

Лекция 1

Квазиклассическое приближение

1 Квазиклассическое разложение уравнения Шредингера

Прежде всего займемся вопросом соответствия между квантовой и классической механикой. Очевидно, что переход к классическому пределу означает ни что иное, как предельный переход $\hbar \rightarrow 0$.

Очевидно, чтобы сделать это в уравнении Шредингера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{x}) \right) \Psi(t, \mathbf{x}) \quad (1)$$

2(здесь m — масса частицы, а \mathbf{x} — ее координата) необходимо правильно учесть зависимость волновой функции $\Psi(t, \mathbf{x})$ от \hbar . Иначе мы получим абсурдный ответ.

С этой целью перепишем волновую функцию в виде

$$\Psi = \exp \left(\frac{i}{\hbar} S(t, \mathbf{x}) \right), \quad (2)$$

где неизвестная пока функция $S(t, \mathbf{x})$ имеет размерность действия. Отметим, что если $S(t, \mathbf{x})$ не пропадает в классическом пределе, то согласно (2) волновая функция является неаналитической функцией \hbar . В результате она начинает быстро осциллировать при стремлении \hbar к 0 и теряет смысл в предельном переходе.

При подстановке (2) в уравнение Шредингера (1) получим

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S. \quad (3)$$

Очевидно, что это уравнение уже допускает переход к классическому пределу посредством устранения в его правой части постоянной Планка к нулю. Следовательно функцию $S(t, \mathbf{x})$ можно разложить в ряд по степеням $\frac{\hbar}{i}$

$$S(t, \mathbf{x}) = S_0(t, \mathbf{x}) + \frac{\hbar}{i} S_1(t, \mathbf{x}) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 S_2(t, \mathbf{x}) + \dots \quad (4)$$

Здесь множитель $\frac{1}{i}$ введен для удобства. Затем подставим (4) в (3) и в левой и правой частях полученного уравнения приравняем друг к другу множители при одинаковых степенях \hbar

$$-\frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + U \quad (5)$$

$$-\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{1}{m} \nabla S_0 \nabla S_1 + \frac{\Delta S_0}{2m}. \quad (6)$$

¹Размерная величина не может считаться хорошим параметром разложения, т.к. всегда можно выбрать такую систему единиц, когда она не будет малой. Поэтому строго говоря мы должны ввести соответствующий безразмерный параметр разложения. Таковым очевидно может считаться в нашей задаче отношение постоянной Планка к классическому действию. В приведенном разложении соответствующая степень классического действия “спрятана” в коэффициентах разложения S_n .

Такое разложение называют *квазиклассическим*.

Квазиклассическое разложение позволяет сформулировать регулярный метод решения уравнения Шредингера, который называют *методом квазиклассического разложения* или *методом Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна* (сокращенно — метод ВКБ).

2 Волновая функция в квазиклассическом приближении

Из уравнения (5) видно, что, если $S_0(t, \mathbf{x})$ рассматривать как классическое действие, то в нулевом порядке мы получим классическое уравнение Гамильтона–Якоби. В некотором смысле здесь нет ничего удивительного, т.к. мы фактически повторили “в обратном порядке” рассуждения, которые использовали ранее при обосновании уравнения Шредингера. Новое, что мы здесь получили, это уравнение (6), смысл которого мы сейчас обсудим более подробно.

С этой целью определим классический импульс частицы и ее скорость. Согласно классической механике они определяются как

$$\mathbf{p} = \nabla S_0(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{v} = \frac{1}{m} \nabla S_0(t, \mathbf{x}). \quad (7)$$

Теперь умножим правую и левую части уравнения (6) на плотность вероятности нахождения частицы в данном месте пространства в момент времени t

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \exp(2S_1(t, \mathbf{x})). \quad (8)$$

После некоторых преобразований с использованием (7) получим, что уравнение (6) сведется к уравнению непрерывности

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \operatorname{div}(\mathbf{v}\rho). \quad (9)$$

Таким образом оказывается, что плотность вероятности перемещается со скоростью классической частицы и по ее классической траектории.

Для того, чтобы упростить дальнейшие рассуждения, ограничимся рассмотрением случая стационарного состояния с энергией E . Тогда волновая функция может быть представлена в виде

$$\Psi(t, \mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \quad (10)$$

и для функции $S(t, \mathbf{x})$ имеем

$$S(t, \mathbf{x}) = \tilde{S}(\mathbf{x}) - Et, \quad (11)$$

а ВКБ-разложение не будет содержать времени явным образом

$$\tilde{S}(\mathbf{x}) = \tilde{S}_0(\mathbf{x}) + \frac{\hbar}{i}\tilde{S}_1(\mathbf{x}) + \dots \quad (12)$$

Уравнения (5) и (6) при этом перейдут в

$$E = \frac{1}{2m}(\nabla \tilde{S}_0)^2 + U, \quad (13)$$

$$0 = \nabla \tilde{S}_0 \nabla \tilde{S}_1 + \frac{1}{2} \Delta \tilde{S}_0. \quad (14)$$

Из первого уравнения можно найти функцию \tilde{S}_0 , затем ее подставить во второе уравнение и определить \tilde{S}_1 . Далее, в принципе, эту процедуру можно продолжить для более высоких членов ВКБ-разложения.

Рассмотрим более подробно процедуру решения уравнений (13) и (14) на примере одномерного движения. В этом случае (13) сводится к

$$E = \frac{1}{2m} \left(\frac{d\tilde{S}_0}{dx} \right)^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U \quad (15)$$

откуда получаем классическое выражение для импульса частицы

$$\frac{d\tilde{S}_0}{dx} = p(x) = \pm \sqrt{2m(E - U)} = \pm q(x). \quad (16)$$

Соответственно,

$$\tilde{S}_0 = \pm \int_{x_0}^x q(y) dy = \pm \int_{x_0}^x \sqrt{2m(E - U(y))} dy \quad (17)$$

Подставляя (16) в (14), получаем следующее выражение для \tilde{S}_1 :

$$\frac{d\tilde{S}_1}{dx} = -\frac{1}{2q} \frac{dq}{dx} \quad (18)$$

$$\tilde{S}_1 = -\frac{1}{2} \int \frac{dq}{q} = -\frac{1}{2} \ln q + \ln C. \quad (19)$$

Таким образом находим волновую функцию с точностью до членов порядка \hbar^2 :

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{q(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy \right\} + \frac{C_2}{\sqrt{q(x)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy \right\}. \quad (20)$$

Важно, что в классическом случае импульс частицы всегда действителен. Это, согласно (16), означает, что классически дозволённой областью является область, когда $E > U(x)$. При этом волновую функцию (20) всегда можно записать в виде осциллирующей функции

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{q}} \sin \left(\int_{x_0}^x k(y) dy + \varphi_0 \right), \quad (21)$$

$$k(y) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(y)]}. \quad (22)$$

Множитель $\frac{1}{\sqrt{q}}$ означает, что вероятность обнаружить частицу в малом объеме возле точки x обратно пропорциональна скорости частицы v . Существенно новым, по сравнению с классической механикой, является то, что (20) допускает существование волновой функции, а, следовательно, и ненулевой вероятности существования частицы вне классически дозволённой области $E < U(x)$. При этом импульс становится чисто мнимым, а волновая функция имеет вид экспоненциально убывающей функции. Особый смысл имеют точки $U(x) = E$. Их называют *точками поворота*, т.к. в них классическая частица отталкивается и начинает движение в обратном направлении. При этом $q = 0$ и полученное выражение (20) для волновой функции становится бесконечным. Это объясняется тем, что в малой окрестности точки поворота ВКБ-разложение становится неприменимым. Чтобы в этом убедиться рассмотрим подробно границу применимости квазиклассического приближения.

3 Условия применимости квазиклассического приближения

Из уравнения (3) видим, что S переходит в классическое действие, если считать, что

$$(\nabla \tilde{S}_0)^2 \gg \hbar |\Delta \tilde{S}_0|. \quad (23)$$

Отсюда получаем

$$|\mathbf{p}|^2 \gg \hbar \operatorname{div} \mathbf{p}. \quad (24)$$

Для одномерного движения это условие сводится к

$$1 \gg \frac{\hbar \left| \frac{dp}{dx} \right|}{p^2} = \frac{\left| \frac{dk}{dx} \right|}{k^2} = \frac{d\lambda}{dx}, \quad (25)$$

где λ длина волны де-Бройля деленная на 2π .

Если a характерный размер системы, то можно считать $\frac{d\lambda}{dx} \approx \frac{\lambda}{a}$ и мы получаем, что длина волны должна быть намного меньше характерных размеров системы. Это, в свою очередь, означает, что импульс частицы должен быть достаточно большим. Чтобы придать последнему утверждению качественную оценку, рассмотрим одномерное движение и перепишем (24) вводя в правой части явное выражение для импульса через энергию и потенциал:

$$|p|^3 \gg \hbar m \left| \frac{dU}{dx} \right|. \quad (26)$$

Это означает, что градиенты потенциала должны быть малы. Отсюда, в частности, следует, что в точках поворота квазиклассическое разложение становится неприемлемым.

Рассмотрим также другую запись этого условия, которое нам пригодится далее. Подставляя в (26) явное выражение для импульса и разлагая потенциал в ряд возле точки поворота x_0

$$U(x) \approx E - F(x - x_0), \text{ где } F = - \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=x_0} \quad (27)$$

получим

$$r \equiv |x - x_0| \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m|F|} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (28)$$

4 “Сшивка” волновой функции в точках поворота. Случай финитного движения

Практическую ценность метод ВКБ будет иметь тогда, если нам удастся плавно связать решения осциллирующее и экспоненциальное в точках поворота.

Одним из способов решения проблемы является явное решение уравнения Шредингера вблизи точек поворота и дальнейшая “сшивка” решений квазиклассического разложения через эти решения.

Пусть потенциал $U(x)$ имеет вид, изображенный на Рис. 1, где x_0 и x_1 — точки поворота, т.е. классически разрешенная зона находится между точками поворота. Такой

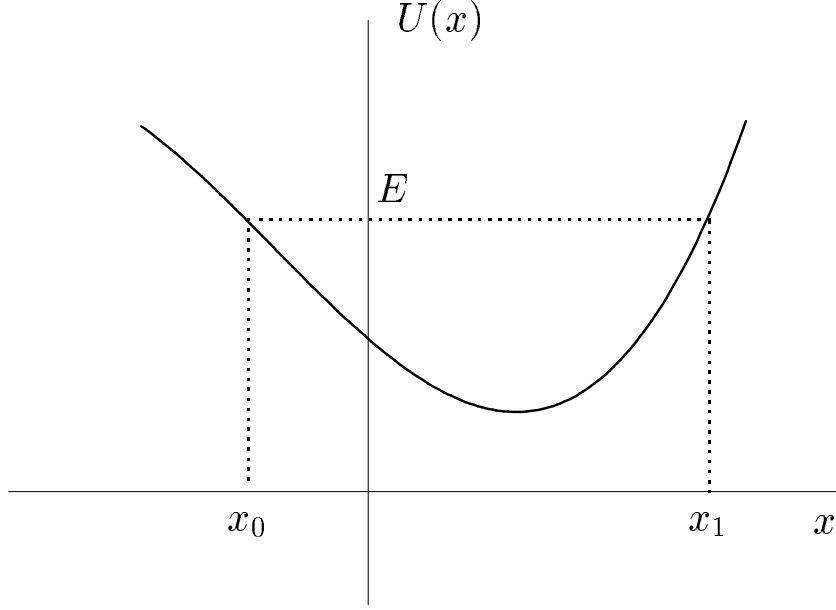


Рис. 1: Классически разрешенная зона находится между точками поворота x_0 и x_1 .

случай соответствует финитному движению частицы. Нормированная волновая функция при этом есть

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_0}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right\} & \text{при } x < x_0 \\ \frac{A}{\sqrt{q(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy + \varphi_0 \right\} & \text{при } x_0 < x < x_1 \\ \frac{C_1}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy \right\} & \text{при } x > x_1 \end{cases} \quad (29)$$

Отметим, что решение внутри классически разрешенной зоны можно было записать и иным образом

$$\psi(x) = \frac{A'}{\sqrt{q(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} q(y) dy + \varphi_1 \right\} \quad \text{при } x_0 < x < x_1. \quad (30)$$

Преобразуем (30) с тем, чтобы выразить его через соответствующее выражение формулы (29)

$$\begin{aligned} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} q(y) dy + \varphi_1 \right\} &= -\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x -\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} -\varphi_1 + \varphi_0 - \varphi_0 \right\} = \\ &= -\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x + \varphi_0 - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} -\varphi_0 - \varphi_1 \right\} = -\sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x + \varphi_0 + \varphi \right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

где введено следующее обозначение $\varphi \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} q(y) dy - \varphi_0 - \varphi_1$. Для того, чтобы это решение было тождественно решению (29), необходимо потребовать, чтобы

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} q(y) dy = n'\pi - \varphi_0 - \varphi_1 \text{ и } A = (-1)^{n'+1} A'. \quad (32)$$

Вводя интеграл по периоду классического движения², перепишем (32) в виде

$$\frac{1}{2\hbar} \oint p(y) dy = n'\pi - \varphi_0 - \varphi_1. \quad (33)$$

Займемся теперь "сшивкой" решений в области точки поворота x_0 . Для этого произведем разложение (27) для потенциала вблизи этой точки

$$U \approx E - F(x - x_0). \quad (34)$$

В результате уравнение Шредингера преобразуется к

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho \right) \varphi(\rho) = 0, \quad (35)$$

где введены такие обозначения

$$\rho = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} (x_0 - x) \text{ и } \varphi(\rho) = \psi(x). \quad (36)$$

При этом, используя условие (28) получаем, что области, где справедливо квазиклассическое приближение, соответствуют значения $|\rho| \gg 1$. Таким образом, чтобы связать решение уравнения (35) с решением получаемым в квазиклассическом приближении, необходимо найти решения уравнения (35). Такие решения известны и называются функциями Эйри³. Одна из пар независимых решений следующая

$$\varphi(\rho) = C \text{Ai}(\rho) \text{ и } \varphi(\rho) = C \text{Bi}(\rho) \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} \text{Ai}(\rho) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos \left(\frac{z^3}{3} + \rho z \right) dz \\ \text{Bi}(\rho) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[\exp \left(-\frac{z^3}{3} + \rho z \right) + \sin \left(\frac{z^3}{3} + \rho z \right) \right] dz. \end{aligned} \quad (38)$$

При $\rho \rightarrow \pm\infty$ асимптотическое поведение функций Эйри есть

$$\begin{aligned} \text{Ai}(\rho) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{2\sqrt[4]{\rho}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}} \right\} & \text{при } \rho \rightarrow +\infty \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \sin \left\{ \frac{2}{3} |\rho|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right\} & \text{при } \rho \rightarrow -\infty \end{cases} \\ \text{Bi}(\rho) &\approx \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{\rho}} \exp \left\{ \frac{2}{3} \rho^{\frac{3}{2}} \right\} & \text{при } \rho \rightarrow +\infty \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \cos \left\{ \frac{2}{3} |\rho|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \right\} & \text{при } \rho \rightarrow -\infty \end{cases} \end{aligned} \quad (39)$$

В свою очередь, вблизи точки x_0 квазиклассические решения, записанные через переменную ρ , имеют следующий вид:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_0}{\sqrt[4]{\rho}} \left[\frac{1}{2\hbar m F} \right]^{\frac{1}{6}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} |\rho|^{\frac{3}{2}} \right\} & \text{при } x < x_0 \\ \frac{A}{\sqrt[4]{-\rho}} \left[\frac{1}{2\hbar m F} \right]^{\frac{1}{6}} \sin \left\{ \frac{2}{3} |\rho|^{\frac{3}{2}} + \varphi_0 \right\} & \text{при } x > x_0. \end{cases} \quad (40)$$

²Очевидно, что импульс считается положительным при движении от точки x_0 к точке x_1 и отрицательным при движении в обратном направлении.

³См. Справочник по специальным функциям, под ред. М. Абрамовиц и И. Стиган, М."Наука", 1979 г.

Очевидно, что для того, чтобы плавно “сшить” эти решения с (39), необходимо это сделать через функцию Эйри $\text{Ai}(\rho)$ (которая убывает при $\rho \rightarrow +\infty$) и при этом положить

$$C_0 = \frac{1}{2}A \text{ и } \varphi_0 = \frac{\pi}{4}. \quad (41)$$

Теперь разложим потенциал вблизи точки поворота x_1

$$U \approx E + F(x - x_1) \quad (42)$$

и вводя переменную $\rho_1 = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x - x_1)$ приведем уравнение Шредингера к виду

$$\left(\frac{d^2}{d\rho_1^2} - \rho_1\right)\varphi(\rho_1) = 0. \quad (43)$$

Далее для классически допустимой области воспользуемся волновой функцией (30) и повторим все последующие рассуждения, которые были сделаны выше. В результате получим

$$C_1 = \frac{1}{2}A', \quad \varphi_1 = \frac{\pi}{4}. \quad (44)$$

Тогда условие (33) примет вид

$$\frac{1}{2\hbar} \oint p(y)dy = \left(n' - \frac{1}{2}\right)\pi = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \text{ где } n = n' + 1 \quad (45)$$

и с учетом соотношения между константами A и A' (32) волновая функция примет вид

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{2\sqrt[4]{2m[U(x) - E]}} \exp\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y) - E]}dy\right\} & \text{при } x < x_0 \\ \frac{A}{\sqrt{|p(x)|}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(y)|dy + \frac{\pi}{4}\right\} & \text{при } x_0 < x < x_1 \\ (-1)^n \frac{A}{2\sqrt[4]{2m[U(x) - E]}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y) - E]}dy\right\} & \text{при } x > x_1 \end{cases} \quad (46)$$

Условие (45) определяет стационарные состояния частицы и соответствует *правилу квантования Бора–Зоммерфельда*. Квантовое число n определяет число узлов волновой функции между точками поворота. Квазиклассическое приближение справедливо лишь на расстояниях, когда между точками поворота укладывается несколько длин волн. Иными словами, ВКБ-разложение справедливо при больших значениях n . Постоянная A фиксируется условием нормировки волновой функции.

5 Случай инфинитного движения. Туннельный эффект

Рассмотрим теперь квантовую частицу, находящуюся в потенциале изображенном на Рис. 2. При этом будем полагать, что энергия частицы E меньше максимального значения потенциала U_{max} . В классическом случае такая частица совершает инфинитное движение, однако она не может перейти из области $x < x_0$ в область $x > x_1$ и наоборот.

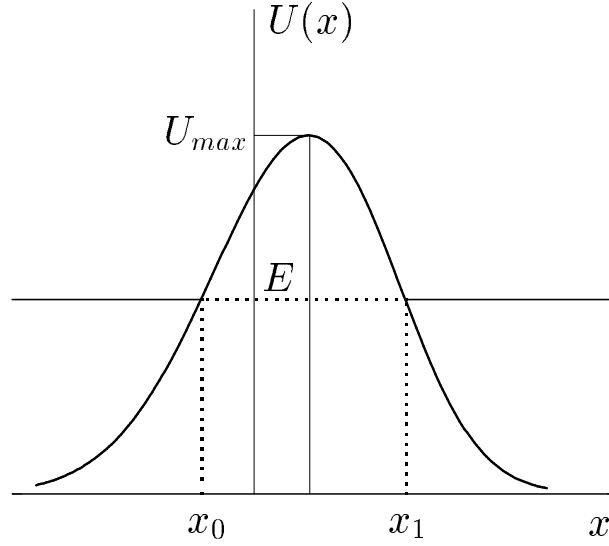


Рис. 2: Классически разрешенная область лежит либо слева от точки поворота x_0 , либо справа от точки поворота x_1 .

Как мы знаем из курса “Квантовая физика”, в квантовом случае ситуация иная и частица может туннелировать из одной области в другую. Сейчас мы посмотрим как это явление может быть описано с помощью метода ВКБ.

Для определенности будем считать, что частица падает на потенциал из точки $x \rightarrow -\infty$. Будем также считать, что потенциал пропадает достаточно быстро на бесконечности: $U(-\infty) = U(\infty) = 0$. В этом случае при $x \rightarrow +\infty$ будет распространяться плоская волна

$$\psi_{\text{асим.}}(x) = N_{\text{прош.}} \exp\{+ikx\}, \text{ где } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (47)$$

На основании метода ВКБ можно записать общее выражение для волновой функции

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_0}{\sqrt{q(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} q(y) dy} + \frac{C'_0}{\sqrt{q(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} q(y) dy} & x < x_0 \\ \frac{A}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy} + \frac{A'}{\sqrt[4]{2m[U(x)-E]}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \sqrt{2m[U(y)-E]} dy} & x_0 < x < x_1 \\ \frac{C_1}{\sqrt{q(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x q(y) dy} + \frac{C'_1}{\sqrt{q(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^x q(y) dy} & x > x_1 \end{cases} \quad (48)$$

Для того, чтобы удовлетворить условию (47) необходимо положить $C'_1 = 0$. Действительно, в этом случае для фазы при $x \rightarrow \infty$ имеем

$$\varphi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x q(y) dy = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x [q(y) - \hbar k] dy - k(x_0 - x) \rightarrow \varphi_0 + kx, \quad (49)$$

где

$$\varphi_0 = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{\infty} [q(y) - \hbar k] dy - kx_0 \quad (50)$$

конечно (здесь мы учли то обстоятельство, что потенциал достаточно быстро убывает на бесконечности).

Теперь для того, чтобы плавно связать функции в точке x_1 необходимо использовать обе функции Эйри. Вводя переменную $\rho = \left(\frac{2Fm}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(x_1 - x)$ видим, что волновая функция вблизи точки поворота x_1 справа (т.е. при этом $\rho < 0$) имеет вид

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx \frac{C_1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{i\zeta} = \\ &= \frac{C_1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left[\cos\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) + i \sin\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \\ &\approx \sqrt{\pi} C_1 \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} [\text{Bi}(\rho) + i \text{Ai}(\rho)],\end{aligned}\quad (51)$$

где мы ввели обозначение $\zeta \equiv \frac{2}{3}|\rho|^{\frac{3}{2}}$. Отсюда используя асимптотику функций Эйри (39) получим, что слева от точки поворота x_1 ($\rho > 0$) волновая функция есть

$$\psi(x) \approx \frac{C_1}{\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \left(e^{\zeta} + \frac{i}{2} e^{-\zeta} \right). \quad (52)$$

В свою очередь, из (48) получаем

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} (A e^{\zeta} + i A' e^{-\zeta}), \quad (53)$$

и следовательно необходимо положить

$$A = e^{-i\frac{\pi}{4}} C_1 \text{ и } A' = \frac{i}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} C_1. \quad (54)$$

Тогда в области $x_0 < x < x_1$ волновую функцию можно переписать в виде

$$\psi(x) = e^{i\frac{\pi}{4}} \frac{C_1}{2} \frac{1}{\sqrt[4]{2m[U(x) - E]}} \left[e^{-L + \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y) - E]} dy} - 2i e^{L - \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \sqrt{2m[U(y) - E]} dy} \right], \quad (55)$$

где использовано следующее обозначение

$$L = \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[U(y) - E]} dy. \quad (56)$$

Теперь вблизи точки x_0 справа ($\rho \equiv \left(\frac{2Fm}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}(x - x_0) > 0$) волновая функция (55) запишется:

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx \frac{C_1}{2\sqrt[4]{\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{i\frac{\pi}{4}} (e^{-L+\zeta} - 2i e^{L-\zeta}) \approx \\ &\approx \frac{C_1}{2} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{\pi} [e^{-L} \text{Bi}(\rho) - 4i e^L \text{Ai}(\rho)].\end{aligned}\quad (57)$$

Тогда можно продлить эту волновую функцию в область вблизи точки x_0 слева ($\rho < 0$). В результате в этой области имеем

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx \frac{C_1}{2\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} e^{i\frac{\pi}{4}} \left[e^{-L} \cos\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) - 4i e^L \sin\left(\zeta + \frac{\pi}{4}\right) \right] = \\ &= \frac{C_1}{4\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F}\right)^{\frac{1}{6}} [i e^{i\zeta} (e^{-L} - 4e^L) + e^{-i\zeta} (e^{-L} + 4e^L)].\end{aligned}\quad (58)$$

Теперь распишем (48) в области вблизи точки x_0 слева

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt[4]{-\rho}} \left(\frac{1}{2\hbar m F} \right)^{\frac{1}{6}} \left(C_0 i e^{i\zeta} + C'_0 e^{-i\zeta} \right). \quad (59)$$

Сравнивая (58) с (59) получим

$$C_0 = i \frac{C_1}{4} (e^{-L} - 4e^L) \text{ и } C'_0 = \frac{C_1}{4} (e^{-L} + 4e^L). \quad (60)$$

Теперь рассчитаем коэффициент прохождения через барьер

$$D = \frac{|C_1|^2}{|C'_0|^2} = \frac{e^{-2L}}{\left(1 + \frac{1}{4}e^{-2L}\right)^2}. \quad (61)$$

Если барьер достаточно широкий, то экспонентой в знаменателе можно пренебречь, и для коэффициента прохождения получим

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[U(y) - E]} dy \right\}. \quad (62)$$

Соответственно коэффициент отражения есть $1 - D$.