

УДК 530.145

ВЫСОКОТОЧНОЕ РАССМОТРЕНИЕ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОСТОЯННЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ, ИЗ СТЕПЕННОГО СИНГУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Т.А. ИШХАНЫАН^{1,2,3}, А.А. АРУТЮНЯН³, В.А. МАНУКЯН³,
А.М. ИШХАНЫАН^{3,4*}

¹Université de Bourgogne Franche-Comté, Dijon, France

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

³Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак, Армения

⁴Российско-Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: aishkhanyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 12 марта 2018 г.)

Проанализирована индуцированная слабым электростатическим полем туннельная ионизация частицы, находящейся в связанном состоянии в поле притяжения одномерного сингулярного потенциала, который изменяется в пространстве по степенному закону. Предложено высокоточное приближение, применимое для общего случая недробного показателя степени.

1. Введение

Туннелирование через барьер является базовым неклассическим явлением, обсуждаемым с первых дней зарождения квантовой механики [1–10]. В настоящее время оно воспринимается как общий физический феномен, который проявляется во многих областях фундаментальной и прикладной науки, таких как квантовая биология, физика полупроводников и сверхпроводимости, аттосекундная физика, физика ядерного синтеза в звездах и даже ранняя космология Вселенной [11]. Это явление имеет важные применения в современных технологиях, таких как сканирующая туннельная микроскопия [12], квантовые компьютеры [13], флэш-память [14], джозефсоновские переходы [15] и туннельные диоды [16].

Туннельная ионизация является частным примером туннелирования, широко изученного многими авторами как теоретически, так и экспериментально. Это процесс, когда электрон атома (молекулы) преодолевает потенциальный барьер и покидает атом (молекулу). В упрощенном полуклассическом представлении скорость ионизации задается как полный ток вероятности через внешнюю

классическую точку поворота потенциала. Первое рассмотрение такого рода было проведено Оппенгеймером и Ланцосом, которые изучили ионизацию атома водорода в электростатическом поле [3,4]. Впоследствии был рассмотрен ряд иных видов как связующих, так и ионизирующих потенциалов, при этом заслуживающей быть названной в первую очередь является плодотворная работа Келдыша [17], в которой обсуждается возможность ионизации переменным электрическим полем, сходным с излучением оптического лазера.

В настоящей работе мы вновь рассматриваем туннельную ионизацию, индуцированную слабым электростатическим полем с потенциалом $V_e = -Fx$, $F > 0$, частицы, связанной в одномерном сингулярном степенном потенциале $V_b = -V_0 / x^{1/k}$, $V_0 > 0$. Электрическое поле деформирует связующий потенциал и делает туннельную ионизацию возможной. Для изучения проблемы при $k < 1$ используется традиционный полуклассический инструментарий, и для скорости ионизации получается компактная формула в квадратурах (см., например, [18]). Однако для кулоновского потенциала с $k = 1$ формула расходится. Следовательно, для рассмотрения этого случая требуется более совершенный подход [18]. Ситуация становится еще более сложной при $k > 1$. Для этого случая известны только два примера строгого рассмотрения проблемы. Это – случаи потенциала обратного квадратного корня $-V_0 / x^{1/2}$ и логарифмического потенциала $V_0 \ln x$ (данный потенциал можно рассматривать как особый предельный случай V_b при $k \rightarrow \infty$). Для этих двух потенциалов скорости туннельной ионизации были рассчитаны как для постоянного, так и для низкочастотного электрического поля, путем разложения присутствующего в итоговой формуле определенного интеграла в ряд по гипергеометрическим функциям [18]. Для рассмотрения туннельной ионизации в общем случае $k > 1$ в настоящей работе мы следуем подходу [18], делая акцент на потенциале $-V_0 / x^{1/3}$, который может быть применен для моделирования взаимодействия в физике элементарных частиц. Мы представляем простое параболическое приближение, которое обеспечивает высокоточный результат для всех k .

2. Общий подход

Рассмотрим потенциальный барьер (рис.1)

$$V(x) = -\frac{V_0}{x^{1/k}} - Fx, \quad V_0, F > 0. \quad (1)$$

ВКБ результат для полуклассической скорости туннельной ионизации, вычисленный как общая вероятность тока через внешнюю классическую точку поворота потенциала, задается как

$$w \sim e^{\frac{2\pi}{h} I}, \quad (2)$$

где $\hbar$ – редуцированная постоянная Планка и I – определенный интеграл

$$I_{1/k} = -2 \int_{x_L}^{x_R} \sqrt{2m(V(x) - E_n)} dx. \quad (3)$$

Здесь E_n и m – энергия и масса частицы, а x_L, x_R – классические внутренняя (левая) и внешняя (правая) точки поворота (см. рис.1).

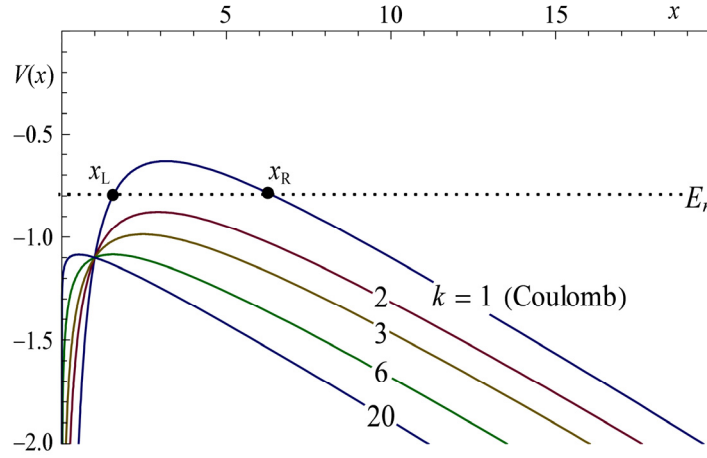


Рис.1. Потенциал (1) при $k = 1, 2, 3, 6, 20$ ($V_0 = 1, F = 0.1$).

Для вычисления интеграла (3) для потенциала (1) сперва применим преобразование $x = (-V_0 / E_n)^k z^k$, что приведет интеграл к стандартной форме:

$$I_{1/k} = a \int_{z_L}^{z_R} \sqrt{z^{2k-3} (z - 1 - \varepsilon z^{k+1})} dz, \quad (4)$$

где

$$a = -2k \sqrt{-2mE_n} (-V_0 / E_n)^k, \quad \varepsilon = (-F / E_n) (-V_0 / E_n)^k. \quad (5)$$

Далее для целого k факторизуем полином под квадратным корнем в подынтегральной функции:

$$z^{2k-3} (z - 1 - \varepsilon z^{k+1}) = -\varepsilon z^{2k-3} (z - z_1)(z - z_2) \dots (z - z_k)(z - z_{k+1}). \quad (6)$$

Пусть z_1 и z_2 – соответственно левая и правая точки поворота. Последующее линейное преобразование (сдвиг и масштабирование) переменного $z = z_1 + (z_2 - z_1)t$ приводит интеграл в уравнении (4) к определенному интегралу с пределами 0 и 1:

$$I_{1/k} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0 t)^{2k-3} (1-y_3 t) \dots (1-y_k t)(1-y_{k+1} t)} dt, \quad (7)$$

где $y_0 = 1 - z_2 / z_1$,

$$y_i = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_i}, \quad i = 3, 4, \dots, k, k+1, \quad (8)$$

$$A = -\frac{k\sqrt{m}}{F} (2\varepsilon|E_n|)^{3/2} z_1^{\frac{2k-3}{2}} (z_2 - z_1)^2 \prod_{i=3}^{k+1} \sqrt{(z_1 - z_i)}. \quad (9)$$

В общем случае этот интеграл не выражается через элементарные или известные специальные функции. Полезным наблюдением, способным обеспечить дальнейшее продвижение, является то, что для $y_3 = y_4 = \dots = y_k = y_{k+1} = 0$ (замечим, что это случай кулоновского потенциала) интеграл выражается в гипергеометрических функциях Гаусса. Это непосредственно видно из интегрального представления [19]

$${}_2F_1(a, b; c; y_0) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^1 t^{b-1} (1-t)^{c-b-1} (1-y_0 t)^{-a} dt. \quad (10)$$

Это наблюдение позволяет построить разложение интеграла (7) через гипергеометрические функции Гаусса. Это достигается применением ряда Тейлора

$$\sqrt{(1-y_3 t) \dots (1-y_k t)(1-y_{k+1} t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (t-t_0)^n \quad (11)$$

с $t_0 = 0, 1, 1/y_0$. Например, взяв $t_0 = 0$, мы немедленно приходим к разложению

$$I_{1/k} = A \sum_{n=0}^{\infty} c_n \int_0^1 t^n \sqrt{t(1-t)(1-y_0 t)^{2k-3}} dt = A \sum_{n=0}^{\infty} c_n {}_2F_1\left(\frac{3}{2} - k, \frac{3}{2} + n, 3 + n; y_0\right). \quad (12)$$

Это – сходящийся ряд, следовательно, взяв нужное количество членов, можно вычислить интеграл с любой заданной точностью. Отметим, что параметры системы «барьер–частица», кроме k , не входят в параметры вовлеченных гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$, как это имеет место для большинства стандартных кванто-механических задач, а входят в аргумент этих функций: $y_0 = y_0(m, k, V_0, F, E_n)$.

Технически задача теперь сводится к построению разложения (11). Соответствующее наблюдение здесь состоит в том, что для достижения хорошего приближения нужно быть осторожным с точностью определения аргумента y_0 . Понятно, что это эквивалентно точному приближению для левой и правой поворотных точек. Заметим, что точки поворота определяются как корни функции в скобках в уравнении (4), то есть функции $f = z - 1 - \varepsilon z^{k+1}$. Это – известный математический объект – трехчлен Ламберта [20, 21], корни которого изучались многими авторами. Для целого k один из корней всегда можно записать в терминах обобщенных гипергеометрических функций (см., например, [22–26]). Для малых

$\varepsilon \ll 1$ имеют место разложения

$$z_1 = 1 + \varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad z_2 = \frac{1}{\varepsilon^{1/k}} - \frac{1}{k} - \frac{k+1}{2k^2} \varepsilon^{1/k} + O(\varepsilon^{2/k}). \quad (13)$$

Так как для правой поворотной точки разложение задается в степенях $\varepsilon^{1/k}$, то понятно, что это довольно медленно сходящийся ряд. Чтобы добиться отклонения порядка ε , нужно брать более, чем k членов.

Еще одним фактором, влияющим на точность, является то, что скорость сходимости гипергеометрического ряда для $I_{1/k}$ достаточно чувствительна к выбору точки разложения t_0 , поэтому эта точка также требует отдельного рассмотрения. В уравнении (12) мы положили $t_0 = 0$ для простоты. Однако это не лучший выбор. Это можно понять с помощью следующего рассуждения. Выбор $t_0 = 0$ соответствует разложению в окрестности левой поворотной точки. Однако в этой пространственной области электрическое поле (то есть то, что вызывает ионизацию) слишком слабо, чтобы оказать заметное влияние на поведение частицы. Следовательно, для того, чтобы в разумной степени учитывать влияние электрического поля, следует взять много членов разложения. Напротив, можно ожидать гораздо более быстро сходящегося результата, если применить разложение в окрестности правой точки поворота. Здесь электрическое поле достаточно сильное, чтобы проявиться уже в первых членах разложения. Следовательно, интуитивно правая точка поворота, то есть точка $t_0 = 1$, более целесообразна для применения ряда Тейлора. Мы проверили, что если учитывать только два члена разложения, то при этом выборе точность результата увеличивается на один–два порядка по сравнению с выбором $t_0 = 0$. Отклонение полученного приближения от точного результата в этом случае составляет порядка одной десятой доли процента. Примечательно, что существует еще более продвинутый подход. Идея состоит в том, чтобы аппроксимировать левую часть уравнения (11) параболой, которая точно воспроизводит значение этого выражения в трех точках. Такое приближение ещё больше уменьшает погрешность до одной сотой процента. Мы обсуждаем этот подход для потенциала $-V_0/x^{1/3}$.

3. Потенциал $-V_0/x^{1/3}$

Рассмотрим связующий потенциал $V_b = -V_0/x^{1/3}$. Рассчитываемый интеграл есть

$$I_{1/3} = -\frac{6\sqrt{2m}V_0^3}{|E_n|^{5/2}} \int_{z_L}^{z_R} \sqrt{z^3(z-1-\varepsilon z^4)} dz, \quad (14)$$

где $\varepsilon = FV_0^3 / |E_n|^4$ и в качестве E_n мы берем, пренебрегая квадратичным штарковским сдвигом для слабого ионизирующего поля, квазиклассический

энергетический спектр для невозмущенного потенциала V_b [27, 28]:

$$E_n = - \left(\frac{mV_0^6}{\hbar^2} \right)^{1/5} \frac{3^{2/5}}{2^{7/5} (n-1/5)^{2/5}}. \quad (15)$$

Пусть $z_{1,2,3,4}$ – четыре корня многочлена четвертой степени, входящего в интеграл (14), так что

$$z - 1 - \varepsilon z^4 = -\varepsilon(z - z_1)(z - z_2)(z - z_3)(z - z_4). \quad (16)$$

Характер корней определяется знаком дискриминанта [19]

$$\Delta = \varepsilon^2 (256\varepsilon - 27). \quad (17)$$

Для $\varepsilon < 27 / 256 \approx 0.1$ дискриминант отрицателен, следовательно, имеются два вещественных корня и два комплексно-сопряженных корня. Можно показать, что два вещественных корня всегда положительны и больше единицы. Для малых $\varepsilon \ll 1$ эти корни аппроксимируются как

$$z_1 = 1 + \varepsilon + 4\varepsilon^2 + \dots, \quad z_2 = \frac{1}{\varepsilon^{1/3}} - \frac{1}{3} - \frac{2\varepsilon^{1/3}}{9} - \frac{20\varepsilon^{2/3}}{81} - \frac{\varepsilon}{3} - \frac{364\varepsilon^{4/3}}{729} + \dots \quad (18)$$

Так как $1 < z_1 < z_2$, то левая точка поворота есть $z_L = z_1$, а правая - $z_R = z_2$. При этом и линейном преобразовании $z = z_1 + (z_2 - z_1)t$ интеграл (14) сводится к

$$I_{1/3} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0t)^3(1-y_3t)(1-y_4t)} dt, \quad (19)$$

где

$$A = -3 \frac{(2\varepsilon |E_n|)^{3/2}}{F} (z_2 - z_1)^2 z_1^{3/2} \sqrt{(z_1 - z_3)(z_1 - z_4)}, \quad (20)$$

$$y_0 = 1 - \frac{z_2}{z_1}, \quad y_3 = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_3}, \quad y_4 = \frac{z_1 - z_2}{z_1 - z_4}. \quad (21)$$

Применяя ряд Тейлора вблизи левой точки поворота:

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n, \quad (22)$$

получим (см. уравнение (12))

$$I_{1/3} = \frac{A\pi}{8} \left({}_2F_1 \left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 3, y_0 \right) - \frac{y_3 + y_4}{4} {}_2F_1 \left(-\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, 4, y_0 \right) - \frac{5(y_3 - y_4)^2}{64} {}_2F_1 \left(-\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, 5, y_0 \right) + \dots \right). \quad (23)$$

Далее рассмотрим ряд Тейлора вблизи правой точки поворота:

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (t-1)^n. \quad (24)$$

Результат имеет вид

$$I_{1/3} = \frac{A\pi\sqrt{(1-y_3)(1-y_4)}}{8} \times \left({}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 3, y_0\right) - \frac{y_3-2y_3y_4+y_4}{4(1-y_3)(1-y_4)} {}_2F_1\left(-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 4, y_0\right) + \dots \right). \quad (25)$$

С помощью прямого численного моделирования легко проверить, что точность, обеспечиваемая первыми двумя членами этого разложения, составляет порядка одной десятой процента. Этот результат в десять раз точнее, чем тот, который дают первые три члена разложения (23).

Более точное приближение получается простым параболическим приближением

$$\sqrt{(1-y_3t)(1-y_4t)} \approx \alpha_0 + \alpha_1 t + \alpha_2 t^2 \equiv F(t) \quad (26)$$

с тремя константами $\alpha_{0,1,2}$, которые подбираются так, чтобы точно воспроизвести значения корня в концевых точках $t=0,1$ и в одной внутренней точке. Последняя точка может быть выбрана таким образом, чтобы минимизировать максимальную относительную ошибку на отрезке $t \in [0,1]$, или по какому-нибудь другому критерию оптимизации. Однако средняя точка отрезка $t=1/2$ оказывается достаточно хорошей, чтобы обеспечить относительную ошибку порядка сотых долей процента. Результат имеет вид

$$F(t) = 1 - \left(3 - 2\sqrt{(y_3-2)(y_4-2)} + \sqrt{(y_3-1)(y_4-1)} \right) t + 2 \left(1 - \sqrt{(y_3-2)(y_4-2)} + \sqrt{(y_3-1)(y_4-1)} \right) t^2. \quad (27)$$

Таким образом, высокоточное приближение интеграла (19) дается как

$$I_{1/3} = A \int_0^1 \sqrt{t(1-t)(1-y_0t)^3} F(t) dt. \quad (28)$$

Очевидно, что интегрирование приводит к сумме трех гипергеометрических функций Гаусса. В заключение отметим, что, хотя мы изначально обсуждали только случай целых k , конечная разработка, то есть параболическое приближение, одинаково применима и для нецелого k . Следовательно, это общий подход для всех $k > 1$.

4. Заключение

Таким образом, анализируя туннельную ионизацию, слабым электростатическим полем $-Fx$ частицы, связанной притягивающим одномерным сингулярным потенциалом $-V_0 / x^{1/k}$, мы предложили довольно точное приближение для общего случая $k > 1$. Основные пункты применяемой техники следующие. Во-первых, мы показываем, что интеграл, присутствующий в квазиклассической скорости туннельной ионизации, в случае дробно-степенного потенциала может быть разложен в бесконечный ряд по гипергеометрическим функциям Гаусса. Это разложение строится путем применения некоторого вспомогательного ряда Тейлора, пригодного для окрестности правой поворотной точки. Аргумент гипергеометрических функций, вовлеченных в разложение, зависит от физических характеристик потенциала связи и внешнего поля. Следует применить высокоточное приближение для левой и правой классических поворотных точек (нужно вычислить только два реальных положительных корня соответствующего трехчлена Ламберта). Далее мы показываем, что высокоточное приближение, включающее только три гипергеометрические функции Гаусса, может быть построено параболическим приближением определенного квадратного корня, присутствующего в интеграле в показателе скорости ионизации. Это – общий подход, применимый не только для целого k , но и для всех $k > 1$. Нужно подгонять параметры вспомогательного квадратичного многочлена таким образом, чтобы этот многочлен точно воспроизводил значения рассматриваемого корня в трех пространственных точках.

Работа выполнена в рамках армяно-французской международной ассоциированной лаборатории IRMAS (CNRS-France и SCS-Armenia). Исследование поддержано ГК МОН Армении (грант №18RF-139) и Армянским национальным фондом науки и образования (грант ANSEF №PS-4986). Т. Ишханян благодарит SPIE за стипендию в области оптики и фотоники (SPIE International Scholarship in Optics and Photonics 2017), посольство Франции в Армении за докторский грант, а также университетское агентство «Франкофония» за совместный с ГК МОН Армении грант «Научная мобильность».

ЛИТЕРАТУРА

1. **F. Hund.** Z. Phys., **40**, 742 (1927).
2. **L. Nordheim.** Z. Phys., **46**, 833 (1927).
3. **J.R. Oppenheimer.** Phys. Rev., **31**, 66 (1928).
4. **C. Lanczos.** Z. Phys., **68**, 204 (1931).
5. **R.H. Fowler, L. Nordheim.** Proc. R. Soc. London A, **119**, 173 (1928).
6. **O.K. Rice.** Phys. Rev., **35**, 1538 (1930).
7. **G. Gamow.** Z. Phys., **51**, 204 (1928).
8. **R.W. Gurney, E.U. Condon.** Phys. Rev., **33**, 127 (1929).

9. **J. Frenkel.** Wave Mechanics, Elementary Theory. Clarendon Press, Oxford, 1932.
10. **E. Merzbacher.** Physics Today, **55**, 44 (2002).
11. **M. Razavy.** Quantum Theory of Tunneling. World Scientific, Singapore, 2003.
12. **G. Binnig, H. Rohrer.** IBM J. Research and Development, **30**, 355 (1986).
13. **M.W. Johnson et al.,** Nature, **473**, 194 (2011).
14. Flash Memories. P. Cappelletti, C. Golla, P. Olivo, E. Zanoni (Eds.). Kluwer, Boston, 1999.
15. **B.D. Josephson.** Phys. Lett., **1**, 251 (1962).
16. **L. Esaki.** Phys. Rev., **109**, 603 (1958).
17. **L.V. Keldysh.** Soviet Phys. JETP, **20**, 1307 (1965).
18. **A. Ishkhanyan, V. Krainov.** Laser Phys. Lett., **14**, 076001 (2017).
19. NIST Handbook of Mathematical Functions. F.W.J. Olver, D.W. Lozier, R.F. Boisvert, C.W. Clark (Eds.). Cambridge University Press, New York, 2010.
20. **J.H. Lambert.** Acta Helvetica, **3**, 128 (1758).
21. **L. Euler.** Acta Acad. Scient. Petropol., **2**, 29 (1783).
22. **C. Hermite.** Annali di Math. Pura ed Appl., **1**, 256 (1858).
23. **J. Cockle.** Phil. Mag., **20**, 145 (1860).
24. **R. Harley.** Quart. J. Pure Appl. Math., **5**, 337 (1862).
25. **F. Klein.** Lectures on the Icosahedron and the Solution of Equations of the Fifth Degree. New York, Dover, 1956.
26. **R. Birkeland.** Mathematische Zeitschrift, **26**, 566 (1927).
27. **C. Quigg, J.L. Rosner.** Phys. Rep., **56**, 167 (1979).
28. **A. Ishkhanyan, V. Krainov.** JETP Lett., **105**, 43 (2017).

ԱՍՏԻՃԱՆԱՅԻՆ ՕՐԵՆՔՈՎ ՏՐՎՈՂ ՄԻՆԳՈՒԼՅԱՐ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ԴԱՇՏՈՒՄ՝
ԹՈՒՅԼ ԷԼԵԿՏՐՈՍՏԱՏԻԿ ԴԱՇՏԻ ԿՈՂՄԻՑ ՀԱՐՈՒՑՎԱԾ ԹՈՒՆԵԼԱՅԻՆ
ԻՈՆԻԶԱՅԻՆ ԲԱՐՁՐ ՃՇԳՐՏՈՒԹՅԱՆ ԴԻՏԱՐԿՈՒՄ

Տ.Ա. ԻՇԽԱՆՅԱՆ, Ա.Հ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Վ.Ա. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ, Ա.Մ. ԻՇԽԱՆՅԱՆ

Վերլուծված է միաչափ, աստիճանային օրենքով փոփոխվող, սինգուլյար ձգողական պոտենցիալի դաշտում կապված մասնիկի՝ թույլ էլեկտրաստատիկ դաշտի կողմից հարուցված թունելային իոնիզացիան: Առաջարկված է բարձր ճշգրտության մոտարկում, որը կիրառելի է աստիճանի ընդհանուր ոչ կոտորակային դեպքում:

ACCURATE TREATMENT OF TUNNEL IONIZATION, INDUCED BY A
CONSTANT ELECTRIC FIELD, FROM A POWER-LAW SINGULAR POTENTIAL

T.A. ISHKHANYAN, A.H. HARUTYUNYAN, V.A. MANUKYAN, A.M. ISHKHANYAN

The tunnel ionization, induced by a weak electrostatic field, of a particle bound in an attractive one-dimensional power-law singular potential is analysed. An accurate approximation applicable for the general case of non-fractional power exponent is suggested.