_n(+\infty)}{\lambda_n - \alpha}. \tag{82}$$

Из (82) следует, что коэффициент прохождения $D = |d|^2 \propto k^2$ при $k \rightarrow 0$, что согласуется с [1] (см. задачу 5 к § 25).

При $|\alpha|a^2 \ll 1$ из (82) получаем выражение $d \approx -ik/(\alpha a)$, справедливое при $ka \ll |\alpha|a^2$. Если же $ka \sim |\alpha|a^2 \ll 1$, то при определении F_0 в левой части уравнения (81) следует наряду с α учесть член $\sim k/a$, так что в этом случае

$$d \approx \frac{ik}{ik - \alpha a}.$$

Этот результат является точным для $v(x) = 2a\delta(x)$.

Как следует из (82), для потенциала притяжения ($\alpha < 0$) при $\alpha \rightarrow \lambda_n$ (для $n \neq 0$) в величине d имеет-ся расходимость. В этом случае при нахождении F_n ($n \neq 0$) в левой части уравнения (81) следует наряду с $(\lambda_n - \alpha)$ удержать член $\sim k/a$. В результате при $|\alpha - \lambda_n|a^2 \ll 1$ и $ka \ll 1$ получаем

$$d \approx 2ik \frac{\zeta_n(-\infty)\zeta_n(+\infty)}{\lambda_n - \alpha + 2ik M_{nn}} \quad (83)$$

с M_{nn} из (43). При $ka \ll |\alpha - \lambda_n|a^2 \ll 1$ величина $|d|$ малá: $|d| \ll 1$. Если же $|\alpha - \lambda_n|a^2 \ll ka \ll 1$, то из (83) следует, что $|d| \sim 1$, а для четного потенциала $|d| \approx 1$. Таким образом, в рассмотренном случае коэффициент прохождения частиц аномально велик, хотя сам потенциал не мал: $|\alpha|a^2 \approx |\lambda_n|a^2 > 1$.

В том же приближении ($|\alpha - \lambda_n|a^2 \ll ka \ll 1$) для волновой функции $\psi(x)$ в области $x < 0$ имеем (при четном потенциале)

$$x < 0: \quad \psi(x) \approx e^{ikx} - \left[1 - \frac{\zeta_n(x)}{\zeta_n(-\infty)} \right] e^{-ikx}. \quad (84)$$

Следовательно, в асимптотическом (при $x \rightarrow -\infty$) выражении для $\psi(x)$ отраженная волна отсутствует. В то же время при $|x| < a$ волновая функция может существенно отличаться от падающей плоской волны. Отметим также, что выражение (83) (точнее, его аналитическое продолжение в плоскость комплексного ε) имеет полюс при $\varepsilon = \varepsilon_n$. Здесь ε_n — энергия связанного состояния, определяемая из уравнения (19) с $\alpha_n(\varepsilon) = \lambda_n + \alpha_n^{(1)}(\varepsilon)$, где $\alpha_n^{(1)}(\varepsilon)$ дается формулой (44).

В случае потенциального барьера ($\alpha > 0$) коэффициент прохождения убывает при увеличении α . При $\alpha a^2 \gg 1$ в сумме из (82) существенны $n \gg 1$. Для потенциалов с экспоненциальной асимптотикой вида (35) соответствующие квазиклассические выражения для λ_n и $\zeta_n(\pm\infty)$ найдены в разд. 4. Под-

ставляя эти выражения в (82) и используя известное разложение [10]

$$\frac{1}{\operatorname{ch} \frac{\pi x}{2}} = \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{2n+1}{(2n+1)^2 + x^2},$$

найдем

$$d^{(1)} \approx -ik \frac{\pi}{\gamma} \frac{1}{\operatorname{ch}(b\sqrt{\alpha})}$$

с b из (38). При $b \sim a$ имеем $b\sqrt{\alpha} \gg 1$, так что для $d^{(1)}$ получаем окончательно

$$d^{(1)} \approx -ik \frac{2\pi}{\gamma} \exp \left\{ -\sqrt{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{v(x)} dx \right\} \quad (85)$$

($\sqrt{\alpha} a \gg 1, ka \ll 1$).

12. ТОЧНО РЕШАЕМЫЙ ПРИМЕР

Для иллюстрации предлагаемого подхода рассмотрим потенциал

$$v(x) = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \gamma x}, \quad (86)$$

для которого собственные функции и собственные значения могут быть найдены явно в сравнительно простом виде. Уравнение (2) с $v(x)$ из (86) решается так же, как в задаче 5 к § 23 из [1]. Для собственных значений получаем следующее выражение:

$$\alpha_n = -\gamma^2 \left(n + \frac{\kappa}{\gamma} \right) \times \left(n + 1 + \frac{\kappa}{\gamma} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (87)$$

Им соответствуют собственные функции, нормированные согласно (5):

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= B_n (1 - \xi^2)^{(2\varrho-1)/4} \cdot C_n^\varrho(\xi), \\ \xi &= \operatorname{th} \gamma x, \\ B_n &= 2^\varrho \Gamma(\varrho) \left[\gamma \frac{(n+\varrho)n!}{2\pi\Gamma(n+2\varrho)} \right]^{1/2}, \\ \varrho &= \frac{1}{2} + \frac{\kappa}{\gamma}, \end{aligned} \quad (88)$$

где $C_n^\varrho(\xi)$ — полиномы Гегенбауэра [10–12].

Согласно [10–12], полиномы Гегенбауэра $C_n^\varrho(\xi)$ ортогональны с весом $w(\xi) = (1 - \xi^2)^{(2\varrho-1)/2}$, а функции

$$\Phi_n^\varrho(\xi) = 2^\varrho \Gamma(\varrho) \left[\frac{(n+\varrho)n!}{2\pi\Gamma(n+2\varrho)} \right]^{1/2} (1 - \xi^2)^{(2\varrho-1)/4} C_n^\varrho(\xi)$$

образуют ортонормированную и полную (замкнутую) систему на интервале $(-1 < \xi < +1)$, так что

$$\sum_{n=0}^{\infty} \Phi_n^\varrho(\xi) \Phi_n^\varrho(\xi') = \delta(\xi - \xi').$$

Поэтому для системы функций $\{\varphi_n(x)\}$, определенных в (88), имеем

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n(x') = \gamma \delta(\xi - \xi') = \frac{\delta(x - x')}{v(x)}, \quad (89)$$

что совпадает с соотношением полноты (7).

Равенство (89) может быть выведено следующим образом. Сначала с помощью формулы Кристоффеля—Дарбу (см. [10–12]) проведем в левой части (89) суммирование от $n = 0$ до $n = N$. Затем, используя асимптотику для $C_n^\varrho(\xi)$ при $N \gg 1$ (см. [11]), совершим предельный переход $N \rightarrow \infty$. В результате придем к соотношению (89).

При $x \rightarrow +\infty$ имеем $\xi \approx 1 - 2 \exp(-2\gamma x)$ и из (88) следует

$$x \rightarrow +\infty: \quad \varphi_n(x) \approx B_n C_n^\varrho(1) 2^{(2\varrho-1)/2} \exp(-\kappa x).$$

Отсюда с учетом (13) и выражения для $C_n^\varrho(1)$ из [10, 11] получаем

$$u_n(+)= -\frac{\kappa}{\alpha_n} 2^{(4\varrho+1)/2} \times \times \frac{\Gamma(\varrho)}{\Gamma(2\varrho)} \left[\gamma \frac{(n+\varrho)\Gamma(n+2\varrho)}{2\pi n!} \right]^{1/2} \quad (90)$$

с ϱ из (88). Соответственно для $u_n(-)$ имеем $u_n(-) = (-1)^n u_n(+)$. Из (90) при $\kappa \rightarrow 0$ находим

$$\begin{aligned} u_0^{(0)}(\pm) &= \sqrt{\frac{2}{\gamma}}, \quad u_0^{(1)}(\pm) = 0, \\ n \neq 0: \quad u_n^{(0)}(\pm) &= 0, \\ u_n^{(1)}(+)&= -\frac{2\kappa}{\lambda_n} \sqrt{\gamma \left(n + \frac{1}{2} \right)}. \end{aligned} \quad (91)$$

При $\kappa \rightarrow \infty$ из (90) получаем

$$\begin{aligned} \kappa \rightarrow \infty: \quad u_n(+)&\approx \frac{2}{\kappa} \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \times \\ &\times \sqrt{\frac{\gamma}{n!}} \left(\frac{2\kappa}{\gamma} \right)^{(2n+1)/4} \exp\left(\frac{\kappa}{\gamma} \ln 2 \right). \end{aligned} \quad (92)$$

Так как при $\varrho \rightarrow \infty$ и $\xi \rightarrow 0$ имеем (см. [10, 11])

$$C_n^\varrho(\xi) \approx \frac{\varrho^{n/2}}{n!} H_n(\xi \sqrt{\varrho}),$$

где $H_n(z)$ — полиномы Эрмита, из (88) находим

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &\approx \left(\frac{\kappa\gamma}{\pi} \right)^{1/4} \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp(-(\kappa\gamma/2)x^2) H_n(x\sqrt{\kappa\gamma}). \end{aligned} \quad (93)$$

Выражение (93) справедливо при $\kappa/\gamma \gg 1$ для $n = 0$ и $\kappa/\gamma \gg n$ для $n > 0$, а также при $\gamma|x| \ll 1$.

В пределе $\kappa \rightarrow 0$ из (88) с учетом равенства $C_n^{1/2}(\xi) = P_n(\xi)$ (см. [10, 11]), где $P_n(\xi)$ — полиномы Лежандра, для $\zeta_n(x) = \varphi_n(0; x)$ получаем

$$\zeta_n(x) = \sqrt{\gamma \left(n + \frac{1}{2} \right)} P_n(\xi), \quad \xi = \text{th } \gamma x \quad (94)$$

и $\lambda_n = -\gamma^2 n(n+1)$ для собственных значений. Система функций (94) также является ортонормированной с весом (86) и полной (замкнутой). Так как $P_n(1) = 1$, $P_n(-1) = (-1)^n$ [10, 11], из (94) следует

$$\begin{aligned} \zeta_n(+\infty) &= \sqrt{\gamma \left(n + \frac{1}{2} \right)}, \\ \zeta_n(-\infty) &= (-1)^n \zeta_n(+\infty). \end{aligned} \quad (95)$$

Используя выражение для $P_n(0)$ (см. [10, 11]), из (94) находим

$$\zeta_n(0) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right)} \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2} + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \cos \frac{n\pi}{2}.$$

Отсюда для больших n получаем

$$n \gg 1: \quad \zeta_n(0) \approx \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} \cos \frac{n\pi}{2}. \quad (96)$$

Для констант, введенных в (18), (38), (32), (52) и (54), в случае потенциала (86) имеем

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\gamma}, \quad b = \frac{\pi}{\gamma}, \quad I = \frac{4}{\gamma^3}, \\ \delta &= \gamma, \quad I_1 = \ln 2, \quad I_2 = 0. \end{aligned} \quad (97)$$

С учетом (97) выражения (87), (91)–(93), (95) и (96) совпадают с соответствующими результатами из разд. 4–6.

Прохождение частицы через потенциальный барьер вида (86) рассмотрено в задаче 4 к § 25 из [1]. Используя это решение, для амплитуды прошедшей волны d находим

$$d = \frac{\Gamma(s+1-i(k/\gamma))\Gamma(-s-i(k/\gamma))}{\Gamma(1-i(k/\gamma))\Gamma(-i(k/\gamma))}, \quad (98)$$

$$s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\gamma^2}} \right),$$

В линейном по k приближении из (98) следует

$$d^{(1)} = -ik \frac{\pi}{\gamma} \frac{1}{\cos \left[\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\gamma^2}} \right]}. \quad (99)$$

К этому же результату приводит при использовании равенства (84) подстановка $\lambda_n = -\gamma^2 n(n+1)$ и $\zeta_n(\pm\infty)$ из (95) в формулу (82). Соответственно при $\alpha > 0$ и $\alpha/\gamma^2 \gg 1$ из (99) следует выражение (85) с $b = \pi/\gamma$.

В заключение выражаю благодарность В. Я. Кривнову за обсуждение работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Задача о собственных функциях и собственных значениях может быть решена для ряда конкретных потенциалов. В дополнение к разд. 12 приведем для справок соответствующие результаты для трех точно решаемых случаев.

1. Для потенциала

$$v(x) = e^{-2\gamma|x|} \quad (A.1)$$

имеем следующую подсистему симметричных (четные состояния) собственных функций:

$$\begin{aligned} \varphi_{sn}(x) &= A_{sn} J_\nu(\mu_{sn} e^{-\gamma|x|}), \\ \nu &= \frac{\kappa}{\gamma}, \quad \mu_{sn} = \frac{1}{\gamma} \sqrt{-\alpha_{sn}}, \end{aligned} \quad (A.2)$$

где $J_\nu(z)$ — функция Бесселя. Соответствующие собственные значения α_{sn} определяются из уравнения

$$J'_\nu(\mu_{sn}) = 0 \quad (A.3)$$

с μ_{sn} из (A.2). Нормировочный коэффициент A_{sn} находится из условия (5)

$$A_{sn} = \frac{\mu_{sn}}{J_\nu(\mu_{sn})} \sqrt{\frac{\gamma}{\mu_{sn}^2 - \nu^2}}. \quad (A.4)$$

Антисимметричные (нечетные состояния) собственные функции имеют вид

$$\begin{aligned} \varphi_{an} &= A_{an} J_\nu(\mu_{an} e^{-\gamma|x|}) \operatorname{sign} x, \\ \nu &= \frac{\kappa}{\gamma}, \quad \mu_{an} = \frac{1}{\gamma} \sqrt{-\alpha_{an}}. \end{aligned} \quad (A.5)$$

Уравнение для собственных значений α_{an} :

$$J_\nu(\mu_{an}) = 0 \quad (A.6)$$

с μ_{an} из (A.5). Нормировочный множитель

$$A_{an} = -\frac{\sqrt{\gamma}}{J'_\nu(\mu_{an})} = \frac{\sqrt{\gamma}}{J_{\nu+1}(\mu_{an})}. \quad (A.7)$$

Для констант a , b и I в данном случае имеем

$$a = \frac{1}{2\gamma}, \quad b = \frac{2}{\gamma}, \quad I = \frac{3}{4\gamma^3}.$$

Ортонормированность системы (A.2)–(A.7) проверяется непосредственно. Полнота данной системы является следствием сходимости разложений Фурье–Бесселя и Дини [11].

2. В качестве примера потенциала с конечным радиусом действия рассмотрим потенциальную яму вида

$$v(x) = \theta(a - |x|), \quad (A.8)$$

где $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$.

Для симметричных собственных функций имеем

$$\begin{aligned} |x| < a: \quad \varphi_{sn}^{(i)}(x) &= A_{sn} \cos(\mu_{sn} x), \\ \mu_{sn} &= \sqrt{-\alpha_{sn} - \kappa^2}, \\ |x| > a: \quad \varphi_{sn}^{(e)}(x) &= B_{sn} \exp(-\kappa(|x| - a)), \\ B_{sn} &= A_{sn} \cos(\mu_{sn} a), \\ A_{sn} &= \left[a - \frac{\kappa}{\alpha_{sn}} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (A.9)$$

Собственные значения α_{sn} определяются из уравнения

$$\mu_{sn} \operatorname{tg}(\mu_{sn} a) = \kappa \quad (A.10)$$

с μ_{sn} из (A.9).

Для антисимметричных собственных функций имеем

$$\begin{aligned} |x| < a: \quad \varphi_{an}^{(i)}(x) &= A_{an} \sin(\mu_{an} x), \\ \mu_{an} &= \sqrt{-\alpha_{an} - \kappa^2}, \\ |x| > a: \quad \varphi_{an}^{(e)}(x) &= \\ &= B_{an} \exp(-\kappa(|x| - a)) \operatorname{sign} x, \\ B_{an} &= A_{an} \sin(\mu_{an} a), \\ A_{an} &= \left[a - \frac{\kappa}{\alpha_{an}} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (A.11)$$

Собственные значения α_{an} определяются из уравнения

$$\mu_{an} \operatorname{ctg}(\mu_{an} a) = -\kappa \quad (A.12)$$

с μ_{an} из (A.11).

Система функций (A.9)–(A.12) ортонормирована и полна в интервале $(-a < x < a)$.

3. Для потенциала

$$v(x) = \frac{a_0^4}{(x^2 + a_0^2)^2} \quad (\text{A.13})$$

могут быть найдены собственные функции и собственные значения для состояний с нулевой энергией.

Четным состояниям с $\varepsilon = 0$ отвечают симметричные собственные функции

$$\zeta_{sn}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_0^3}} \times \sqrt{x^2 + a_0^2} \cos \left[(2n + 1) \operatorname{arctg} \frac{x}{a_0} \right] \quad (\text{A.14})$$

с собственными значениями

$$\lambda_{sn} = -\frac{1}{a_0^2} [(2n + 1)^2 - 1] = -\frac{4}{a_0^2} n(n + 1) \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (\text{A.15})$$

Из (A.14) следует

$$\zeta_{sn}(+\infty) = \zeta_{sn}(-\infty) = (-1)^n (2n + 1) \sqrt{\frac{2}{\pi a_0}}, \quad \zeta_{sn}(0) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_0}}. \quad (\text{A.16})$$

Нечетным состояниям с $\varepsilon = 0$ отвечают антисимметричные собственные функции

$$\zeta_{an}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi a_0^3}} \sqrt{x^2 + a_0^2} \sin \left[2n \operatorname{arctg} \frac{x}{a_0} \right] \quad (\text{A.17})$$

с собственными значениями

$$\lambda_{an} = -\frac{1}{a_0^2} [(2n)^2 - 1] \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (\text{A.18})$$

Из (A.17) следует

$$\zeta_{an}(+\infty) = -\zeta_{an}(-\infty) = (-1)^{n+1} \cdot 2n \sqrt{\frac{2}{\pi a_0}}, \quad \zeta_{an}(0) = 0. \quad (\text{A.19})$$

Система собственных функций $\{\zeta_{sn}(x), \zeta_{an}(x)\}$ ортонормирована (согласно (23)) и полна.

Результаты разд. 5 и 6 позволяют выйти за рамки случая $\varepsilon = 0$. Для соответствующих констант в данном случае имеем

$$a = \frac{\pi a_0}{4}, \quad b = \pi a_0, \quad I = \frac{3\pi}{4} a_0^3, \\ I_1 = 2 - \sqrt{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.75, \\ I_2 = 2 \ln 2 - \sqrt{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.14.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Состояния с большими $|\varepsilon|$ для «угловатых» (в точке минимума) потенциалов должны быть рассмотрены заново. Пусть четная функция $v(x)$ при $x \rightarrow 0$ линейно меняется с x :

$$v(x) = 1 - 2\gamma|x| + \dots \quad \left(|x| \ll \frac{1}{\gamma} \right), \quad (\text{B.1})$$

где $\gamma \sim 1/a$. В этом случае уравнение (2) в области $|x| \ll a$ с учетом (51) и (B.1) принимает вид

$$\varphi_n''(x) - 2\gamma\kappa^2 \left(|x| - \frac{\Delta_n}{2\gamma} \right) \varphi_n(x) = 0. \quad (\text{B.2})$$

Собственные функции $\varphi_{sn}(x)$ четных состояний симметричны по x :

$$\varphi_{sn}(x) = B_{sn} \Phi(\xi_s(x)), \\ \xi_s(x) = (2\gamma\kappa^2)^{1/3} \left(|x| - \frac{\Delta_{sn}}{2\gamma} \right), \\ B_{sn} = \frac{(2\gamma\kappa^2)^{1/6}}{\sqrt{2z'_n} \Phi(-z'_n)}. \quad (\text{B.3})$$

Здесь $\Phi(z)$ — функция Эйри, определенная согласно [1]:

$$\Phi(z) = \sqrt{\pi} \operatorname{Ai}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos \left(zt + \frac{1}{3} t^3 \right) dt. \quad (\text{B.4})$$

Поправка Δ_{sn} (см. (51)) определяется из условия $\Phi'(\xi_s(0)) = 0$ и имеет вид

$$\Delta_{sn} = \left(\frac{2\gamma}{\kappa} \right)^{2/3} z'_n. \quad (\text{B.5})$$

В (B.3) и (B.5) положительные числа z'_n — нули производной $\Phi'(-z)$.

Для нечетных состояний собственные функции $\varphi_{an}(x)$ антисимметричны:

$$\varphi_{an}(x) = B_{an} \Phi(\xi_a(x)) \operatorname{sign} x, \\ \xi_a(x) = (2\gamma\kappa^2)^{1/3} \left(|x| - \frac{\Delta_{an}}{2\gamma} \right), \\ B_{an} = \frac{(2\gamma\kappa^2)^{1/6}}{\sqrt{2} \Phi'(-z_n)}. \quad (\text{B.6})$$

Поправка Δ_{an} определяется из условия $\Phi(\xi_a(0)) = 0$ и имеет вид

$$\Delta_{an} = \left(\frac{2\gamma}{\kappa}\right)^{2/3} z_n. \quad (\text{B.7})$$

В (B.6) и (B.7) положительные числа z_n — нули функции $\Phi(-z)$. При вычислении нормировочных коэффициентов в (B.3) и (B.6) использовано равенство

$$\int [\Phi(z)]^2 dz = z[\Phi(z)]^2 - [\Phi'(z)]^2, \quad (\text{B.8})$$

легко проверяемое с помощью уравнения для $\Phi(z)$: $\Phi''(z) - z\Phi(z) = 0$.

При немалых x для функции $\varphi_n(x)$ применимо квазиклассическое приближение ($x \gg x_0 > 0$):

$$\varphi_n(x) = \frac{D_n}{\sqrt[4]{\alpha_n v(x) - \varepsilon}} \times \exp \left\{ - \int_{x_0}^x \sqrt{\alpha_n v(t) - \varepsilon} dt \right\}. \quad (\text{B.9})$$

Здесь x_0 — нуль подкоренного выражения: $x_0 \approx \Delta_n/(2\gamma) \ll a$. Из «сшивки» (B.9) с (B.3) и (B.6) в области $x_0 \ll x \ll a$ находим коэффициент D_n :

$$D_n = \frac{1}{2} (2\gamma\kappa^2)^{1/6} B_n. \quad (\text{B.10})$$

При выводе (B.10) для $\Phi(z)$ использована асимптотика [1]

$$z \rightarrow +\infty: \quad \Phi(z) \approx \frac{1}{2z^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} z^{3/2} \right). \quad (\text{B.11})$$

При $x \rightarrow +\infty$ функция (B.9) принимает вид (13), где с учетом $\alpha_n \approx -\kappa^2$

$$u_n(+\infty) \approx \frac{1}{\kappa} \left(\frac{2\gamma}{\kappa}\right)^{1/6} \times B_n \exp \left\{ \kappa a \left(I_3 + \frac{\Delta_n}{2} I_4 \right) \right\}, \quad (\text{B.12})$$

$$I_3 = \frac{1}{a} \int_0^\infty [1 - \sqrt{1 - v(x)}] dx, \quad (\text{B.13})$$

$$I_4 = \frac{1}{a} \int_0^\infty \frac{v(x) dx}{\sqrt{1 - v(x)}}.$$

Здесь в качестве a можно выбрать, например, определенную в (18) величину. Для потенциала $v(x) = \exp(-2\gamma|x|)$ с учетом $a = 1/(2\gamma)$ находим

$$I_3 = 2(1 - \ln 2), \quad I_4 = 2.$$

Формулы (B.9)–(B.13) относятся как к четным, так и к нечетным состояниям.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
2. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
3. М. Rotenberg, *Ann. Phys.* **19**, 262 (1962).
4. С. В. Христенко, С. И. Ветчинкин, *Опт. и спектр.* **37**, 1017 (1974).
5. S. M. Blinder, *Phys. Rev. A* **29**, 1674 (1984).
6. Б. Я. Балагуров, *ЖЭТФ* **93**, 316 (1987).
7. Б. Я. Балагуров, *ЖЭТФ* **94**, 95 (1988).
8. И. И. Привалов, *Интегральные уравнения*, ОНТИ, М.–Л. (1935).
9. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, Наука, Москва (1992).
10. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1962).
11. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1974).
12. Г. Сегё, *Ортогональные многочлены*, Физматгиз, Москва (1962).