

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКМЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

## ФАЗОВЫЕ ФУНКЦИИ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ В ОПТИКЕ

*В.П. Крайнов, Л.П. Пресняков*

(Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.,  
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва)

(Статья поступила 12.04.93 г.)

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение (85).
  2. Фазовое уравнение в теории потенциального рассеяния (86).
  3. Распространение электромагнитных волн в неоднородных средах (89).
  4. Симметричный слой (89).
  5. Прохождение частицы через симметричный потенциальный барьер (90).
  6. Заключение (91).
- Список литературы (92).

**1. Введение.** Многие задачи квантовой механики и теории распространения электромагнитных волн, включая оптику, сводятся к решению одномерного стационарного волнового уравнения [1, 2]. Известно, что один из наиболее эффективных методов качественного исследования, основанный на представлении Лиувилля—Грина (1838 г.), был первоначально сформулирован в акустике и оптике, а затем приобрел свой современный вид в квантовой механике под названием квазиклассического (или ВКБ-) приближения (см., например, [3]). Целый ряд точно решаемых задач квантовой механики, в особенности связанных с прохождением частиц через потенциальные барьеры, тесно связан с аналогичными точными решениями оптических задач [1, 2], хотя физическая интерпретация одних и тех же итоговых формул естественным образом различается [4]. Характерным примером является так называемый неотражающий слой Эпштейна. В оптике равенство единице коэффициента прохождения интерпретируется как аналог просветления с помощью пластинки в четверть длины волны, сфазированный для всех длин волн. В квантовомеханических задачах о прохождении частицы над потенциальной ямой, имеющей один или несколько дискретных уровней, тот же эффект в данном случае объясняется квазирезонан-

сным рассеянием на дискретном уровне (замедлением движения частицы над ямой), приводящим к гашению отраженной волны [4]. С математической точки зрения эти задачи просто тождественны: отражение частицы над барьером (ямой) соответствует оптике прозрачных сред, подбарьерное прохождение — оптике плазмы с "холодными" электронами.

Вместе с тем в квантовой механике в течение весьма значительного времени развиваются эффективные методы, которые могут найти естественное применение в оптике. Одним из них является метод фазовых функций [5—8], с помощью которого наиболее просто исследуется задача о потенциальном рассеянии, причем количественно точные результаты достигаются весьма скромными вычислительными усилиями.

Цель настоящей заметки состоит в том, чтобы показать, каким образом задача о распространении электромагнитных волн в средах с вещественными значениями диэлектрической проницаемости (и, следовательно, задача о над- и подбарьерном прохождении) сводится к вычислению фазы потенциального рассеяния [9, 10]. При этом удастся не только получить такие интегральные характеристики, как коэффициенты прохождения и отражения, но и написать точное выражение для решения волнового уравнения при всех значениях координаты в виде квадратур, содержащих текущее значение фазы. Задача существенно упрощается для симметричного (по координате) слоя: в этом случае полный коэффициент отражения (прохождения) выражается только через разность асимптотических значений фаз, подобно тому, как элемент матрицы потенциального рассеяния — через асимптотическое значение фазы. Показано, что метод фазовых функций описывает

точно два противоположных предельных случая — коротковолновый предел и френелевское отражение — с помощью одной простой аналитической формулы. Ряд задач, важных для приложений, не имеет в настоящее время точных решений. Для одной из них — надбарьерное (подбарьерное) прохождение вблизи края барьера — мы приводим такое решение.

Дальнейшее изложение связано с решением дифференциального уравнения второго порядка

$$(d^2/dx^2 + p^2(x))y = 0. \quad (1)$$

В задачах квантовой механики

$$p^2 = (2m/\hbar^2)(E - U(x)) = k^2 - 2V(x), \quad (2)$$

где  $E$  и  $U$  — кинетическая и потенциальная энергии,  $m$  — приведенная масса частицы и  $\hbar$  — постоянная Планка. В задачах о распространении электромагнитных волн уравнение (1) описывает монохроматическую волну с линейной поляризацией перпендикулярно оси  $x$ :

$$p^2(x) = (\omega/c)^2 \epsilon(x, \omega) = k^2 \epsilon(x, \omega); \quad (3)$$

здесь  $\omega$  — частота,  $c$  — скорость света в вакууме,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость.

В обоих случаях (2), (3) волновое число связано с длиной волны (в вакууме) соотношением  $k = 2\pi/\lambda$ . В тех случаях, когда целесообразно отметить, что речь идет о радиальном уравнении Шрёдингера, мы будем использовать обозначение  $r$  для независимой переменной.

**2. Фазовое уравнение в теории потенциального рассеяния.** Приведем необходимые для нашего изложения выводы метода фазовых функций [5—8], ограничившись для простоты случаем  $s$ -рассеяния. Решение радиального уравнения Шрёдингера с  $k^2 \geq 0$  строится в виде

$$y(r) = \frac{A(r)}{k^{1/2}} \sin(kr + \delta(r)), \quad (4)$$

где  $y(r)$  — регулярное в начале координат решение, а функции  $A(r)$  и  $\delta(r)$  представляют собой текущие значения амплитуды и фазы. Для однозначного выделения двух функций наложим на производную решения (4) условие

$$y'(r) = k^{1/2} A(r) \cos(kr + \delta(r)), \quad (5)$$

что вместе с уравнением (1) приводит к отдельным уравнениям для амплитуды и фазы:

$$A'/A = (V(r)/k) \sin(2kr + 2\delta(r)), \quad (6)$$

$$\delta'(r) = -(2V(r)/k) \sin^2(kr + \delta(r)), \quad (7)$$

$$\delta(0) = 0.$$

Амплитудное уравнение (6) интегрируется элементарно, если известно решение фазового уравнения

(7), и граничное условие (в нуле) для амплитуды, в принципе, может быть любым. Элемент матрицы рассеяния и парциальная амплитуда выражаются посредством соотношения

$$S_\infty(k) = \exp(2i\delta(\infty)), \quad (8)$$

$$f_\infty = \frac{S_\infty(k) - 1}{2ik},$$

где  $\delta(\infty) = \delta(k; r \rightarrow \infty)$  — асимптотическое значение решения фазового уравнения (7). При выводе уравнений (6), (7) предполагается, что  $V(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ . Решение фазового уравнения (7) монотонно, если потенциал не меняет знака, убывает в поле отталкивания и возрастает в поле притяжения.

Замечательным свойством фазы  $\delta(r)$  является ее ступенчатое поведение при низкоэнергетическом рассеянии частицы над потенциальной ямой, в которой есть связанные состояния. Если в части ямы от начала координат (или от левой точки поворота) до значения  $r = r_1$  может "уместиться" связанное состояние, то в ближайшей окрестности этой точки фаза, оставаясь непрерывной, возрастает на величину  $\pi$ . Следующее такое возрастание имеет место в окрестности следующей точки  $r = r_2$ , соответствующей второму уровню в яме  $V(r \leq r_2)$ , и т.д. В пределе  $k \rightarrow 0$  асимптотическое значение фазы

$$\delta(k \rightarrow 0, r \rightarrow \infty) = \pi N, \quad (9)$$

где  $N$  — общее число уровней в яме (теорема Левинсона [7, 8]).

Обобщение уравнения (7) для случая орбитальных квантовых чисел  $l > 0$  [6] сохраняет все перечисленные свойства их решений. Соответствующее детальное исследование с многочисленными примерами содержится в монографиях Бабикова [7] и Калоджеро [8].

**3. Распространение электромагнитных волн в неоднородных средах.** Эта задача имеет другие, нежели в потенциальном рассеянии, граничные условия, в соответствии с которыми необходимо модифицировать подход. Будем считать диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(x, \omega)$  вещественной функцией и представим решение уравнения (1) в виде

$$y(x) = p^{-1/2} [a(x) \exp(-iS(x)) - b(x) \exp(iS(x))], \quad (10)$$

где классическое действие

$$S(x) = \int_{x_i}^x p(z) dz. \quad (11)$$

Подчинив производную  $y'$  условию

$$y'(x) = -ip^{1/2} [a(x) \exp(-iS(x)) + b(x) \exp(iS(x))], \quad (12)$$

получаем линейную систему дифференциальных уравнений первого порядка [11]

$$a'(x) = -q(x) \exp(2iS(x))b(x), \quad (13a)$$

$$b'(x) = -q(x) \exp(-2iS(x))a(x), \quad (13b)$$

где обозначено

$$q(x) = p'/2p = \epsilon'/4\epsilon. \quad (14)$$

Для вещественных значений  $x$  и  $p^2(x) \geq 0$  свойства симметрии данной системы ведут к закону сохранения потока

$$|a(x)|^2 - |b(x)|^2 = \text{const}, \quad (15)$$

где константа равна нулю в задаче о потенциальном рассеянии: модули амплитуд в падающей и отраженной волнах равны друг другу. В задаче о распространении волн мы будем использовать нормировку по проходящей волне (справа налево), что соответствует следующим начальным условиям в точке  $-x_0$  ( $-x_0 > -\infty$ ):

$$|a(-x_0)| = 1, \quad b(-x_0) = 0. \quad (16)$$

В этом случае константа в правой части соотношения (15) равна единице. В качестве новой независимой переменной введем функцию отражения

$$R(x) = b(x)/a(x); \quad (17)$$

она удовлетворяет уравнению Риккати [12]

$$R'(x) = -q(x) \exp(-2iS(x)) + q(x) \exp(2iS(x))R^2(x), \quad (18)$$

$$R(-x_0) = 0. \quad (19)$$

Получим теперь фазовое уравнение и выразим решение данной задачи через фазовую функцию. Отметим, что одно из частных решений уравнения (18) имеет вид

$$R^{(1)} = \exp(2i\theta(x)), \quad (20)$$

что приводит к следующему фазовому уравнению:

$$\theta'(x) = q(x) \sin(2S(x) + 2\theta(x)). \quad (21)$$

Естественным начальным условием является

$$\theta(x_1) = 0, \quad (22)$$

где  $x_1$  есть нижний предел в интеграле для эйконала (11), т.е. значение  $S(x_1) = 0$ . Это существенно при наличии точки поворота  $p^2(x_1) = 0$  и упрощает анализ во всех остальных случаях, для которых выбор точки  $x_1$  может быть произвольным.

По внешнему виду, а также и по ряду важных свойств (быстрая сходимости решений, отсутствие скачков фазы [9, 10]) фазовое уравнение (21) отличается от стандартного фазового уравнения (7). Однако подстановка

$$k \operatorname{tg}(S(x) + \theta(x)) = p(x) \operatorname{tg}(kx + \delta(x)) \quad (23)$$

приводит (21) к (7) и обратно. Таким образом, уравнение (21) является одной из форм фазовых уравнений теории потенциального рассеяния. Его коэффи-

циентами являются логарифмическая производная от показателя преломления ( $p(x) = kn(x) = k(\epsilon(x))^{1/2}$ ) и эйконал.

Решение уравнения для функции отражения (18), удовлетворяющее граничному условию (19), запишем в виде

$$R(x) = z^{-1}(x) + \exp(2i\theta(x)), \quad R(-x_0) = 0, \quad (24)$$

что при подстановке в (18) приводит к линейному дифференциальному уравнению первого порядка, разрешимому в квадратурах. Выполнив довольно простые вычисления, получаем

$$R(x) = -\frac{(\operatorname{sh} f(x) - iJ(x)) \exp(i\theta(x))}{(\operatorname{ch} f(x) + iJ(x)) \exp(-i\theta(x))} = \frac{b(x)}{a(x)}, \quad (25)$$

где

$$f(x) = \int_{x_0}^x q(u) \cos(2S(u) + 2\theta(u)) du, \quad (26)$$

$$J(x) = \exp(-f(x)) \times \int_{-x_0}^x \exp(2f(u)) q(u) \sin(2S(u) + 2\theta(u)) du. \quad (27)$$

При этом  $\theta$  является решением фазового уравнения (21). Функция отражения (25) записана в форме, где знаменателем является падающая (проходящая) волна, а числителем — отраженная. Для  $\epsilon(x) > 0$  из (25) легко получаем

$$|a(x)|^2 - |b(x)|^2 = 1$$

в соответствии с законом сохранения потока (15). Таким образом, фазовая функция  $\theta(x)$  позволяет получить полное описание решения волнового уравнения (1) в задаче о распространении электромагнитных волн в плоско-слоистых средах.

Фазовое уравнение типа (21) использовалось в математических работах [13], посвященных исследованию положения нулей частных решений линейных дифференциальных уравнений (1) с  $p^2(x) > 0$ . К тому же типу, что и (21), относится уравнение для тока в цепи, состоящей из последовательно соединенных сопротивления и сверхпроводника с туннельным контактом [14].

Точные аналитические решения фазовых уравнений (21) и (7) легко получить, когда диэлектрическая проницаемость (или потенциальная энергия) являются набором прямоугольных ям и барьеров, а также в случае  $\epsilon(x) = Dx^{-2}$ , где  $D$  — константа. При этом функции  $p^2(x) = k^2\epsilon(x)$  могут быть положительными, отрицательными или комплексными.

Поскольку функции  $\theta(x)$  (21) и  $\delta(x)$  (7) являются

фазами регулярных волновых функций в задаче о потенциальном рассеянии, то из определений (10) — (12) при  $|a(x)| = |b(x)|$  и (4), (5) следует

$$\theta(x) = \operatorname{arctg}(p(x)y(x)/y'(x)) - S(x), \quad (28)$$

$$\delta(x) = \operatorname{arctg}(ky(x)/y'(x)) - kx. \quad (29)$$

Таким образом, фаза  $\theta$  есть разность между точной фазой волновой функции и эйконалом (т.е. значением фазы в ВКБ-приближении), а фаза  $\delta$  содержит всё отличие от плоской волны. В тех случаях, когда решения уравнения (1) могут быть выражены в известных специальных функциях, формулы (28) и (29) позволяют получить точные значения фаз, что особенно важно в окрестности особых точек в комплексной плоскости. В остальных случаях уравнения (7) и (21) необходимо решать численными методами, что весьма просто в настоящее время.

Рассмотрим два предельных случая в задаче о распространении электромагнитных волн. В коротковолновом пределе,  $k \gg 1$ , естественно рассматривать диэлектрическую проницаемость как аналитическую функцию в комплексной плоскости  $z = x + iy$ . Хорошо известно [2], что коэффициент отражения в этом случае экспоненциально мал, и правильное значение показателя экспоненты следует непосредственно из уравнения Риккати (18) уже в первом приближении. Проблемой здесь является предэкспоненциальный множитель, который легко определяется только в случае изолированных особенностей. Так, при наличии лишь одного нуля порядка  $\alpha$  в  $z$ -плоскости,

$$p(z) \approx (z - z_0)^\alpha \text{ при } |z - z_0| \ll 1, \quad (30)$$

формула (25) с  $-x_0 = -\infty$ ,  $x = +\infty$  совместно с (28) приводит к следующему результату:

$$|R(+\infty)| = 2 \sin \frac{\pi\alpha}{2(1+\alpha)} \times \exp \left( -2 \operatorname{Im} \int_0^{z_0} p(z) dz \right), \quad (31)$$

что совпадает с известным результатом [7], являющимся обобщением формулы Покровского—Халатникова. В случае более чем двух особенностей функции  $p(z)$  (если их нельзя рассматривать изолированно) систематические строгие аналитические или численные результаты в настоящее время отсутствуют. Решение этой задачи будет рассмотрено нами в разделе 5.

В длинноволновом пределе  $k^{-1} \gg d_0$ , где  $d_0$  — характерное расстояние, на котором меняется показатель преломления, приходим к френелевскому отражению. Пусть диэлектрическая проницаемость имеет ступенчатое поведение

$$\begin{aligned} \varepsilon(x, k) &= \varepsilon_1 = \text{const при } x \leq x_i, \\ \varepsilon(x, k) &= \varepsilon_2 = \text{const при } x \geq x_i + \Delta x, \\ k(\varepsilon_1^{1/2} + \varepsilon_2^{1/2})\Delta x &\ll 1, \end{aligned}$$

т.е.

$$\int_{x_i}^{x_i + \Delta x} p \, dx \rightarrow 0,$$

и внутри интервала  $\Delta x$  производная функции  $p(x)$  существует и может быть сколь угодно большой по абсолютной величине. В этом случае фазовое уравнение (21) имеет вид

$$\theta'(x) = (p'/2p) \sin(2S(x_i) + 2\theta(x)), \quad (32)$$

а его точное решение равно

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(S(x_i) + \theta(x)) &= (p(x)/p(x_i)) \times \\ &\times \operatorname{tg}(S(x_i) + \theta(x_i)). \end{aligned} \quad (33)$$

Отсчитывая эйконал и фазу от  $x_i$  ( $S(x_i) = 0$ ,  $\theta(x_i) = 0$ ), получаем  $\theta(x_i + \Delta x) = 0$ . Тогда интеграл  $J$  (27) равен нулю, и коэффициент отражения (25) принимает вид

$$\begin{aligned} R(x_i + \Delta x) &= -\operatorname{th} \int_{x_i}^{x_i + \Delta x} \frac{p'(x)}{2p(x)} \, dx = \\ &= \frac{\varepsilon_1^{1/2} - \varepsilon_2^{1/2}}{\varepsilon_1^{1/2} + \varepsilon_2^{1/2}} = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}, \end{aligned} \quad (34)$$

что соответствует формуле Френеля для нормального падения. Существенно, что при данном выводе величина  $\theta(x)$  может быть как вещественной, так и комплексной.

Добавим еще одну ступеньку в диэлектрическую проницаемость:

$$\begin{aligned} \varepsilon(x, k) &= \varepsilon_3 \text{ при } x > x_f + \Delta x, \\ x_f - x_i &= l. \end{aligned}$$

При прохождении точки  $x_f$  приращение фазы (33) не равно нулю, поскольку  $S(x_f) \neq 0$ . Интеграл  $J$  в формуле (25) также не равен нулю для произвольных значений  $\varepsilon_2$  на отрезке  $l$ . Поскольку все результаты в случае двух (и более) ступенек по-прежнему выражаются в элементарном виде, можно непосредственно убедиться, что коэффициент отражения обращается в нуль,  $R(x_f + \Delta x) = 0$ , при выполнении двух условий

$$\varepsilon_2 = (\varepsilon_1 \varepsilon_3)^{1/2}, \quad 2\varepsilon_2^{1/2} kl = \pi(1 + 2N), \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

Второе условие обычно записывают в виде

$$l = (1 + 2N)\lambda_2/4,$$

где  $\lambda_2 = \lambda/n_2$  — длина волны в среде  $\varepsilon_2$ . Следовательно, мы имеем точное описание просветления оптики с помощью пластинки в четверть длины волны.

Интересно отметить, что приведенные здесь результаты [9–10] отличаются от результатов, полученных с помощью простой интерполяционной формулы [12] (см. также [2]), только точным значением предэкспоненциального множителя в формуле (31). Это является дополнительным свидетельством того, что фаза  $\theta$ , вообще не учтенная в [12], в большинстве случаев мала по сравнению с эйконалом.

Для симметричного слоя, когда  $\varepsilon(-x) = \varepsilon(x)$ , естественным началом отсчета для эйконала и фазы является точка  $x_1 = 0$ . В этом случае при прохождении всего слоя, т.е. на интервале  $[-x_0, x_0]$  ( $|x_0| \leq \infty$ ), интеграл (26) обращается в нуль, и формула (25) приобретает вид [10]

$$R(x_0) = \frac{iJ(x_0)}{1 + iJ(x_0)} \exp(2i\theta(x_0)), \quad (35)$$

где  $J(x_0)$  определяется интегралом (27) с верхним пределом  $x_0$ . Эта формула полезна для аналитических оценок, поскольку вблизи особых точек эйконала точные решения фазового уравнения (21) не подвержены явлению Стокса, характерному для асимптотических рядов метода ВКБ, получаемых вдали от особенностей [15]. Однако для симметричного слоя более интересным представляется следующий подход.

#### 4. Симметричный слой. Для симметричного слоя

$$\varepsilon(-x, k) = \varepsilon(x, k), \quad \varepsilon'(-x, k) = -\varepsilon'(x, k)$$

будем рассматривать отражение на интервале  $[-x_0, x_0]$  ( $|x_0| \leq \infty$ ) с начальным условием  $R(-x_0) = 0$ , а эйконал и фазу будем отсчитывать от начала координат. При этом эйконал (11) и фаза (21) являются нечетными функциями:

$$S(-x) = -S(x), \quad \theta(-x) = -\theta(x). \quad (36)$$

Вместе с (20) введем второе частное решение уравнения Риккати (18):

$$R^{(1)} = \exp(2i\theta(x)), \quad (37)$$

$$R^{(2)} = -\exp(2i\phi(x)),$$

и получим два независимых фазовых уравнения

$$\theta'(x) = q(x) \sin(2S + 2\theta), \quad \theta(0) = 0, \quad (38a)$$

$$\phi'(x) = -q(x) \sin(2S + 2\phi), \quad \phi(0) = 0, \quad (38b)$$

где

$$q = p'/2p = \varepsilon'/4\varepsilon,$$

решения которых различны при данных начальных условиях.

Функции  $R^{(1)}$  и  $R^{(2)}$  (37) являются отношениями частных решений системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка (13a) и (13b)

$$a_1 = m \exp(-i\theta), \quad b_1 = m \exp(i\theta), \quad (39a)$$

$$a_2 = n \exp(-i\phi), \quad b_2 = -n \exp(i\phi). \quad (39b)$$

Из системы (13) наряду с фазовыми уравнениями (38) следуют амплитудные уравнения

$$m' = -mq \cos(2S + 2\theta), \quad m(0) = 1, \quad (40a)$$

$$n' = nq \cos(2S + 2\phi), \quad n(0) = 1, \quad (40b)$$

решениями которых являются четные функции

$$m(-x) = m(x), \quad n(-x) = n(x). \quad (41)$$

Функция отражения имеет вид

$$R(x) = \frac{b(x)}{a(x)} = \frac{b_1(x) + Cb_2(x)}{a_1(x) + Ca_2(x)}, \quad (42)$$

где константа  $C$  определяется из начального условия

$$|a(-x_0)| = 1, \quad b(-x_0) = 0. \quad (43)$$

Для отражения от всего симметричного слоя простая алгебра приводит к результату [9]

$$R(x_0) = -i \sin(\theta(x_0) - \phi(x_0)) \times \\ \times \exp(i\theta(x_0) + i\phi(x_0)). \quad (44)$$

Соответствующий коэффициент прохождения равен

$$T(-x_0) = a(-x_0)/a(x_0) = \cos(\theta(x_0) - \phi(x_0)) \times \\ \times \exp(i\theta(x_0) + i\phi(x_0)). \quad (45)$$

Для прозрачных сред имеем

$$|R|^2 + |T|^2 = 1. \quad (46)$$

Представляют интерес два нетривиальных вывода. Во-первых, результаты задачи о распространении электромагнитных волн выражаются только через асимптотические значения фаз, как и в теории потенциального рассеяния. Во-вторых, коэффициент отражения равен нулю, если разность фаз

$$\theta(x_0) - \phi(x_0) = \pi N, \quad N = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots \quad (47)$$

Исследование фазовых уравнений (38) показывает [9,10], что их решения по абсолютной величине не превышают значения  $\pi/4$  в прозрачных средах, т.е.  $N = 0$  является единственным возможным значением. Значения  $N = \pm 1$  могут возникнуть при реализации оптических аналогов точек поворота  $\varepsilon \rightarrow 0$  и особенностей типа  $\varepsilon \rightarrow \infty$ .

Для анализа сходимости процедуры численного решения фазовых уравнений (38a) и (38b) коэффициент отражения вычислялся [9] по формуле (44) в случае полностью неотражающего слоя для всех значений  $k$  при  $x_0 \rightarrow \infty$ :

$$k^2 \varepsilon(x, k) = p^2(x) = k^2 + 2B[\text{ch}(\beta x)]^{-2}, \quad (48a)$$

$$B/\beta^2 = [(2N + 1)^2 - 1]/8, \quad N = 1, 2, 3 \dots \quad (48b)$$

Это так называемый симметричный слой Эпштейна [4]. Его квантовомеханическим аналогом является отражение частицы над ямой (48a) при наличии в ней дискретных уровней (48b) [1,4]. Результаты расчетов [9] показывают, что разность фаз (47) быстро и монотонно сходится к нулю при значениях безразмерного параметра  $x_0 \beta > 5$ . Таким образом,

только весь слой ( $x_0 \rightarrow \infty$ ) является неотражающим. Любая его конечная часть на ограниченном интервале  $(-x_0, x_0)$  имеет малое, но конечное отражение. Это малосущественно для приложений: при  $0,1 \leq k \leq 1$  и  $10 \leq x_0 \beta \leq 20$  коэффициент отражения от слоя, обрезанного в точках  $\pm x_0$ , не превышает  $10^{-5}$ .

Формулы (44), (45) вместе с фазовыми уравнениями (38) дают весьма простой способ решения прямых задач о распространении электромагнитных волн и надбарьерном отражении в симметричном случае.

**5. Прохождение частицы через симметричный потенциальный барьер.** С математической точки зрения эта задача эквивалентна задаче о распространении электромагнитных волн. В связи с современными приложениями [16] наибольший интерес представляет ситуация, когда кинетическая энергия частицы близка к высоте барьера. Это приводит к появлению двух близко расположенных нулей функции  $p^2(x)$  (2) — точек поворота на вещественной оси  $x$  при подбарьерном прохождении или двух комплексно сопряженных нулей при надбарьерном прохождении. Указанные нули  $p(x)$  сливаются, когда кинетическая энергия точно равна потенциальной. Для вычисления коэффициента прохождения при этом используется параболический слой ("перевернутый" линейный осциллятор) [4], который позволяет описать ситуацию с двумя близко расположенными и сливающимися нулями. При этом, если считать кинетическую энергию частицы заданной, приходится с неизбежностью обрезать параболический слой по высоте. На неудовлетворительность получаемых при этом результатов давно обращали внимание в оптике (см. [2]), в особенности для тонкого слоя (результаты предыдущего раздела показывают, что отражающий слой может оказаться весьма чувствительным и к процедуре обрезания слоя по ширине, и для получения точного результата необходимо взять достаточно широкий интервал  $(-x_0, x_0)$ ; в случае параболического слоя при заданной кинетической энергии это не представляется возможным). Суммируя сказанное, отметим, что как известное квазиклассическое решение Кембла [4, 15], так и метод эталонных уравнений с параболическим слоем [2, 4] дают значения для коэффициентов прохождения и отражения

$$|T|^2 = |R|^2 = 1/2, \quad (49)$$

если кинетическая энергия частицы равна высоте барьера. Известное точное решение задачи для симметричного барьера [1, 4]

$$p^2(x) = k^2 - 2B[\text{ch}(\beta x)]^{-2}, \quad (50)$$

демонстрирует, что результат (49) применим, если

$$k^2/\beta^2 = 2B/\beta^2 \gg 1, \quad (51)$$

т.е. при выполнении условий квазиклассичности движения.

Этот вывод связан с поведением функции

$$S(x) = \int^x p \, dx$$

в комплексной плоскости. При выполнении условий квазиклассичности аналитические особенности действия (эйконала), т.е. точки ветвления в нулях и полюсах функции  $p^2(z)$ , являются изолированными и их можно рассматривать по отдельности. Два сливающихся нуля (или полюса) еще преодолимы с помощью модификаций метода ВКБ [15, 17]. Именно этому случаю соответствует приближение параболического слоя. При наличии трех таких особенностей (две точки поворота и полюс в комплексной плоскости) метод ВКБ применим только в области квазиклассичности. Для большего количества близко расположенных особых точек квазиклассическое приближение неприменимо, а эталонные уравнения, разрешимые в известных специальных функциях, не существуют (гипергеометрическое уравнение Гаусса соответствует трем особым точкам [3, 4]).

Для исследования таких задач мы применим метод фазовых уравнений, которые будем решать численно. Предварительно отметим, что используемые в симметричном случае фазовые уравнения (38а) и (38б) в подбарьерной области имеют мнимые значения функции действия  $S(x)$  и фаз  $\theta(x)$  и  $\phi(x)$ , что несущественно для общего анализа, но ведет к определенным трудностям в численных расчетах. Принимая во внимание, что точки поворота  $p^2(x) = 0$  вообще не являются особыми точками исходного волнового уравнения (1), совершим замену фаз (23):

$$k \, \text{tg}(S(x) + \theta(x)) = p(x) \, \text{tg}(kx + \delta(x)), \quad (52a)$$

$$k \, \text{ctg}(S(x) + \phi(x)) = p(x) \, \text{ctg}(kx + \gamma(x)), \quad (52b)$$

т.е. перейдем к стандартным фазам потенциального рассеяния (7). Подставляя (52) в (38), получаем

$$\delta'(x) = -(2V(x)/k) \sin^2(kx + \delta(x)), \quad (53a)$$

$$\delta(0) = 0,$$

$$\gamma'(x) = -(2V(x)/k) \cos^2(kx + \gamma(x)), \quad (53b)$$

$$\gamma(0) = 0,$$

где

$$-2V(x) = p^2(x) - k^2, \quad k^2 > 0,$$

т.е. уравнения с вещественными коэффициентами во всей области определения, включая подбарьерное прохождение. Повторяя выкладки (39) — (43) с учетом (6), (7), приходим к выражениям для коэффициентов прохождения и отражения в случае

симметричного барьера

$$T(-x_0) = \cos(\delta(x_0) - \gamma(x_0)) \times \exp(i\delta(x_0) + i\gamma(x_0)), \quad (54)$$

$$R(x_0) = -i \sin(\delta(x_0) - \gamma(x_0)) \times \exp(i\delta(x_0) + i\gamma(x_0)), \quad (55)$$

причем

$$|R|^2 + |T|^2 = 1.$$

Отметим, что формулы (54), (55) эквивалентны результатам (44), (45), что следует, в частности, из анализа формул (28), (29).

Обсудим результаты демонстрационного расчета для потенциала

$$V(x) = V_0 d^2 / (x^2 + d^2).$$

Коэффициент уравнения (1) равен

$$p^2(x) = k^2 - 2V_0 d^2 / (x^2 + d^2)^{-1} \quad (56)$$

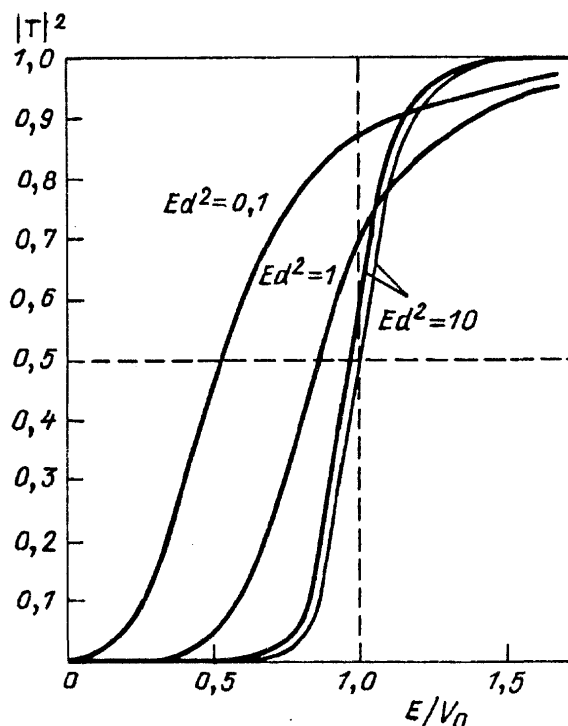
и имеет четыре особые (для метода ВКБ) точки: полюсы  $x_p = \pm id$  и нули  $kx_i = \pm(2V_0 - k^2)^{1/2}d$ , лежащие на действительной оси при подбарьерном прохождении и на мнимой — в надбарьерной области. Когда кинетическая энергия равна высоте барьера, нули сливаются в начале координат.

Фазовые уравнения (53), не имеющие особенностей, решались методом Рунге—Кутты. Результаты расчета для коэффициента прохождения на бесконечном интервале ( $x_0 \rightarrow \infty$ ) приведены на рисунке. Видно, что даже при весьма больших значениях параметра  $ka(V_0/E) \gg 1$  формула Кембла для подбарьерной области и выхода на край барьера

$$|T|^2 = \left[ 1 + \exp \left( 2 \operatorname{Im} \int_{-x_i}^{x_i} p(x) dx \right) \right]^{-1}, \quad (57)$$

совпадающая по результатам с моделью параболического слоя [3, 4, 17], заметно занижает точное значение. Сказанное относится и к надбарьерному случаю, где приближение Кембла и решение эталонного уравнения также имеют хорошо известную форму [2, 3, 4, 17], которую мы не будем приводить. При меньших энергиях модельные приближения описывают точные результаты только в двух предельных случаях  $|T|^2 \rightarrow 0$  и  $|T|^2 \rightarrow 1$ , существенно отличаясь от них в остальной области, включая выход на край барьера,  $k^2 \approx 2V_0$ . Отметим, что в этой области точные значения всегда больше вычисленных в приближении Кембла.

Отметим, что в барьерных задачах каких-либо скачков фаз, аналогичных установленным теоремой Левинсона не наблюдается, что весьма упрощает прямые численные расчеты.



Зависимость коэффициента прохождения потенциального барьера (56) от энергии частицы  $E$ , отнесенной к высоте барьера  $V_0$ , при различных значениях  $Ed$ . Тонкая линия — результат расчета по формуле Кембла (57)

**6. Заключение.** Проведенное рассмотрение указывает на перспективность применения метода фазовых функций в нетрадиционных для него областях. Способ такого применения весьма прост: задачи, связанные с решениями линейных дифференциальных уравнений второго порядка, сводятся к задаче о потенциальном рассеянии, для которой формулируется фазовое уравнение, легко разрешимое численными методами. Формы фазовых уравнений могут быть различными, однако все они связаны между собой тождественными преобразованиями, которые просто следуют из условия непрерывности логарифмической производной решения исходного уравнения. Фазовые уравнения являются частным случаем уравнений типа Риккати, к которым сводится исходное линейное дифференциальное уравнение. Нелинейные уравнения вообще более информативны в данном случае: они позволяют установить общий вид искомого решения, который весьма устойчив по отношению к изменениям физических параметров. На основе изложенного здесь подхода могут быть рассмотрены распространение электромагнитных волн в поглощающих (или усиливающих) средах, а также барьерные задачи с комплексным потенциалом.

Один из авторов (Л.П.) глубоко благодарен В.Л. Гинзбургу и И.И. Собельману за интерес к работе в данном направлении и стимулирующие обсуждения.

Оба автора признательны участникам семинаров, руководимых В.Л. Гинзбургом, И.Л. Фабелинским и Н.Б. Делоне, за конструктивные дискуссии.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
2. *Гинзбург В.Л.* Распространение электромагнитных волн в плазме. М.: Наука, 1967.
3. *Олвер Ф.* Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990.
4. *Морс Ф., Фейнбах Г.* Методы теоретической физики. Т. 2. Пер. с англ. М.: ИЛ, 1960.
5. *Morse P.M., Allis W.P.* Phys. Rev. 1933, 44, 269.
6. *Друкарёв Г.Ф.* ЖЭТФ. 1949, 19, 247.
7. *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике 2-е изд. М.: Наука, 1976.
8. *Калоджеро Ф.* Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния: Пер. с англ. М.: Мир, 1972.
9. *Presnyakov L.P.* Phys. Rev. 1991, A44, 5636.
10. *Пресняков Л.П.* Тр. ФИАН. 1992, 215, 212.
11. *Bremmer H.* Physics 1949, 15, 247.
12. *Пресняков Л.П., Собельман И.И.* Радиофизика 1965, 8, 54.
13. *Makai E.K* Compos. math. 1936, 6, 368; Annali Pisa. 1941, 10, 123.
14. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Статистическая физика. М. Наука, 1978. С. 246.
15. *Фрёман Н., Фрёман П.У.* ВКБ-приближение: Пер. с англ. М.: Мир, 1967.
16. *Delone N.B., Krainov V.P., Suran V.V.* Laser Phys. 1992, 2, 815
17. *Froman N., Froman P.O.* Phys. Rev. 1991, A43, 3563.