Известия НАН Армении, Физика, т.55, №2, с.166–172 (2020)

УДК 539.1

КВАНТОВОЕ ПРОХОЖДЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ КУЛОНОВСКОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЫ

Г.А. МУРАДЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: gevorgmuradyan@yahoo.com

(Поступила в редакцию 26 ноября 2019 г.)

В настоящей работе показано, что непроницаемая в методе регуляризации одномерная потенциальная яма кулоновского вида при учете квантовых флуктуаций становится частично проницаемой.

1. Введение

В задаче квантового туннелирования сингулярных потенциалов [1, 2] принципиальная трудность приходит не столько из бесконечного значения производной в сингулярной точке пространства, сколько из того, что эта точка находится вне области определения потенциальной энергии. Туннелирование же предполагает перехода через сингулярную точку и введение соответствующих правил выполнения этого перехода. Задача относительно проста в случае сингулярных барьеров, поскольку отсутствие связанных состояний делает вполне разумным предположение о непрерывности потока вероятности во всем пространстве. При этом разные методы регуляризации вида потенциала приводят к одинаковому ответу о непроницаемости сингулярного барьера [3, 4]. Заметим, что метод регуляризации [5–8] временно заменяет сингулярный вид потенциала на регулярный и в точке сингулярности приписывает потенциалу бесконечное большое значение. На основе этого вида потенциала выводится выражение коэффициента прохождения частицы, а для восстановления сингулярного характера задачи делается соответствующий предельный переход.

Случай потенциальных ям оказывается более сложным из-за наличия связанных состояний, которые процессу туннелирования сообщают резонансный характер. Например, коэффициент прохождения прямоугольной потенциальной ямы ширины a имеет вид

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E\left(V_0 + E\right)} \sin^2\left(\sqrt{2m\left(V_0 + E\right)}\, a / \hbar\right)},$$

что стремятся к нулю в пределе $V_0 \to \infty$ для произвольных значений энергии E кроме дискретного ряда значений, обращающих $\sin$-функцию в знаменателе нуль для каждого конечного значения глубины потенциала V_0.

Этот пример показывает, что предельный переход к бесконечно глубокому потенциалу сам по себе не является гарантом получения определенного ответа задачи. Обоснованием этому может служить то, что инвариантность решений дифференциального уравнения (каковым является и уравнение Шредингера) относительно замен в последовательности операций имеет обязательный характер только в случае конечных непрерывных преобразований. Тип предельного перехода, способного восстановить природу сингулярности в туннелировании потенциального барьера, был предложен и обоснован в работах [9, 10].

Целью настоящей работы является использование этого предложения для выяснения вопроса о прохождении одномерной кулоновской потенциальной ямы. Поскольку важным звеном в формировании ответа о коэффициенте прохождения являются связанные состояния, то сперва выясним насколько общим является результат о резонансной полной проницаемости углубляющихся ям, представленный выше для прямоугольной геометрии.

2. Квантовое прохождение частицы параболической потенциальной ямы

Рассмотрим параболическую потенциальную яму

$$v(z) = -v_0\left(1 - z^2\right)\theta(1 - z^2)\,, \tag{1}$$

записанной в безразмерных единицах, где $z = x/a$, $v_0 = V_0/E_r$, $E_r = \hbar^2/2Ma^2$, V_0 и a – глубина и ширина потенциальной ямы, $\theta(\cdot)$ – единичная функция Хевисайда. В тех же единицах стационарное уравнение Шредингера

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \left(\varepsilon + v_0\left(1 - z^2\right)\theta(1 - z^2)\right)\psi(z) = 0 \tag{2}$$

в области потенциальной ямы имеет решение

$$\psi(z) = c_1 D_\nu(\sqrt{2}\, v_0^{1/4} z) + c_2 D_\nu(-\sqrt{2}\, v_0^{1/4} z)\,, \tag{3}$$

где $\varepsilon = E/E_r$, $D_\nu(\cdot)$ – функция параболического цилиндра, $\nu = (\varepsilon - \sqrt{v_0} + v_0)/2\sqrt{v_0}$.

Вне потенциальной ямы решение ур. (2) состоит из суперпозиции бегущих волн $\exp(i\sqrt{\varepsilon}\, z)$ и $\exp(-i\sqrt{\varepsilon}\, z)$. В результате, используя стандартную процедуру, выводится аналитическое выражение для коэффициента прохождения T, но оно очень громоздкое и не приводится в тексте. Зависимость T от энергии частицы показана на Рис. 1. В области относительно малых глубин потенциальной ямы максимумы (резонансы) прохождения доходят до единицы, как и в случае

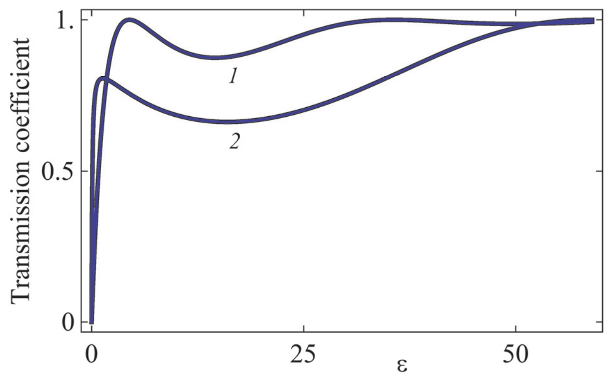

Рис.1. Коэффициент квантового прохождения потенциальной ямы параболического вида в зависимости от энергии падающей частицы. Глубина потенциала в единицах энергии отдачи E_r равна 100 (кривая *1*) и 500 (кривая *2*).

прямоугольной ямы. Но при увеличении глубины v_0 (кривая 2) максимумы, начиная с первого, снижаются.

Рис. 2 представляет коэффициент прохождения в зависимости от глубины потенциала. Резонансы появляются каждый раз, когда появляющаяся у поверхности ямы и движущаяся вниз с углублением ямы энергетический уровень доходит до глубины, численно равной энергии падающей на яму частицы. Поскольку дискретные энергетические уровни для рассматриваемой потенциальной ямы почти равноудалены и их число увеличивается с углублением ямы, то последнее сопровождается ростом эффективности взаимодействия и среднего коэффициента отражения. Как и следовало ожидать, при повышении энергии падающей частицы влияние потенциальной ямы на ее движение ослабляется (кривая *2* на Рис. 2, которая соответствует большей энергии падающей частицы, идет выше кривой *1*).

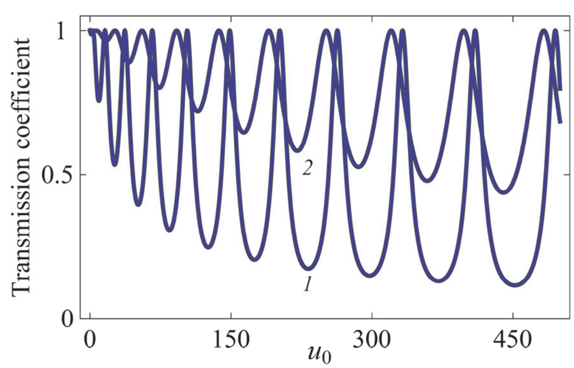

Рис.2. Коэффициент квантового прохождения потенциальной ямы параболического вида в зависимости от глубины потенциала. Безразмерная энергия падающей частицы равна 2 для кривой *1* и 10 для кривой *2*.

Поведение T в асимптотике $v_0 \to \infty$ удается получить на основе численных расчетов. Оно частично отражается на Рис. 2 в том, что резонансные максимумы проницаемости ямы непрерывно удаляются друг от друга и одновременно углубляются. Дальше они составляют уширяющиеся на нулевом уровне плотины, разделенными максимумами единичной высоты, ширины которых асимптотически приближаются к некой постоянной величине. А это означает, что предельная проницаемость ямы при $v_0 = \infty$ равна нулю для любой энергии падающей частицы.

3. Квантовое прохождение частицы синусовидной потенциальной ямы. Классический аналог

Теперь рассмотрим асимптотическое поведение потенциальной ямы, повсюду гладкой, включая пограничные точки. Для этого выберем синусоидальный вид одного периода:

$$\text{v}(z) = -\frac{v_0}{2}\left(1+\cos 2z\right)\theta\left(\frac{\pi^2}{4} - z^2\right). \tag{4}$$

Общее решение уравнения (4) в области ямы $-\pi/2 \le z \le \pi/2$ имеет вид

$$\psi(z) = d_1\, C\left(\varepsilon + \frac{v_0}{2}, -\frac{v_0}{2}, z\right) + d_2\, S\left(\varepsilon + \frac{v_0}{2}, -\frac{v_0}{2}, z\right), \tag{5}$$

где $C(\cdot)$ и $S(\cdot)$ – симметричная и антисимметричная функции Матье, соответственно.

Расчеты показывают, что закономерности прохождения этой ямы вполне аналогичны предыдущему случаю. В частности, проницаемость ямы (4) при $v_0 = \infty$ равна нулю для любой энергии падающей частицы. Поэтому можно делать общее заключение, что при стремлении глубины потенциальной ямы регулярной формы к бесконечности ее квантовая проницаемость стремится к нулю.

В рассмотренных выше случаях глубина потенциала стремился к бесконечности во всех внутренних точках. Ответ о нулевой проницаемости можно понять, если исходить из вероятностной интерпретации волновой функции и делать аналогию с классической картиной движения. Нулевая проницаемость ямы эквивалентно отсутствию там частицы, то есть стремлению к нулю вероятности обнаружения частицы в бесконечно углубляющейся потенциальной яме. Такой результат следует и из классической картины, поскольку по мере углубления ямы средняя скорость частицы в яме стремится к бесконечности, а время прохождения ямы – к нулю. Частица как бы находится в яме, но проходит ее мгновенно, и нет вероятности ее обнаружения там.

4. Прохождение одномерного кулоновского потенциала. Учет квантовых флуктуаций

Сингулярные потенциалы расходятся не по всей ширине, а в окрестности лишь одной точки (или изолированных друг от друга точках). В квантовой механике задачи с сингулярными потенциалами общеизвестны в связи с проблемой собственных функций и собственных значений. Тогда сингулярную точку можно бывает и оставить вне области рассмотрения. В случае же туннелирования точку сингулярности следует проходить по определению задачи.

Регулярный прототип для рассматриваемого в данной работе одномерного кулоновского потенциала

$$v(z) = -v_0\left(\frac{1}{|z|}-1\right)\theta\left(1-|z|\right), \tag{6}$$

записанный согласно выводам работ [9, 10], будет

$$v(z) = -v_0\left(\frac{1+\varsigma}{|z|+\varsigma}-1\right)\theta\left(1-|z|\right), \quad 0<\varsigma\ll 1. \tag{7}$$

Решение соответствующего стационарного уравнения Шредингера внутри потенциальной ямы имеет вид

$$\psi(z) = h_1 U\left(\nu,\, 0,\, 2\sqrt{v_0-\varepsilon}\left(-z+\varsigma\right)\right) + h_2 L_\nu^{-1}\left(2\sqrt{v_0-\varepsilon}\left(-z+\varsigma\right)\right) \tag{8}$$

где U и L-вырожденная гипергеометрическая функция и обобщенная функция Лагерра соответственно, $\nu = v_0\left(1+\varsigma\right)/\sqrt{\mathrm{v}_0-\varepsilon}$. С их помощью стандартным подходом определяется аналитическое выражение коэффициент прохождения. Последующий предельный переход для искомого коэффициента прохождения дает нулевое значение. Такой результат в [11] был получен другим способом, путем пренебрежения нерегулярного решения уравнения Шредингера.

В этих условиях, когда из квантовомеханической теории следует нулевое значение для проницаемости потенциала, существенно важным может оказаться учет нулевых флуктуаций. В уравнении Шредингера они отсутствуют и явствуют процедурой вторичного квантования. В настоящей работе будем исходить из вероятностного характера этих флуктуаций, присуждая вероятностный характер параметру ς в формуле (9). Предположим, что его значения распределены по гауссовскому закону

$$f(\varsigma) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,\Delta}\exp\left(-\frac{\varsigma^2}{\Delta^2}\right), \tag{9}$$

где Δ – полуширина распределения. Коэффициент прохождения при этом будет определится по формуле

$$T_{\text{fluct}}(\Delta) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\varsigma)\, f(\varsigma)\, d\varsigma\,, \tag{10}$$

где $T(\varsigma)$ – коэффициент прохождения регулярной прототипной потенциальной ямы.

Рис.3 представляет коэффициент прохождения (10) в зависимости от энергии падающей частицы для двух значений ширины Δ. Основным выводом здесь является ненулевая квантовая проницаемость: квантовые флуктуации как бы снимают сингулярный характер кулоновского потенциала. Сопоставление кривых показывает ожидаемую закономерность, что с уменьшением амплитуды квантовых флуктуаций проходимость потенциальной ямы понижается.

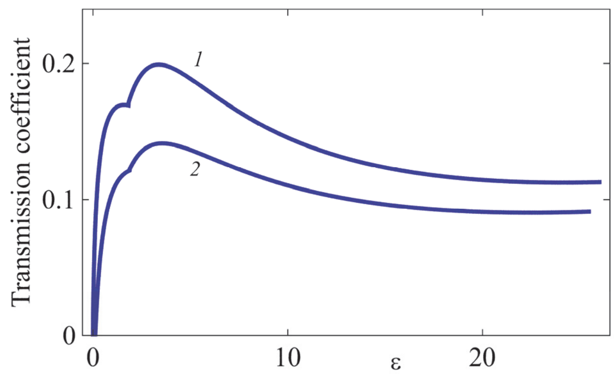

Рис.3. Коэффициент прохождения квантовой потенциальной ямы одномерного кулоновского вида в зависимости от энергии падающей частицы. Безразмерная полуширина гауссовских флуктуаций $\Delta = 2{\times}10^{-5}$ (кривая *1*) и 10^{-5} (кривая *2*) соответственно.

5. Заключение

Сингулярные и очень глубокие потенциалы занимают обособленное положение в квантовой механике, в частности, в задаче квантового туннелирования частицы потенциальных ям и барьеров. Простые физические соображения на основе вероятностной интерпретации волновой функции частицы подтверждают общий вывод, что углубление ямы в среднем уменьшает прохождение до нуля. Непроницаемой является и одномерная кулоновская потенциальная яма. Квантовые флуктуации делают потенциальную яму частично проницаемой, экспериментальное обнаружение которой может служить дополнительным подтверждением наличия таких флуктуаций.

Работа выполнено при финансовой поддержке комитета науки министерства образования, науки, культуры и спорта РА в рамках лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. **M. Andrews**. Am. J. Phys., **44**, 1064 (1976).
2. **J. Dittrich, P. Exner.** J. Math. Phys., **26**, 2000 (1985).
3. **H. Miyazaki, I. Tsutsui.** Annal. Phys., **299**, 78 (2002).
4. **T. Fulop.** SIGMA, **3**, 107 (2007).
5. **K.S. Gupta, S.G. Rajeev.** Phys. Rev. D, **48**, 5940 (1993).
6. **S.A. Coon, B. Holstein**. Am. J. Phys., **70**, 513 (2002).
7. **A. Essin, D.J. Griffiths.** Am. J. Phys., **74**, 109 (2006).
8. **S. Gopalakrishnan.** Self-adjointness and the renormalization of singular potentials. (Department of Physics of Amherst College: Bachelor thesis), 2006.
9. **Г.А. Мурадян, А.Р. Акопян, Б.В. Баласанян.** Изв. НАН Армении, Физика, **51**, 182 (2016).
10. **Г.А. Мурадян.** Изв. НАН Армении, Физика, **54**, 455 (2019).
11. **C.L. Hammer, T.A. Weber.** Am. J. Phys., **56**, 281 (1988).

ՄԻԱՉԱՓ ԿՈՒԼՈՆՅԱՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԱՅԻՆ ՀՈՐԻ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԱՆՑՈՒՄԸ

Գ.Ա. ՄՈՒՐԱԴՅԱՆ

Սույն աշխատանքում ցույց է տրված, որ կուլոնյան տեսքի միաչափ պոտենցիալային հորը, որն անթափանցելի է կանոնավորման մեթոդով, երբ հաշվի են առնվում քվանտային ֆլուկտուացիաները, դառնում է մասամբ թափանցելի:

QUANTUM PASSAGE OF A ONE-DIMENSIONAL COULOMB POTENTIAL WELL

G.A. MURADYAN

In this paper, it is shown that a one-dimensional Coulomb potential well impenetrable in the regularization method becomes partially permeable when are taking into account quantum fluctuations.