

## КВАНТОВАНИЕ С УЧЕТОМ ПРОНИЦАЕМОСТИ БАРЬЕРА

В.Д.Мур, В.С.Попов

Найдена поправка к правилам квантования Бора–Зоммерфельда, связанная с учетом проницаемости барьера. Полученное уравнение определяет как положение, так и ширину квазистационарных уровней.

1. Правила квантования Бора–Зоммерфельда определяют дискретный спектр энергии<sup>1</sup>. Однако, во многих физических задачах потенциал обладает барьером, вследствие чего вместо дискретных уровней возникают квазистационарные состояния ( $E = E_r - i\Gamma/2$ ). Вследствие экспоненциального роста гамовской волновой функции при  $r \rightarrow \infty$ , численный расчет  $E_r$  и  $\Gamma$  представляет определенные трудности.

Мы рассмотрим эту задачу в квазиклассическом приближении, что дает аналитические формулы, справедливые для произвольного гладкого потенциала.

2. *Обобщение правил квантования.* Вблизи вершины барьера ( $x \approx x_m$ , см. рис. 1) используем параболическое приближение:

$$p(x) = \left(\frac{1}{4}\rho^2 - a^2\right)^{1/2}, \quad a = [U(x_m) - E]/\omega,$$

где  $\rho = \omega^{1/2}(x - x_m)$ ,  $\omega = [-U''(x_m)]^{1/2}$  и  $\hbar = m = 1$ . При этом уравнение Шредингера имеет точное решение<sup>1)</sup>

$$\psi(x) = \text{const} \cdot D_\nu(2^{1/2}e^{-i\pi/4}\rho), \quad \nu = -\left(\frac{1}{2} + ia\right),$$

удовлетворяющее условию излучения. Сшивание его с квазиклассической волновой функцией в области  $x_0 < x < x_1$  (рис. 1) приводит к условию квантования:

$$\int_{x_0}^{x_1} p(x) dx = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad N = n - \frac{1}{2\pi}\varphi(a), \quad (1)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,

$$\varphi(a) = \frac{1}{2i} \ln \left[ \Gamma\left(\frac{1}{2} + ia\right) / \Gamma\left(\frac{1}{2} - ia\right)(1 + e^{-2\pi a}) \right] + a(1 - \ln a), \quad (1')$$

$$a = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} [-p^2(x)]^{1/2} dx \quad (1'')$$

(обозначения ясны из рис. 1).

Случай  $a \gg 1$  соответствует малой проницаемости барьера. Учитывая, что

$$\varphi(a) = \frac{1}{24a} + \frac{7}{2880a^3} + \dots + \frac{i}{2}e^{-2\pi a}, \quad a \rightarrow \infty \quad (2)$$

<sup>1)</sup> Здесь  $D_\nu(z)$  – функция параболического цилиндра.

и полагая  $p(r) = \{2[E_r - \frac{i}{2}\Gamma - U(r)]\}^{1/2}$ , получаем из (1):

$$\Gamma = T^{-1} \exp(-2 \int_{r_1}^{r_2} |p| dr), \quad T = 2 \int_{r_0}^{r_1} p^{-1} dr \quad (3)$$

(формула Гамова для ширины квазистационарного уровня). Уравнения (1) обобщают ее на случай, когда энергия уровня близка к вершине барьера, так что экспоненциальная малость  $\Gamma$  исчезает. При этом параметр  $a$  является комплексным (так же, как и точки поворота  $r_{1,2}$ ). В простейших случаях интеграл (1'') вычисляется в явном виде, и его аналитическое продолжение не вызывает затруднений. Для произвольного потенциала  $U(r)$  значения  $a$  при комплексных  $E$  могут быть найдены численно из (1''), что совместно с ур. (1) определяет спектр квазистационарных состояний.

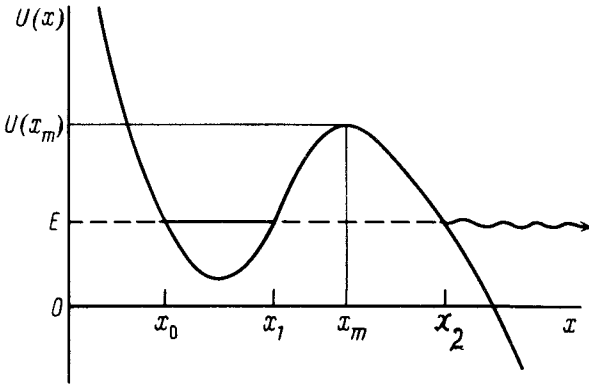


Рис.1

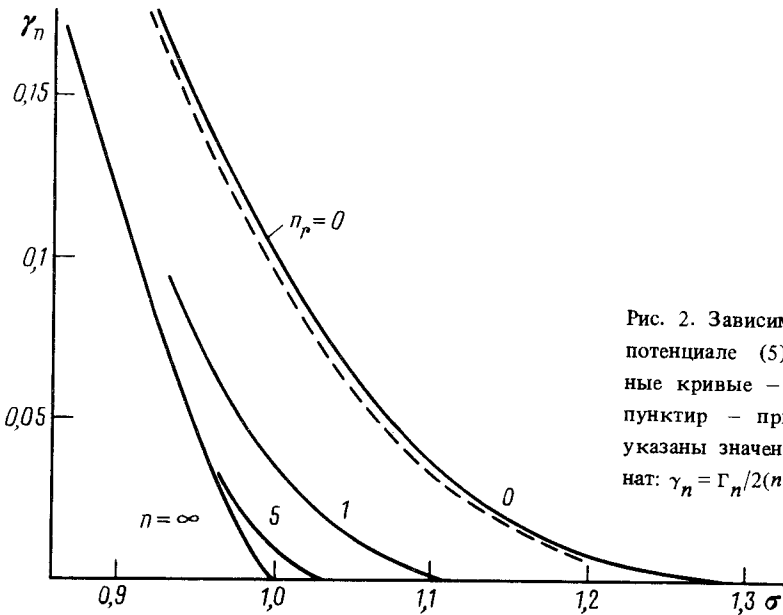


Рис. 2. Зависимость ширины  $n_s$ -уровней в потенциале (5) от параметра  $\sigma$ . Сплошные кривые – расчет по уравнению (6), пунктир – приближение (7). У кривых указаны значения  $n_r = n - 1$ , по оси ординат:  $\gamma_n = \Gamma_n / 2(n - 1/4)\omega$

Для многомерных задач с разделяющимися переменными  $q_1, \dots, q_s$  ( $s$  – число степеней свободы) также возникают уравнения типа (1). В том случае, когда  $2\pi a_i \gg 1$  ( $1 \leq i \leq s$ ), для ширины уровня можно получить обобщение формулы Гамова, которое отличается от (3) в предэкспоненциальном множителе.

Отметим, что  $\varphi(a)$  имеет логарифмические особенности в точках  $a = a_k$ ,

$$a_k = (k + 1/2)i, \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\varphi(a) = i \ln(a - a_k) + O(1) \text{ при } a \rightarrow a_k, \quad (4)$$

которые соответствуют полюсам амплитуды рассеяния на параболическом барьере (функция  $\varphi(a)$  связана с фазой рассеяния).

3. *Высшие поправки метода ВКБ.* Предыдущие формулы можно уточнить, включив в рассмотрение поправку порядка  $\hbar^2$ <sup>2,3</sup>. При этом уравнение (1) сохраняет свой вид, но функцию  $\varphi(a)$  следует заменить на  $\varphi_2(a) = \varphi(a) - 1/24a$ . Таким образом, из  $\varphi(a)$  вычитается первый член ее асимптотического разложения (ср. с (2)). Формальный параметр  $\hbar^2$  квазиклассического разложения в окончательных формулах переходит в  $1/n^2$ . Поскольку  $\varphi_2(a) = O(a^{-3})$ , то замена  $\varphi \rightarrow \varphi_2$  в правиле квантования обеспечивает вычисление энергии с точностью<sup>2)</sup> порядка  $n^{-4}$ .

4. Правило квантования (1) может иметь различные применения. Ограничимся двумя примерами.

а) Уравнение Шредингера с  $l = 0$  в потенциале

$$V(r) = -\frac{1}{2} \omega^2 (r - R)^2, \quad 0 < r < \infty \quad (5)$$

допускает точное решение. Спектр энергий определяется из уравнения

$$D_\nu(-2e^{-i\pi/4} s^{1/2}) = 0, \quad (6)$$

где  $\nu = -1/2 + iE/\omega$ ,  $s = \frac{1}{2} \omega R^2$  ( $s = V_0/\omega$ , где  $V_0$  — глубина потенциальной ямы при  $r = 0$ ). С другой стороны, (1) принимает здесь вид:

$$s\phi(\epsilon) + \frac{1}{2} \varphi(s\epsilon) = (n - 1/4)\pi, \quad (7)$$

где  $n = n_r + 1 = 1, 2, \dots$ ,

$$\epsilon = -E/V_0, \quad \phi(\epsilon) = (1 - \epsilon)^{1/2} - \epsilon \operatorname{Ar} \operatorname{th}(1 - \epsilon)^{1/2}.$$

Эти уравнения были решены численно. Вещественные части энергий, вычисленные по (6) и (7), близки друг к другу, особенно в подбарьерной области ( $\epsilon > 0$ ). Точность вычисления ширины (рис. 2) является вполне удовлетворительной даже для основного состояния. На рис. 2 переменная  $\sigma = [s/\pi(n - 1/4)]^{1/2}$ , так что  $\sigma = 1$  в момент выхода уровня в сплошной спектр (если  $n \rightarrow \infty$  и не учитывать проницаемость барьера). На этом примере видно, что область применимости ур. (1), полученного при условии  $n \gg 1$ , может "затягиваться" вплоть до небольших квантовых чисел.

б) Эффект Штарка в сильном поле (см., например,<sup>4, 5</sup> и указанные там дальнейшие ссылки). Для состояний с  $n \gg 1$  и  $|m| \ll n$  условия квантования принимают вид:

$$\beta_i (-\epsilon)^{-1/2} f(z_i) + (-1)^i \frac{F}{8n^2} (-\epsilon)^{-3/2} [g(z_i) - m^2 h(z_i)] = \nu_i, \quad (8)$$

где  $\beta_1 + \beta_2 = 1$ ,  $z_i = (-1)^i 16\beta_i F \epsilon^{-2}$  ( $i = 1$  или  $2$ )

<sup>2)</sup> Аналогично, учет в методе ВКБ поправок до  $\hbar^{2K}$  включительно — приводит к замене:  $\varphi \rightarrow \varphi_K$ , причем  $\varphi_K(a) = O(a^{-(2K-1)})$  при  $a \rightarrow \infty$ . Соответственно, точность вычисления энергии повышается до  $n^{-2K}$ .

$$v_1 = (n_1 + \frac{|m| + 1}{2}) / n, \quad v_2 = (n_2 + \frac{|m| + 1}{2} - \frac{\varphi(a)}{2\pi}) / n, \quad (9)$$

$$a = \frac{n(-\epsilon)^{3/2}}{2^{7/2} F} (1 - z_2) f(1 - z_2) + \mu^2 \frac{n F^2}{2^{1/2} (-\epsilon)^{3/2}} \times \\ \times F(3/4, 5/4; 1; 1 - z_2) + O(\mu^4). \quad (10)$$

Здесь  $\hbar = m_e = e = 1$ ,  $\epsilon = 2n^2 E^{(n_1 n_2 m)} \equiv \epsilon' - i\epsilon''$ ,  $\mu = m/n$ ,  $F = n^4 \mathcal{E}$  ( $\mathcal{E}$  — напряженность электрического поля),  $n_1, n_2$  и  $m$  — параболические квантовые числа <sup>1</sup>,  $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ , а  $f, g$  и  $h$  выражаются через гипергеометрические функции:  $f(z) = F(1/4, 3/4; 2; z)$  и т. д. При решении ур. (8) можно либо отбросить члены  $\propto F/8n^2$ , либо решать эту систему в полном виде (соответственно,  $1/n$ - и  $1/n^2$  — приближения). В таблице дана вещественная часть приведенной энергии —  $\epsilon'_n$  (взятая с обратным знаком) для состояний атома водорода с  $n_1 = n - 1$ ,  $n_2 = m = 0$ . Кроме того, приведены значения  $-\epsilon'_n$ , полученные суммированием рядов теории возмущений (по степеням  $\mathcal{E}$ ) с помощью аппроксимант Паде—Эрмита (АПЭ <sup>5</sup>). Результаты этих двух (независимых) методов полностью согласуются между собой.

$F$	$1/n$	$n = 20$ $\frac{1}{1/n^2}$	АПЭ	$1/n$	$n = 50$ $\frac{1}{1/n^2}$	АПЭ
0,20	0,48301	0,48309	0,4831	0,46307	0,46309	0,4631
0,25	0,36677	0,36695	0,3670	0,34054	0,34057	0,3406
0,30	0,2562	0,2566	0,256	0,22186	0,22193	0,222
0,35	0,1490	0,1488	0,149	0,10768	0,10775	0,108
0,40	0,0421	0,0413	0,042	—	—	—

Для ширин штарковских уровней учет проницаемости барьера в ур. (8) является особенно существенным. Сравнение с другими расчетами, а также с экспериментальными данными по штарковским резонансам показывает, что учет проницаемости барьера в правилах квантования позволяет определить  $E_r$  и  $\Gamma$  как для подбарьерных, так и для надбарьерных резонансов. Обсуждение этих результатов мы дадим в более подробной публикации.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить В.М.Вайнберга и Е.А.Соловьева за полезные обсуждения, а также А.В.Сергеева и А. В. Щерблыклина за помощь в численных расчетах.

#### Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
2. Dunham J.L. Phys. Rev., 1932, **41**, 713.
3. Bekenstein J.D., Krieger J.B. Phys. Rev., 1969, **188**, 130.
4. Лисица В.С. УФН, 1987, **153**, 379.
5. Вайнберг В.М. и др. Письма в ЖЭТФ, 1986, **44**, 9; ЖЭТФ, 1987, **93**, 450.