Известия НАН Армении, Физика, т.54, №4, с.455–461 (2019)

УДК 539.1

О РЕГУЛЯРИЗАЦИИ КВАНТОВОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ СИНГУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

Г.А. МУРАДЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: gevorgmuradyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 16 апреля 2019 г.)

Квантовое туннелирование сингулярного потенциала моделируется, как правило, методом регуляризации. Он исходит из промежуточного использования прообраза потенциальной функции несингулярного характера. В настоящей работе устанавливается, что прообразы, непрерывно дифференцируемые в окрестности сингулярной точки потенциального барьера, не воспроизводят сингулярность в задаче квантового туннелирования.

1. Введение

Сингулярные потенциалы $V(x) \sim x^{-\alpha}$, $\alpha > 0$ представляют самостоятельный интерес в квантовой механике, упрощенно моделируя локализованные контактные взаимодействия [1–3] (заметим, что сюда входит и кулоновский, и гравитационный потенциалы). Интерес представляет и случай квантового туннелирования [4, 5], когда следует проходить точку сингулярности $x = 0$. Как указывают ряд авторов [6, 7], нет пока однозначного ответа на решение этой проблемы. Правда, требование непрерывности потока вероятности для потенциалов класса $V(x) \sim x^{-\alpha}$ ($0 < \alpha < 2$) не встречает возражений, но чисто математический анализ ситуации на основе самосопряженного расширения используемых операторов показывает, что этой непрерывности не достаточно для однозначной формулировки задачи [8–10]. Требуются дополнительные соображения (желательно физического плана). Наиболее обычным является метод регуляризации [11–14]. В нем сингулярный вид потенциальной функции временно заменяется на несингулярный прообраз, дающий аналитическое решение задачи. В завершение, уже в выражениях коэффициента прохождения и коэффициента отражения, делается предельный переход для восстановления бесконечно большого значения потенциала в сингулярной точке $x = 0$.

Для ориентации в сути проблемы на простом примере в работе [15] разобран случай дираковского дельта-потенциала $V(x) = g\,\delta(x)$ определенной «мощности» g , когда подход к решению задачи туннелирования частицы общеизвестен, но ситуация отличается от стандартной. Этот потенциал в общем случае частично проницаем для прохождения и может быть моделирован из задачи прямоугольного потенциала предельным сужением области действия при условии стремления «площади» графика на значение «мощности» g. То есть, промежуточный выбор прямоугольной формы с последующим предельным переходом указанного вида и есть регуляризация для дираковского дельта-потенциала.

К сожалению, не все так согласовано в общем случае сингулярных потенциалов. Это, в первую очередь, относится к тому, что «площадь» под графиком потенциала неограниченная величина, растянутая на бесконечную длину. Второе, что производная потенциальной функции расходится по модулю с приближением к точке $x = 0$, но не определена, как и сам потенциал, в самой точке. В этих условиях возникает вопрос о том, существуют ли ограничения на свойства функций, выбираемых для выполнения процедуры реализации. Чтобы ответить на этот вопрос, следует сначала определить асимптотические свойства коэффициент прохождения потенциального барьера, определенная на основе промежуточной потенциальной функции. Такую возможность предоставляет прямоугольный вид потенциала, обеспечивающий регуляризацию туннелирования дираковского дельта-потенциала.

2. Асимптотическое квантовое туннелирование прямоугольного потенциального барьера

Коэффициент прохождения прямоугольного потенциального барьера, как известно из учебников квантовой механики (например, [16]), дается выражением

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V^2}{4E\left|V-E\right|}\mathrm{sh}^2\left(\sqrt{2m\left(V-E\right)}\,a/\hbar\right)}, \tag{1}$$

где E и m – энергия и масса частицы, а V и a – ширина и высота потенциала. Два предельных перехода тривиальны и имеют место для любого регулярного потенциала:

$$T \xrightarrow[E=const]{V\to\infty} 0, \quad T \xrightarrow[V=const]{E\to\infty} 1. \tag{2}$$

Следовательно, они не могут служить тестами для выбора промежуточного вида потенциала метода регуляризации.

Другой вид предела-когда энергия частицы и высота барьера одновременно стремятся к бесконечности, оставаясь все время равными или равноудаленными. Тогда

$$T \xrightarrow[E-V=const]{V\to\infty,\, E\to\infty} 0. \tag{3}$$

Последний предел, который воспроизводит результат дельта-потенциала:

$$T \xrightarrow[Va=g,\,E=const]{V\to\infty,\,a\to 0} \left(1+\frac{g^2 m}{2\hbar^2 E}\right)^{-1}. \tag{4}$$

Ответ зависит от «мощности» барьера $g = Va$.

3. Асимптотическое квантовое туннелирование потенциального барьера с плавной вершиной

Рассмотрим асимптотические закономерности туннелирования плавно меняющегося потенциала с пиком в точке $x=0$. Обратимся к известному из учебников примеру (смотри, например, [16]), к колоколообразному потенциалу $V(x) = V_0 / \mathrm{ch}^2\alpha x$. Коэффициент прохождения при этом дается выражением

$$T = \frac{\mathrm{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha}}{\mathrm{sh}^2 \dfrac{\pi k}{\alpha} + \mathrm{ch}^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{\dfrac{8mV_0}{\hbar^2\alpha^2} - 1}\right)}. \tag{5}$$

Непосредственным вычислением нетрудно убедиться, что аналогичный предел (3) равен не нулю, а одной второй:

$$T \xrightarrow[E-V_0=const]{V_0\to\infty,\,E\to\infty} 1/2\,. \tag{6}$$

Последний же предел-стягивание потенциальной кривой в линию с сохранением «мощности» $g = 2V_0/\alpha$ – в точности воспроизводит результат (4).

Совпадение предельного вида (4) для выбранных двух видов показывает, что свойство дельта функции быть представленным предельным сужением любой функции данной площади под кривой распространяется и на соответствующие решения уравнения Шредингера. Иначе говоря, аналитическое решение уравнения Шредингера для дираковского дельта-потенциала самосогласовано с регуляризованными решениями. Это может быть воспринято и как прямое следствие того, что дираковская дельта-функция не является функцией, в том числе сингулярной, в классическом смысле, а непрерывным линейным функционалом на пространстве дифференцируемых функций.

Для нас важен другой вывод, что прямоугольная и колоколообразная формы имеют по крайней мере один отличный асимптотический предел. Поскольку отличие числовое, не зависящее от параметров потенциала, то пределы (3) и (6) выявляют имеющееся имманентное, качественное отличие между этими функциями. Оно заключается, естественно, в поведении производной потенциальной функции в окрестности точки $x=0$ в ходе предельного приближения к сингулярному виду [15].

Прежде чем продолжить рассуждения, выясним насколько общим является отличительный предельный результат (6) для потенциалов с плавным характером максимума. Для этого рассмотрим отличный от колоколообразного параболический вид потенциала:

$$V(x) = V_0\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right), \quad -a \le x \le a\,. \tag{7}$$

Линейно независимые волновые функции вне области потенциала являются бегущими волнами, а в области потенциала выражаются через функции параболического цилиндра $D_\nu(\lambda z)$:

$$\psi(z) = B_1\, D_\nu\left((1+\mathrm{i})u_0{}^{1/4}z\right) + B_2\, D_{\nu^*}\left((-1+\mathrm{i})u_0{}^{1/4}z\right), \tag{8}$$

где $\nu = -1/2 - \mathrm{i}\,\varepsilon/\sqrt{u_0} + \mathrm{i}\sqrt{u_0}/2$. Энергия частицы ε и высота барьера u_0 нормированы на энергию $E_r = \hbar^2 / 2ma^2$. Остальные расчеты проводятся стандартным образом и для коэффициента прохождения дают асимптотическое значение одна вторая, в точности совпадающее со значением (6) случая колоколообразного барьера. Поэтому можно сделать вывод, что если потенциальная функция барьера непрерывно дифференцируема в окрестности пика, то имеет место асимптотический предел (6). Ход коэффициентов прохождения и отражения к половинному значению показан на Рис. 1. Отметим, что догадывание о наличии такой специфики было сделано в работе [15].

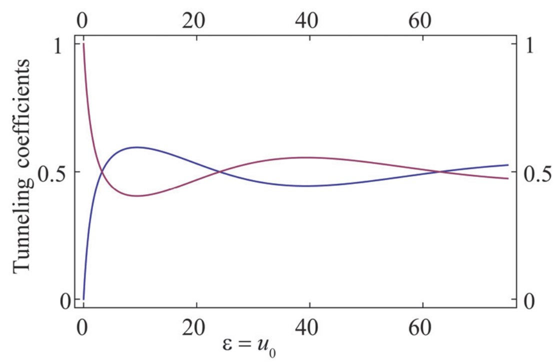

Рис.1. Квантовое туннелирование потенциального барьера с гладкой вершиной при одновременном повышении высоты барьера u_0 и энергии падающей на барьер частицы ε. График коэффициента отражения начинается с нуля, коэффициента прохождения – с единицы.

4. Асимптотическое квантовое туннелирование потенциального барьера с острой вершиной

В действительности условие непрерывной дифференцируемости для предела (6) является не только достаточным, но и необходимым условием. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим потенциал с острой вершиной, крылья которого опускаются до нуля в точках $x = \pm a$ по, например, параболическому закону:

$$V(x) = V_0 \left(1 - \frac{x}{a} \operatorname{sign} x\right)^2, \quad -a \le x \le a . \tag{9}$$

Волновая функция в области потенциала:

$$\psi(z) = B_1 D_\nu\left(-\sqrt{2}\, u_0^{1/4}(1-z)\right) + B_2 D_\nu\left(-\mathrm{i}\sqrt{2}\, u_0^{1/4}(1-z)\right),$$

где $\nu = -\left(\varepsilon + \sqrt{u_0}\right)/2\sqrt{u_0}$. Тогда, как и в предыдущем случае, расчет коэффициентов отражения и прохождения удается провести до конца аналитически. Подставляя условие $\varepsilon = u_0$ и устремив высоту барьера u_0 к бесконечности, для коэффициентов отражения и прохождения получаем отличные от половины значения. Графики приближения к асимптотическим значениям представлены на Рис. 2.

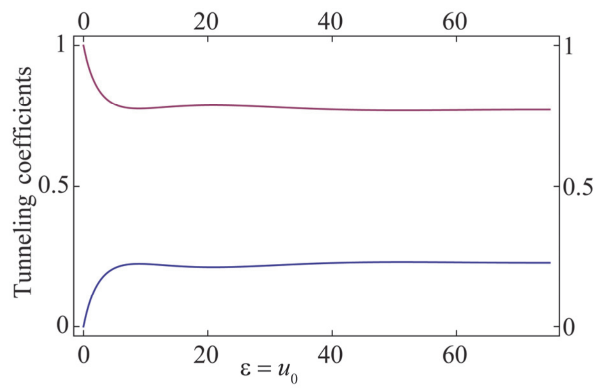

Рис.2. Квантовое туннелирование потенциального барьера с острой вершиной при одновременном повышении высоты барьера u_0 и энергии падающей на барьер частицы ε . График коэффициента отражения начинается с нуля, коэффициента прохождения – с единицы.

Таким образом, асимптотическое поведение коэффициентов отражения и прохождения в специальном случае $\varepsilon = u_0 \to \infty$ однозначно зависит от характера потенциальной функции в окрестности максимума. Если она непрерывно дифференцируема, то есть имеет определенное в точке максимума, то граничные значения коэффициентов отражения и прохождения равны друг другу. Если же максимум острый, то есть производная потенциальной кривой не имеет определенного значения в точке максимума, то граничное значение коэффициента отражения оказывается меньше коэффициента прохождения.

Это замечательное свойство может быть использовано в процессе регуляризации сингулярных потенциалов. Действительно, то, что специальный предел при гладкой вершине потенциала равен половине, а при острой вершине – нет, наводит на мысль, что эти потенциальные функции, а значит и их пределы, отличаются по существенному признаку. Таковой для предельных видов потенциалов может быть только сингулярность. Поскольку потенциальные функции с острой вершиной в пределе бесконечной высоты действительно воспроизводят свойства сингулярных функций, то это нельзя сказать уже для гладких вершин функций. Потенциальные функции с непрерывно-определенной производной в окрестности максимума не могут быть выбраны в качестве прототипов для выполнения промежуточных вычислений в методе регуляризации сингулярных потенциалов. Этот класс функций в пределе получает бесконечно большое значение в точке $x = 0$, но не становится сингулярным.

5. Заключение

Сингулярные потенциалы составляют отдельный класс в задачах физики, и в частности-квантовой механики. Из-за отсутствия непосредственных математических условий связывания решений с обеих сторон точки расхождения потенциала, для рассмотрения задачи квантового туннелирования приходится делать дополнительные предположения физического плана. На практике это сводится к методу регуляризации, когда предварительно сингулярный потенциал заменяется прототипным потенциалом конечной высоты. Задача, включая коэффициенты отражения и прохождения, аналитически решается для этого потенциала и наконец, в этих решениях высота потенциала в сингулярной точке исходного потенциала устремляется к бесконечности.

В настоящей работе показано, что характер решений, присущий сингулярности в потенциале взаимодействия, может быть восстановлен методом регуляризации, если только прототипная функция не имеет определенной производной в точке сингулярности исходного потенциала.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках Лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **W.M. Frank, D.J. Land.** Rev. Mod. Phys., **43**, 36 (1971).
2. **I. Tsutsui, T. Fulop.** J. Quant. Infor., **1**, 543 (2003).
3. **M. Elbistan, P. Zhang, J. Balog.** J. Phys. G, **45**, 105103 (2018).
4. **M. Andrews.** Am. J. Phys. **44**, 1064 (1976).
5. **J. Dittrich, P. Exner.** J. Math. Phys., **26**, 2000 (1985).
6. **H. Miyazaki, I. Tsutsui.** Annal. Phys., **299**, 78 (2002).
7. **T. Fulop.** SIGMA, **3**, 107 (2007).
8. **G. Bonneau, J. Faraut.** Am. J. Phys., **69**, 322 (2001).
9. **I. Tsutsui, T. Fulop, T. Cheon.** J. Phys. A, **36**, 275 (2003).
10. **A.V. Zolotaryuk, P.L. Christiansen, S.V. Iermakova.** J. Phys. A, **40**, 5443 (2007).

11. **K.S. Gupta, S.G. Rajeev.** Phys. Rev. D, **48**, 5940 (1993).
12. **S.A. Coon, B. Holstein.** Am. J. Phys., **70**, 513 (2002).
13. **A. Essin, D.J. Griffiths.** Am. J. Phys. **74**, 109 (2006).
14. **S. Gopalakrishnan.** Self-adjointness and the renormalization of singular potentials. (Department of Physics of Amherst College: Bachelor thesis), 2006.
15. **G.A. Muradyan, H.R. Hakobyan, B.V. Balasanyan.** J. Contemp. Phys. (Armenian Ac. Sci.), **51**, 136 (2016).
16. **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц,** Теоретическая физика, том III, Квантовая механика, Нерелятивистская теория, Наука, Москва, 1989, §25, задача 4.

ԵԶԱԿԻ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԱՅԻՆ ԱՐԳԵԼՔԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԹՈՒՆԵԼԱՑՄԱՆ ԿԱՆՈՆԱՎՈՐՄԱՆ ՎԵՐԱԲԵՐՅԱԼ

Գ.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Եզակի պոտենցիալի քվանտային թունելացումը մոդելավորվում է, որպես կանոն, կանոնավորման մեթոդով: Այն ելնում է ոչ եզակի բնույթի նախատիպի միջանկյալ օգտագործումից: Սույն աշխատանքում բացահայտված է, որ պոտենցիալային արգելքի եզակի կետի շրջակայքում անընդհատ դիֆերենցելի նախատիպերը չեն վերարտադրում եզակիությունը քվանտային թունելացման խնդրում:

ON REGULARIZATION OF QUANTUM TUNNELING OF A SINGULAR POTENTIAL BARRIER

G.A. MURADYAN

Quantum tunneling of a singular potential is modeled, as a rule, by the method of regularization. It originates from the intermediate usage of a nonsingular-type prototype of the potential function. In this work is has been ascertained that continuously differentiable at the point of singularity prototypes does not reproduce the singularity in the problem of quantum tunneling.