УДК 539.1

О КВАНТОВОМ ТУННЕЛИРОВАНИИ СИНГУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

А.Ж. МУРАДЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: muradyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 3 марта 2021 г.)

Чтобы обойти трудность, которую сингулярный характер потенциальной функции $V(x) = V_0/|x|^{\alpha}$ вносит в физику, используются некоторые методы регуляризации. Однако они влияют на сингулярную природу проблемы, и поэтому я обсуждаю здесь, каково квантовое туннелирование, если исходная сингулярная природа уравнения Шредингера остается невозмущенной. Для этого я исхожу из предусловия, что в токе плотности вероятности сингулярные члены компенсированы и ток можно считать непрерывным. В результате получено, что мягко-сингулярный потенциал (с $0 < \alpha < 1$) имеет конечную, но необычную туннельную прозрачность, в частности, ненулевое значение при нулевой энергии падающей частицы. Туннелирование кулоновской потенциальной ямы бесконечно осциллирует у нулевой энергии, и только сильно сингулярный потенциал (с $\alpha > 1$) повторяет свойство регуляризованных прототипов: быть непроницаем.

1. Введение

Принципиальной особенностью сингулярного потенциала [1–3] является отсутствие точки сингулярности в области определения функции потенциальной энергии. В то же время квантовое туннелирование подразумевает переход через точку сингулярности и, следовательно, некоторые правила для этого перехода. Для этого используется метод отсечки потенциала или вводятся условия согласования волновой функции и ее производной по обе стороны от особой точки. Первый метод заменяет сингулярную форму на регулярную с обрезанной сингулярной частью, для которой вычисляются коэффициенты пропускания и отражения, а затем в выражениях этих коэффициентов производится предельный переход, сужающий ширину усечения до нуля [4–7]. А второй метод, основанный на условий согласования, требует представления физических величин эрмитовыми операторами [8–11]. Таким образом, утверждая существование квантовомеханического среднего сингулярной потенциальной энергии, в [12] сингулярность делится на три класса: умеренно-, промежуточно-, и сверх-сингулярные. В терминах потенциальной функции $V(x) = V_0 / |x|^{\alpha}$, они соответствуют диапазонам $0 < \alpha < 1$, $1 \le \alpha < 2$, и $\alpha \ge 2$, соответственно. Отмечается, что для умеренно

сингулярного класса оба решения регулярны и в принципе могут быть допущены к задаче туннелирования. Для промежуточно сингулярного класса только одно решение является регулярным и, следовательно, приемлемо в процедуре решения физической задачи. В сверхсингулярном случае оба решения расходятся.

Наибольшее внимание было уделено туннелированию 1D кулоновского потенциала. Ограничение только регулярным решением автоматически приводит к отсутствию вероятностного тока и, следовательно, к непроницаемости потенциального барьера. Этот результат был также получен методом предельного сглаживания потенциального барьера [12] и позже подтвержден в кратком представлении [13]. Далее, рассматривая антисимметричное распределение потенциала [14], нерегулярное решение задачи было преобразовано в регулярное некоторой процедурой, приводящей к конечной проницаемости антисимметрично-кулоновского потенциала. В [15] этот подход назван остроумным, но не вполне оправданным. Ответ [16] обосновывает, что приведенная критика относится к симметричной, а не к антисимметричной форме распределения потенциала, которая там рассматривалась.

В работе [17] задача туннелирования кулоновского потенциала рассматривается с точки зрения аналитического продолжения решений через точку сингулярности в сочетании с методом вариации констант. Это позволяет полностью решить задачу 1D туннелирования и получить любую проницаемость, отличную от полной: нужно только выбрать соответствующий тип самосопряженного расширения. [18] пересмотрел проблему проницаемости на основе самосопряженных расширений и определил, что важное граничное условие Дирихле подразумевает непроницаемое начало координат. Наконец, подход [19], по аналогии с подходом [14], снимает сингулярность волновой функции, но при этом ведет к нулевой проницаемости для сингулярного центра потенциала.

Помимо кулоновского, квантовое туннелирование также изучалось для обратного квадратичного потенциала $V(x) = V_0 / |x|^2$. В работе [20] коэффициент пропускания определен для всех возможных самосопряженных расширений гамильтониана с условием $0 < V_0 < 3/4$ и установлено, что туннелирование возможно и оно происходит, если матрица самосопряженных расширений не является диагональной. Возможность туннелирования при тех же условиях утверждается также исходя из семейства неэквивалентного U(2) квантования [21].

Заметим, однако, что указанные процедуры регуляризации, введенные для согласования уравнения Шредингера со стандартными постулатами квантовой механики, до некоторой степени подавляют первоначальное содержание сингулярной задачи. По этой причине я изучаю здесь вопрос о том, каким является квантовое туннелирование сингулярного потенциала в рамках уравнения Шредингера, но без каких-либо действий для того, чтобы строго соответствовать постулатам квантовой механики. Используемый подход исходит из свойства плотности тока вероятности, что сингулярные члены в нем уравновешивают друг

друга, и потому непрерывность тока может быть распространена на всю координатную ось, включая сингулярное начало координат. Предварительно этот подход применился в случае 1D кулоновского потенциального барьера ($\alpha = 1$, $V_0 > 0$) в работе [22]. Настоящее рассмотрение включает в себя умеренно-($0 < \alpha < 1$), промежуточно- ($1 < \alpha < 2$), сверх- ($\alpha \ge 2$) сингулярные диапазоны и 1D кулоновскую яму ($\alpha = 1$, $V_0 < 0$), тем самым вместе с [22] охватывает все диапазоны параметров $\alpha > 0$ и V_0 .

2. Формулировка задачи

Стационарное уравнение Шредингера для сингулярного потенциала имеет вид

$$\frac{d^{2}\psi(z)}{dz^{2}} + \left(\varepsilon - \frac{u_{0}}{|z|^{\alpha}}\right)\psi(z) = 0, \qquad (1)$$

где z нормирован на произвольную длину l, а энергия частицы и «мощность» потенциала – на «энергию отдачи» $E_{\rm rec} = \hbar^2/2ml^2$. Решение будем искать в виде

$$\psi(z) = \exp(h(z) \pm i\sqrt{\varepsilon} z)$$
(2)

с неизвестной функцией h(z), которая, согласно (1), должна удовлетворять уравнению

$$h''(z) + (h'(z))^2 \pm i 2\sqrt{\varepsilon} h'(z) = u_0 |z|^{-\alpha}$$
(3)

и производная от которой должна исчезнуть на бесконечности. Уравнение (3) для общих нецелых значений степени α не имеет точных решений, выраженных в известных аналитических функциях. В дальнейшем построим приближенные решения, сохранив при этом сингулярную природу уравнения (3).

3. Квантовое туннелирование умеренно-сингулярного потенциала

Вклады ведущего порядка в правой и левой частях уравнения (3) вблизи особой точки должны быть одного порядка величины, поэтому мы имеем

$$h''(z) \overset{z \to 0}{\approx} u_0 |z|^{-\alpha} \tag{4}$$

и соответственно

$$h'(z) \approx \frac{u_0}{1-\alpha} |z|^{1-\alpha}.$$
(5)

Поскольку $0 < \alpha < 1$, то

$$\left(h'(z)\right)^2 \ll h'(z) \tag{6}$$

и может быть опущен в уравнении (3). Тогда оно принимает вид

$$h''(z) \pm i 2\sqrt{\varepsilon} h'(z) = u_0 |z|^{-\alpha}.$$
⁽⁷⁾

Следует отметить, что хотя условие (6) постепенно нарушается при удалении от начала координат, но так как задача туннелирования будет сформулирована значениями в начале координат, то важно лишь, что на больших расстояниях h'(z) пропорционально $|z|^{-\alpha}$ и, соответственно, решение уравнения (7) удовлетворяет необходимому условию обращения в нуль на бесконечности. Уравнение (7) первого порядка относительно производной h'(z), и его решение для координат z > 0 имеет вид

$$h'(z) = -e^{\pm i 2\sqrt{\varepsilon} z} z^{1-\alpha} (\mp i 2\sqrt{\varepsilon} z)^{-1+\alpha} \Gamma(1-\alpha, \mp i 2\sqrt{\varepsilon} z) u_0, \qquad (8)$$

где константа интегрирования принята равной нулю, чтобы обеспечить нулевое решение при отсутствии потенциала ($u_0 = 0$). Прямым интегрированием (8) получаем

$$h(z) = -\frac{2^{-2+\alpha} \left(\mp i \sqrt{\varepsilon}\right)^{\alpha}}{\varepsilon} \left(\frac{\pi \operatorname{Csc}(\pi \alpha)}{\Gamma(\alpha)} \pm \frac{i e^{\mp i 2\sqrt{\varepsilon} z} \Gamma\left(2-\alpha, \mp i 2\sqrt{\varepsilon} z\right)}{1-\alpha}\right) u_0.$$
(9)

Аналогично, на левой стороне потенциала для искомой функции получаем

$$h'(z) = \mp \frac{i}{2} e^{\mp i 2\sqrt{\varepsilon} z} (\pm 2i)^{\alpha} \varepsilon^{(-1+\alpha)/2} \Gamma(1-\alpha, \mp i 2\sqrt{\varepsilon} z) u_0, \qquad (10)$$

$$h(z) = -(\pm i)^{1+\alpha} \left(2\sqrt{\varepsilon}\right)^{-1+\alpha} \times \left(\frac{2^{-\alpha} z \left(\mp i \sqrt{\varepsilon} z\right)^{-\alpha}}{-1+\alpha} \pm \frac{i \left(\Gamma(1-\alpha)\right) - e^{\mp i 2\sqrt{\varepsilon} z} \Gamma(1-\alpha, \mp i 2\sqrt{\varepsilon} z)}{2\sqrt{\varepsilon}}\right) u_0.$$
(11)

Использование выражений (8)–(11) показывает, что линейно независимые решения (2) и их производные конечны в особой точке z = 0. Поэтому, условия непрерывности могут быть применимы к общему решению рассматриваемой задачи. Тогда, предполагая асимптотическое отсутствие направо распространяющейся волны на правой стороне потенциала, получаем следующие явные выражения для нормированных амплитуд прошедшей и отраженной волн:

$$t = \frac{2\varepsilon - (2i)^{\alpha} \varepsilon^{\alpha/2} \Gamma(1-\alpha) u_0}{2 \left(2\varepsilon - (-2i)^{\alpha} \varepsilon^{\alpha/2} \Gamma(1-\alpha) u_0 \right)} + \frac{1}{2},$$
(12)

$$r = \frac{2\varepsilon - (2i)^{\alpha} \varepsilon^{\alpha/2} \Gamma(1-\alpha) u_0}{2 \left(2\varepsilon - (-2i)^{\alpha} \varepsilon^{\alpha/2} \Gamma(1-\alpha) u_0 \right)} - \frac{1}{2}.$$
 (13)



Рис.1. Коэффициенты пропускания и отражения умеренно-сингулярного потенциального барьера в зависимости от энергии падающих частиц для $u_0 = 1$, $\alpha = 0.25$. Возникновения полного отражения и ненулевого пропускания при нулевой энергии обусловлены сингулярным характером потенциальной функции.

На Рис.1 показаны графики зависимости коэффициента пропускания $T = |t|^2$ и коэффициента отражения $R = |r|^2$ от энергии падающей частицы для потенциального барьера ($u_0 > 0$). Случай потенциальной ямы ($u_0 < 0$) иллюстрирован на Рис.2. Видно, что квантовое туннелирование демонстрирует явно необычное поведение в диапазонах низких и умеренных энергий: вероятность перехода через сингулярную точку начинается с ненулевого значения, а в случае потенциального барьера коэффициент отражения для некоторой падающей энергии возрастает до единицы, что отнюдь не характерно для отдельного регулярного потенциального барьера [23,24]. Естественная закономерность здесь – это восхождение к полной прозрачности при асимптотически высоких энергиях. Зависимость от мощности потенциала u_0 также неестественна (Рис.3).



Рис.2. Коэффициенты пропускания и отражения умеренно-сингулярной потенциальной ямы как функция энергии падающих частиц для $u_0 = -1$. Необычной особенностью здесь является ненулевая прозрачность в пределе нулевой энергии. Параметр α имеет то же значение, что и на Рис.1.



Рис.3. Квантовые коэффициенты туннелирования умеренно-сингулярного потенциала в зависимости от мощности u_0 при $\varepsilon = 1$.

4. Квантовое туннелирование 1D кулоновской потенциальной ямы

Для этого потенциала $u_0 < 0$ и $\alpha = 1$, а уравнение Шредингера (1) вне сингулярной точки имеет точное аналитическое решение. Чтобы избежать повторения, скажем только, что они тождественны формулам, представленным в [22], подразумевая в них, что $u_0 < 0$. Здесь важно, что одно из линейно независимых решений вместе со своей производной является регулярным. Другое решение также является регулярным, но его производная расходится логарифмически при приближении к особой точке. Первое дает нам право обратиться к постулату непрерывности волновой функции во всем пространстве, включая и сингулярное начало координат. Однако непрерывность производной волновой функции в точке сингулярности никак не следует из уравнения Шредингера для рассматриваемого кулоновского потенциала. Поэтому это условие, фамильярное для регулярных потенциалов, должно быть заменено новым. Плотность вероятностного потока представляется здесь наиболее подходящей, поскольку в ее выражении сингулярное поведение членов взаимно подавляется. Тогда после стандартной процедуры постановки и расчетов задачи туннелирования оказывается



Рис.4. Коэффициенты T и R для 1D кулоновской потенциальной ямы в зависимости от энергии падающей частицы при $u_0 = -1$. Необычными особенностями являются бесконечно ускоряющиеся колебания в пределе нулевой энергии и приближение T(R) к нулю (единице) в пределе высоких энергий. Уменьшение $|u_0|$ замедляет частоту колебаний.

возможным однозначно вывести выражения коэффициентов пропускания и отражения [22].

Эффективность туннелирования, показанная на Рис. 4, колеблется между нулем и единицей, а частота колебаний возрастает до бесконечности по мере приближения к нулевой границе энергии частицы. На высокоэнергетическом же пределе вероятность квантового прохождения (отражения) монотонно исчезает (становится полным) [22]: туннелирование 1D кулоновской ямы ведет себя аналогично туннелированию кулоновского барьера.

5. Квантовое туннелирование промежуточно-сингулярного потенциала

Вблизи начала координат остаются в силе асимптотические формулы (4) и (5), из которых следует

$$h(z) \approx \frac{u_0}{(1-\alpha)(2-\alpha)} |z|^{2-\alpha} \xrightarrow[z \to 0]{} 0.$$
(14)

Это, согласно уравнению (2), дает граничное условие $\psi(z) \xrightarrow{}_{z \to 0} 1$, означающее, что в пределе $z \to 0$ оба базисных решения уравнения Шредингера конечны. Тогда, не теряя общности, можно предположить непрерывность общей волновой функции, которая записывается в виде следующего условия:

$$a_{l,\text{plus}} + a_{l,\text{minus}} = a_{r,\text{plus}} + a_{r,\text{minus}}, \qquad (15)$$

где $a_{l(r),\text{plus}}$ и $a_{l(r),\text{minus}}$ – амплитуды вероятностей в общей волновой функции соответственно перед базисными решениями $\psi_{l(r),\text{plus}}(z)$ и $\psi_{l(r),\text{minus}}(z)$ уравнения (7) слева (справа) от особой точки потенциала. Из отсутствия отраженной волны в асимптотике $z \to +\infty$ следует условие $a_{r,\text{minus}} = 0$, и тогда условие непрерывности (15) принимает более простой вид:

$$a_{l,\text{plus}} + a_{l,\text{minus}} = a_{r,\text{plus}} \,. \tag{16}$$

На большом расстоянии плотность тока вероятности сводится к выражению

$$i \kappa (|a_{l,\text{minus}}|^2 - |a_{l,\text{plus}}|^2) (\psi_{l,\text{plus}}^* \psi_{l,\text{plus}}' - \psi_{l,\text{plus}}'^* \psi_{l,\text{plus}})$$

слева от особой точки и к выражению

$$i \kappa |a_{r,\text{plus}}|^2 (-\psi_{r,\text{plus}}^* \psi_{r,\text{plus}'} + \psi_{r,\text{plus}'}^* \psi_{r,\text{plus}})$$

справа от особой точки. Первое выражение также учитывало, что $\psi_{l,\text{minus}} = \psi_{l,\text{plus}}^*$ и $\psi_{l,\text{plus}'} = \psi_{l,\text{plus}'}^*$, которые непосредственно следуют из их явных выражений. Комбинации волновых функций в скобках отличаются от нуля и в общем случае равны с обратным знаком. Следовательно, равенство вероятностных токов подразумевает

$$|a_{l,\text{plus}}|^2 - |a_{l,\text{minus}}|^2 = |a_{r,\text{plus}}|^2.$$
 (17)

Результирующие уравнения (16) и (17) совместимы только когда $a_{l,\text{plus}} = -a_{l,\text{minus}}$. Тогда уравнение (16) утверждает, что $a_{r,\text{plus}} = 0$, то есть, промежуточный сингулярный потенциал полностью непроницаем.

6. Туннелирование обратного квадрата и сильно-сингулярного потенциалов

Уравнение состояния (1) для потенциала обратного квадрата имеет точное аналитическое решение:

$$\psi_{r,1}(z) = \sqrt{z} J_{\nu}\left(\sqrt{\varepsilon} z\right), \quad \psi_{r,2}(z) = \sqrt{z} Y_{\nu}\left(\sqrt{\varepsilon} z\right)$$
(18)

для z > 0 и аналогично для z < 0. Здесь $J_v(\cdot)$ и $Y_v(\cdot)$ функции Бесселя первого и второго рода соответственно, $v = \sqrt{0.25 + u_0}$.

Систематический анализ решений показывает, что для этой формы потенциальной функции решение задачи туннелирования зависит от знака u_0 , то есть от того, является ли потенциал барьером или ямой. В случае $u_0 > 0$, когда первое решение в (18) обнуляется в особой точке z = 0, а второе решение стремится к бесконечности, непосредственное применение условия непрерывности для волновой функции становится проблематичным. Здесь мы подходим к ней как к постулату квантовой механики, конкретизируя ее смысл в том, что при асимптотическом приближении к особой точке слева и справа соответствующие волновые функции расходились бы одинаково. Назовем это условием квазинепрерывности. В этом контексте важно, что квазинепрерывность полностью сохраняет сингулярное содержание волновой функции и переходит в обычное условие непрерывности, если задача регуляризована. После некоторой математики условия квазинепрерывности и асимптотического отсутствия отраженной волны с правой стороны потенциала гласят соответственно

$$a_{l,2} = a_{r,2} \quad \text{if } a_{r,1} = -ia_{r,2}. \tag{19}$$

И, наконец, объединение (19) с условием непрерывности вероятностного тока дает обобщенное утверждение, что

$$Im[a_{l,1}] = a_{r,2}, (20)$$

причем Re[$a_{l,1}$] остается произвольным. Тогда свободное предположение о реальной природе коэффициента $a_{l,1}$ непосредственно приводит к $a_{r,1} = a_{r,2} = 0$, то есть отсутствию волны материи справа от точки сингулярности и, соответственно, к ожидаемому результату: полной непроницаемости сингулярного барьера обратного квадрата.

В случае отрицательного значения u_0 оба решения (18) равны нулю в особой точке z = 0. Это в конечном счете делает невозможным прийти к определенному ответу о возможности туннелирования обратной квадратной потенциальной ямы в рамках подхода, представленного в данной статье.

Сильно-сингулярный потенциал с $\alpha > 2$ не имеет точного аналитического решения для уравнения Шредингера (1), и мы исходим из подхода, разработанного в пунктах 3 и 5. Ответ по существу повторяет выводы для потенциала обратного квадрата: сильно-сингулярный потенциальный барьер полностью непроницаем, а потенциальная яма находится за пределами возможностей данного подхода.

7. Заключение

В задаче квантового туннелирования сингулярного потенциала обычно применяется метод регуляризации, когда сингулярность сначала удаляется в узкой области вокруг особой точки, задача решается для этого прототипа, а затем в коэффициентах пропускания и отражения производится предельный переход сужения области регуляризации к нулю. Другой подход подразумевает физически воспринимаемые условия (расширение Фридрихса в Гильбертовом пространстве) для согласования волновой функции и ее производной по обе стороны от точки сингулярности. В частности, одномерный кулоновский потенциал в обоих подходах оказывается непроницаемым. Сохранение математической сущности сингулярности, выполненное в данной статье, резко меняет картину туннелирования при умеренно-сингулярных и 1D кулоновском потенциалах. Например, в случае умеренной сингулярности прозрачность потенциала остается конечной даже на границе нулевой энергии. В другом, кулоновском случае, прозрачность потенциала на той же энергетической границе бесконечно часто колеблется между единицей и нулем, а при переходе к высоким энергиям постепенно уменьшается до нуля.

И, наконец, потенциалы с более высокой степенью сингулярности $\alpha > 1$, как и в методах регуляризации, проявляют полную непроницаемость (при этом случай $\alpha \ge 2$ потенциальной ямы остается вне рамок разработанного подхода).

Работа выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке МОНКС РА в рамках Лаборатории исследования и моделирования квантовых явлений ЕГУ.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. K.M. Case. Phys. Rev., 80, 797 (1950).
- 2. K. Meetz. Nuovo Cimento, 34, 5738 (1964).
- 3. W.M. Frank, D.J. Land, R.M. Spector. Rev. Mod. Phys., 43, 36 (1971).
- 4. R. Loudon. Am. J. Phys., 27, 649 (1959).

- 5. L.K. Haines, D.H. Roberts. Am. J. Phys., 37, 1145 (1969).
- 6. R. Loudon. Proc. Roy. Soc. A, 472, 20150534 (2016).
- 7. G.A. Muradyan. J. Contemp. Phys., 54, 333 (2019).
- 8. W. Fisher, H. Laschke, P. Muller. J. Math. Phys., 36, 2313 (1995).
- D.M. Gitman, I.V. Tyutin, B.L. Voronov. Self-adjoint extensions in quantum mechanics, Birkhouser, 2012.
- 10. B. Simon. J. Math. Phys., 41, 3523 (2000).
- 11. I. Tsutsui, T. Fulop, T. Cheon. J. Phys. A, 36, 275 (2003).
- 12. M.V. Andrews. Am. J. Phys., 44, 1064 (1976).
- 13. C.L. Hammer, T.A. Weber. Am. J. Phys., 56, 281 (1988).
- 14. M. Moshinsky. J. Phys. A: Math. Gen., 26, 2445 (1993).
- 15. R.G. Newton. J. Phys. A: Math. Gen., 27, 4717 (1994).
- 16. M. Moshinsky. J. Phys. A: Math. Gen., 27, 4719 (1994).
- 17. V.S. Mineev. Theor. Math. Phys., 140, 1157 (2004).
- 18. C.R. de Oliveira, A.A. Verri. Annal. Phys., 324, 251 (2009).
- 19. G. Abramovici, Y. Avishai. J. Phys. A: Math. Gen., 42, 285302 (2009).
- 20. J. Dittrich, P. Exner. J. Math. Phys., 26, 2000 (1985).
- 21. H. Miyazaki, I. Tsutsui. Annal. Phys., 299, 78 (2002).
- 22. A. Muradyan, G. Muradyan. arXiv:2008.12957 [quant-ph] (2020).
- 23. D. Bohm. Quantum Theory, New York, Engelwood Cliffs: Prentice-Hall, 1951. p. 283.
- 24. E. Merzbacher. Quantum Mechanics, New York: John Willey & Sons, 1970, p. 100.

ON QUANTUM TUNNELING OF A SINGULAR POTENTIAL

A.Zh. MURADYAN

To circumvent the difficulty that the singular nature of the potential function $V(x) = V_0/|x|^{\alpha}$ introduces into physics, regularization methods are used. However, they do affect the singular nature of the problem, and so I discuss here how quantum tunneling behaves if the original singular nature of the Schrodinger equation remains untouched. For this purpose, the property of the current probability density is used, that the singular terms in it are mutually compensated. It is obtained the milder-singular potential (with $0 < \alpha < 1$) has a finite but unusual tunnel transparency, in particular, a non-zero value at zero energy of the incident particle. The transparency of a Coulomb potential wall infinitely oscillated at zero energy, and only the strongly singular potential (with $\alpha > 1$) repeats the property of regularized counterparts: be impenetrable.