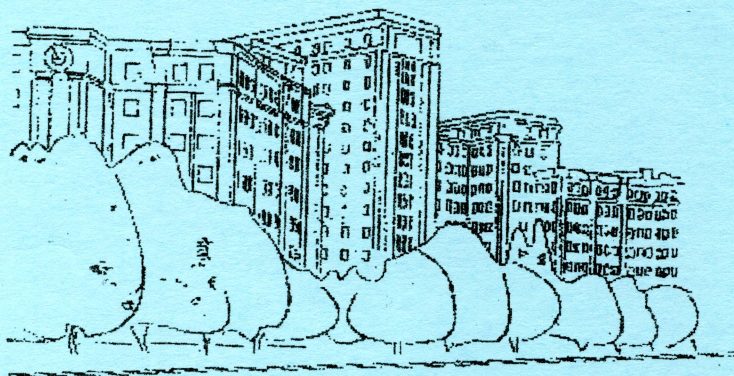


К 200-летию Харьковского университета
Серия монографий и учебных пособий

В.В.Ульянов

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ



Харьков 2002

К 60-летию кафедры теоретической физики

В.В.Ульянов

**О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ
ЧАСТИЦ В ПОЛЯХ С ОСОБЕННОСТЯМИ**

Харьков 2002

Ульянов В.В. О квазиклассическом движении частиц в полях с особенностями. Сборник статей. – Харьков: ХНУ, 2002. – 24 с.

Сборник содержит несколько статей, написанных автором в начале 70-х годов прошлого столетия и опубликованных в физических журналах (УФЖ, 1973, № 11, 1974, № 5,10,12; Физика, 1975, № 3).

Он продолжает серию изданий, приуроченную к 200-летию Харьковского университета и 60-летию кафедры теоретической физики.

Посвящается Льву Элеазаровичу Паргаманику – профессору кафедры теоретической физики, известному физику-теоретику, воспитавшему многих выдающихся специалистов.

Предназначены для научных сотрудников-теоретиков, а также преподавателей, студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

Издается по решению кафедры теоретической физики
от 12 октября 2001 года

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ДВИЖЕНИИ В ОСОБЫХ СЛУЧАЯХ

В. В. Ульянов

Квазиклассическое движение частицы с энергией, близкой к значениям потенциала в сингулярных точках типа максимумов, изломов, характеризуется рядом особых свойств. Например, время движения волновых пакетов может существенно отличаться от времени классического движения около классически недостижимых точек поворота, а правила квантования для потенциальной ямы с граничными или внутренними особенностями приводят к энергетическому спектру, в котором не выполняется обычное соотношение $\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}$.

В работах [1, 2] исследовался энергетический спектр в случае особенностей потенциальной энергии типа простого максимума внутри потенциальной ямы (или эквивалентная задача в пространстве импульсов при движении частицы с произвольным законом дисперсии в магнитном поле вблизи траекторий с самопересечением).

Представляет интерес рассмотреть влияние различных особенностей потенциала (прежде всего, степенных) на отражение от границ движения, структуру энергетического спектра в потенциальных ямах с граничными и внутренними особенностями, а также рассеяние частиц на особенностях потенциальной энергии.

1. Граничная фаза

Вдали от классической точки поворота волновая функция стационарного состояния финитного или инфинитного в одном направлении движения частицы в обычном квазиклассическом приближении может быть записана [3] в виде

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_b^x k dx - \alpha\right), \quad (1)$$

где $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$, E — энергия частицы, U — потенциальная энергия, b — левая точка поворота, α — левая граничная фаза (аналогична волновая функция и для правой границы). Когда точка поворота удалена от особой точки потенциала, граничная фаза, как известно, равна $\frac{\pi}{4}$, а для непроницаемой стенки $\frac{\pi}{2}$. Вблизи же критической энергии, соответствующей особенности потенциала (максимум, излом, заострение и т. п.), α принимает различные значения в зависимости от энергии и вида особенности и определяет «квантовое» время отражения пакета стационарных состояний

$$t_{\text{кв}} = t_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\alpha}{dE}, \quad (2)$$

$t_{\text{кл}}$ — классическое время движения до точки поворота и назад.

Когда степенная особенность находится у непроницаемой стенки (рис. 1, а), т. е. $U = -\beta x^l$ при $x > 0$ и $U = \infty$ при $x < 0$, граничная фаза в критическом диапазоне энергий $|E| \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}}$ (энергия отсчитывается от критического значения) имеет вид для $l > 2$

$$\alpha = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2(l+2)} + \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \left(\sin \frac{\pi}{l}\right)^{\Theta(-\lambda)} \operatorname{B}\left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l}\right) -$$

$$- \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{2\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \cdot \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2), \quad (3)$$



Рис. 1.

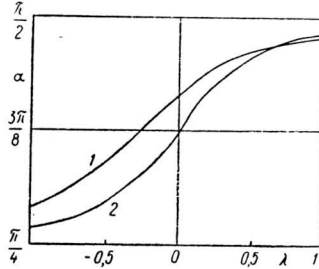


Рис. 2.

для $l = 2$ (квадратичная особенность)

$$\alpha = \frac{3\pi}{8} - \frac{\lambda}{4} \ln |\lambda| + \frac{\lambda}{4} \left(1 + \frac{\pi}{2} - C - \ln 2\right) + O(\lambda^3), \quad (4)$$

для $l = 1$ (линейная особенность)

$$\alpha = \frac{5\pi}{12} + \lambda \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} - \frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda) + O(\lambda^2). \quad (5)$$

Здесь $\lambda = E \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}$, C — постоянная Эйлера, Γ — гамма-функция,

$\Gamma_n = \Gamma\left(\frac{n}{l+2}\right)$, B — бэта-функция, а $\Theta(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0 \end{cases}$. Формулы (3) —

(5) дают хорошую точность не только при $|\lambda| \ll 1$, но и во всем критическом диапазоне $\Delta\lambda \sim 1$, где граничная фаза изменяется от $\frac{\pi}{4}$ до $\frac{\pi}{2}$

(рис. 2, 1 — линейная особенность и 2 — квадратичная, рассчитаны по точным формулам). Для $l > 2$ при критической энергии точка поворота классически недостижима, так что классическое время отражения $t_{\text{кл}} \sim$

$\sim \frac{1}{|\lambda|^{\frac{l-2}{2l}}}$ при всех $|\lambda| \ll Z^l$, т. е. в критическом диапазоне оно велико и расходится при критической энергии, а квантовое время отражения (2) конечно и слабо изменяется с энергией:

$$t_{\text{кв}} = \hbar \frac{d\lambda}{dE} \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + t'_{\text{кл}} + O(\lambda). \quad (6)$$

Для $l=2$ $t_{\text{кл}} \sim \ln \frac{1}{|\lambda|}$ переходит в критическом диапазоне энергий в

$$t_{\text{кв}} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) \right] + t'_{\text{кл}} + O(\lambda^2) \quad (7)$$

с компенсацией логарифмической расходимости, а для $l=1$

$$t_{\text{кл}} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} [V\bar{Z} - V\bar{\lambda}\Theta(\lambda)] + t'_{\text{кл}} + O\left(\frac{\lambda}{V\bar{Z}}\right) \quad (8)$$

в критическом диапазоне переходит в

$$t_{\text{кв}} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[V\bar{Z} - \frac{3^{4/3}\Gamma^2(2/3)}{4\pi} \right] + t'_{\text{кл}} + O(\lambda), \quad (9)$$

где квантовая поправка лишь сглаживает изломную энергетическую зависимость $t_{\text{кл}}$. Аналогично для всех $l < 2$. Обозначения: $Z =$

$= X \left(-\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}}$, X — интервал степенного хода потенциала, который предполагается достаточно большим, чтобы уже в нем движение перешло в квазиклассическое, т. е. $Z \gg 1$, $t'_{\text{кл}}$ — классическое время движения вне этого интервала, $\Psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma}$, $\Psi(3/4) = \frac{\pi}{2} - C - 3 \ln 2$.

Когда степенная особенность $U = -\beta x^l$ при $x > 0$ расположена у границы движения, на которой выполняется условие $\Psi'(0) = 0$ (рис. 1, б), граничная фаза в критическом диапазоне энергий имеет вид для $l > 2$

$$\alpha = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2(l+2)} + \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \left(\sin \frac{\pi}{l} \right)^{\Theta(-\lambda)} - \operatorname{B} \left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l} \right) - \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{2\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \left(1 + 2 \cos \frac{2\pi}{l+2} \right) \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2), \quad (10)$$

для квадратичной особенности

$$\alpha = \frac{\pi}{8} - \frac{\lambda}{4} \ln |\lambda| + \frac{\lambda}{4} \left(1 - \frac{\pi}{2} - C - \ln 2 \right) + O(\lambda^3), \quad (11)$$

для линейной особенности

$$\alpha = \frac{\pi}{12} - \frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda) + \lambda^2 \frac{3^{2/3} \Gamma^2(1/3)}{8\pi} + O(\lambda^4). \quad (12)$$

Формулы для времен отражения подобны (6), (7) и (9). Аналогичные результаты получены при другом расположении особенностей (рис. 1, а — у границы свободного движения, з — на плавном фоне, д — при двойной особенности).

2. Структура спектра в потенциальной яме с граничными особенностями

Правила квантования в обычном квазиклассическом приближении для одномерной потенциальной ямы [3]

$$\oint k dx = 2\pi(n + \gamma), \quad (13)$$

где n — целое число, $0 < \gamma < 1$, а величины, пропорциональные постоянной Планка, не учитываются. Обычно γ очень слабо зависит от энергии и не оказывает влияния на структуру энергетического спектра, но в критическом диапазоне вследствие сильной зависимости γ от энергии спектр перестраивается по сравнению с правилом

$$\Delta E = \hbar \omega_{\text{кл}}, \quad \text{или} \quad \hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кл}}, \quad (14)$$

$\tau_{\text{кл}}$ и $\omega_{\text{кл}}$ — период и частота классического колебания, $\hbar = 2\pi\hbar$. Для ямы с граничными особенностями $\gamma = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\pi}$, $\alpha_{1,2}$ — левая и правая граничные фазы, и из (13) для энергетической плотности спектра получаем

$$\hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d}{dE}(\alpha_1 + \alpha_2). \quad (15)$$

Правая часть этого равенства, как видно из (2), соответствует пакетному периоду колебаний, т. е. $\hbar \frac{dn}{dE} = \tau_{\text{кв}}$, а расстояние между уровнями

$$\text{энергии } \Delta E = \hbar \omega_{\text{кв}}, \quad \omega_{\text{кв}} = \frac{2\pi}{\tau_{\text{кв}}}.$$

В случае особенности у непроницаемой стенки для $l > 2$ классический период колебаний при критической энергии расходится, т. е. обычное правило (14) давало бы большую плотность спектра в критической области энергий $\frac{dn}{d\lambda} \sim \frac{1}{l-2}$. Если (6) подставить в (15), то полу-

чим, что плотность спектра конечная, плавно изменяющаяся, но в критическом диапазоне содержится лишь несколько уровней. Для квадратичной особенности классический период при критической энергии расходится логарифмически, что по правилу (14) привело бы и к расходимости плотности спектра $\frac{dn}{d\lambda} \sim \ln \frac{1}{|\lambda|}$, а квантовый период (7) конечен

и очень мало изменяется в критическом диапазоне, так что предсказываемое обычными правилами (14) логарифмическое уплотнение спектра в

критической области компенсируется квантовой добавкой за счет изменения γ и приводит к эквидистантности спектра практически во всем критическом диапазоне, где $E_n = \hbar \omega_{\text{кв}}(n - n_0)$ для $|n - n_0| \leq \ln Z$, $\omega_{\text{кв}}$ определяется (7), т. е. в критическом диапазоне содержится достаточно много уровней ($\sim \ln Z \sim \ln n_0$). Величина n_0 определяется из уравнения

$\oint k dx|_{E=0} = 2\pi [n_0 + \gamma(0)]$. Для линейной особенности классический период колебаний (8) конечен при всех энергиях, а квантовая поправка мала, но она сглаживает (см. (9)) излом плотности спектра при критической энергии ((8) и (14)), и в критической области содержится много

уровней ($\sim \sqrt{Z}$), так что спектр сохраняет приближенную эквидистантность (аналогично для всех $l < 2$). Точные количественные расчеты зависят от конкретного вида ямы. Например, если потенциал содержит только особенность, то все результаты получаются из (6), (7) и (9) при $l'_{\text{кл}} = 0$. Подобные выводы можно сделать и при другом расположении особенностей.

3. Q-решение и G-оператор

Волновую функцию стационарного состояния справа от особой точки потенциала с $x=0$ можно записать так:

$$\Psi(x) = C_2 Q_2(x) + D_2 Q_2^*(x), \quad (16)$$

где $Q(x)$ — решение уравнения Шредингера, переходящее вдали от точки поворота и особой точки потенциала в классически доступной области в квазиклассическое решение обычного приближения

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_{b_1}^x k dx\right), \quad (17)$$

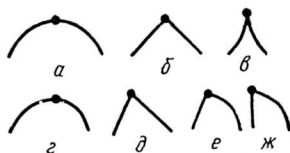


Рис. 3.

при $E < 0$ b_2 — точка поворота, а при $E > 0$ $b_2 = 0$. Вронскиан $Q^*(x)Q'(x) - Q(x)Q'^*(x) = 2i$. Обозначения параметров Q-решения

$$\varphi' = \arg Q'(0), \quad \varphi = \arg Q(0), \quad \Delta = \varphi' - \varphi, \quad \xi = \left| \frac{Q'(0)}{Q(0)} \right|. \quad (18)$$

Если классическое движение с данной энергией может происходить по обе стороны от особой точки потенциала (внутренняя особенность, рис. 3), то слева от особой точки Q-решение можно выразить через соответствующее зеркальному отражению потенциала $\tilde{U}(x) = U(-x)$ решение $\tilde{Q}(x)$, определенное при $x > 0$,

$$\Psi(x) = C_1 Q_1(x) + D_1 Q_1^*(x), \quad Q_1(x) = \tilde{Q}_1^*(-x) \exp\left(i \int_{b_0}^{b_1} k dx\right), \quad x < 0. \quad (19)$$

Здесь b_1 — точка поворота, ближайшая к особой точке потенциала слева, или $b_1 = 0$ при $E > 0$, а b_0 — следующая точка поворота.

Связь выражений (16) и (19) волновой функции по обе стороны от особой точки потенциала можно задать матрицей G перехода через особенность

$$\begin{pmatrix} C_2 \\ D_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ D_1 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

элементы которой, записанные в форме

$$\begin{aligned} G_{21} &= G_{12}^* = |G_{21}| \exp \left(i \int_{b_0}^{b_1} k dx + i\varphi_{21} \right), \\ G_{22} &= G_{11}^* = |G_{22}| \exp \left(-i \int_{b_0}^{b_1} k dx + i\varphi_{22} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

выражаются через параметры Q -решения (18) из условия непрерывности волновой функции и ее производной:

$$\begin{aligned} |G_{22}|^2 &= \frac{\left(\cos \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{2} \right)^2 + \frac{1}{4\xi_1 \xi_2} (\xi_1 - \xi_2)^2}{\sin \Delta_1 \sin \Delta_2}, \quad |G_{22}|^2 - |G_{21}|^2 = 1, \\ \varphi_{21} &= \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} (\varphi'_2 + \varphi_2 - \varphi'_1 - \varphi_1) + \arctg \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{\xi_2 + \xi_1} \operatorname{tg} \frac{\Delta_2 + \Delta_1}{2} \right), \\ \varphi_{22} &= -\frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} (\varphi'_2 + \varphi_2 + \varphi'_1 + \varphi_1) + \arctg \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{\xi_2 + \xi_1} \operatorname{tg} \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{2} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Для симметричной особенности ($\varphi'_1 = \varphi'_2 = \varphi'$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$, $\xi_1 = \xi_2$)

$$|G_{22}|^2 = (\operatorname{cosec} \Delta)^2, \quad \varphi_{21} = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_{22} = \varphi' + \varphi - \frac{\pi}{2}. \quad (23)$$

При критической энергии $E=0$ Q -решение для степенного потенциала для всех l связано с функциями Ганкеля первого рода $H_p^{(1)}(y)$

$$\begin{aligned} Q_0(\lambda) &= \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta} \right)^{\frac{1}{2(l+2)}} \left(\frac{\pi z}{l+2} \right)^{\frac{1}{2}} H_1^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right) \exp \left[i \frac{\pi(l+4)}{4(l+2)} \right], \\ z &= x \frac{2m\beta}{\hbar^2}^{\frac{1}{l+2}}, \end{aligned} \quad (24)$$

с основными параметрами Q -решения

$$\begin{aligned} \varphi'_0 &= \frac{\pi(3l+4)}{4(l+2)}, \quad \varphi_0 = -\frac{\pi l}{4(l+2)}, \quad \Delta_0 = \pi - \frac{\pi}{l+2}, \\ \xi_0 &= \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} \frac{\pi(l+2)^{\frac{l}{l+2}}}{\sin \frac{\pi}{l+2} \Gamma^2 \left(\frac{1}{l+2} \right)}, \end{aligned} \quad (25)$$

а вблизи критической энергии вычисления дают такие результаты:

$$\varphi' = \varphi_0' + f(\lambda) - \frac{1}{2} [\chi_2(\lambda) + \chi_1(\lambda)], \quad \varphi = \varphi_0 + f(\lambda) + \frac{1}{2} [\chi_2(\lambda) - \chi_1(\lambda)], \quad (26)$$

$$\Delta = \Delta_0 - \chi_2(\lambda), \quad \xi = \xi_0 \left[1 - \lambda \frac{\cos \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} \right] + O(\lambda^2),$$

где

$$f(\lambda) = \begin{cases} \operatorname{sign} \lambda |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} \frac{\left(\sin \frac{\pi}{l}\right)^{\Theta(-\lambda)}}{l+2} B\left(\frac{l-2}{2l}, \frac{1}{l}\right), & l > 2, \\ -\frac{\lambda}{4} \ln \frac{|\lambda|}{2e}, & l = 2, \\ -\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \Theta(\lambda), & l = 1, \end{cases}$$

$$\chi_1(\lambda) = \begin{cases} \lambda \frac{\operatorname{tg} \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{2\pi}{l+2} \cos \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} + O(\lambda^2), & l > 2, \\ -\frac{\lambda}{2} \left[\frac{\pi}{2} + \ln 2 + \Psi(1/4) \right] + O(\lambda^3), & l = 2, \\ -\lambda \frac{3^{1/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} + O(\lambda^2), & l = 1, \end{cases} \quad (27)$$

$$\chi_2(\lambda) = \lambda \frac{\sin \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4}}{\pi(l+2) \frac{2l}{l+2}} + O(\lambda^2).$$

4. Структура спектра в потенциальной яме с внутренней особенностью

Волновая функция стационарного состояния частицы в потенциальной яме, состоящей из двух ямок, разделенных барьером - особенностью, в соответствии с (1), (16), (17) и (19) вдали от особых точек имеет вид в

левой ямке $\Psi(x) = \frac{A}{V k} \cos\left(\int_{b_2}^x k dx - \alpha_0\right)$, а в правой — $\Psi(x) = \frac{B}{V k} \times$
 $\times \cos\left(\int_x^{b_3} k dx - \alpha_3\right)$. Связь действительных A и B дает G -оператор

$$B = A \left[G_{21} \exp(i\alpha_3 - i\alpha_0 - i \int_2 k dx) + G_{22} \exp(i\alpha_3 + i\alpha_0 - i \int_2 k dx) \right], \quad (28)$$

так что отсюда для определения энергетического спектра получается уравнение, которому, используя (21), можно придать форму

$$\cos(S_1 + S_2 - \varphi_{22}) = -\frac{|G_{21}|}{|G_{22}|} \cos(S_1 - S_2), \quad (29)$$

где

$$S_1 = \int_1 k dx - \alpha_0 + \frac{1}{2} \varphi_{21}, \quad S_2 = \int_2 k dx - \alpha_3 + \frac{1}{2} (\pi - \varphi_{21}),$$

$$\int_1 k dx = \int_{b_0}^{b_1} k dx, \quad \int_2 k dx = \int_{b_2}^{b_3} k dx. \quad (30)$$

Решение для двух ветвей энергетического спектра

$$S_1 + S_2 - \varphi_{22} \pm \arccos \left[\frac{|G_{21}|}{|G_{22}|} \cos(S_1 - S_2) \right] = \pi(2n + 1). \quad (31)$$

Для обычного максимума потенциала (симметричного квадратичного барьера) без граничных особенностей уравнения (29) и (31) переходят в уравнения, полученные в работе [1], а для вырожденного случая (одинаковые ямки) — в работе [2].

Параметры уравнения для спектра связаны с характеристиками рассеяния на разделяющем ямки барьере: коэффициент отражения

$$R = \frac{|G_{21}|^2}{|G_{22}|^2}, \quad (32)$$

а по φ_{21} и φ_{22} можно определить время прохождения пакета стационарных состояний

$$t^{\text{прох}} = t^{\text{кл}} - \hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE} \quad (33)$$

и отражения при падении слева и справа

$$t_1^{\text{отр}} = t_1^{\text{кл}} - \hbar \frac{d}{dE} (\varphi_{22} - \varphi_{21}), \quad t_2^{\text{отр}} = t_2^{\text{кл}} - \hbar \frac{d}{dE} (\varphi_{22} + \varphi_{21}), \quad (34)$$

где $t^{\text{кл}}$ — соответствующее классическое время движения частицы.

Из (31) следует, что энергетическая плотность спектра в отдельных ветвях определяется характерными «квантовыми» периодами колебаний $\tau^{(1,2)}$ (верхние индексы — номера ветвей, нижние — ямок):

$$\hbar \frac{d\eta^{(1,2)}}{dE} = \tau^{(1,2)} = \frac{\tau_1^{\text{кл}} + \tau_2^{\text{кл}}}{2} - \hbar \frac{d}{dE} \{ \alpha_0 + \alpha_3 + \varphi_{22} \mp$$

$$\mp \arccos \left[\frac{1}{R} \cos(S_1 - S_2) \right] \}, \quad (35)$$

где $\tau_1^{\text{кл}}$ и $\tau_2^{\text{кл}}$ — классические периоды колебаний в отдельных ямках, а расстояние между уровнями энергии — характерными частотами

$$\Delta E^{(1,2)} = \hbar \omega^{(1,2)}, \quad \omega^{(1,2)} = \frac{2\pi}{\tau^{(1,2)}}. \quad (36)$$

Полная плотность спектра связана с периодом колебаний проходящей сквозь барьер части пакета (33) при учете граничного отражения следующим образом:

$$h \frac{dn}{dE} = h \frac{dn^{(1)}}{dE} + h \frac{dn^{(2)}}{dE} = \tau^{\text{прох}} = \tau_1^{\text{кл}} - 2h \frac{d\alpha_0}{dE} + \tau_2^{\text{кл}} - 2h \frac{d\alpha_3}{dE} - 2h \frac{d\varphi_{22}}{dE}. \quad (37)$$

При больших энергиях, когда отражение от барьера внутри ямы мало, $R \ll 1$, $\arccos[\sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)] = \frac{\pi}{2} - \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)$, а ветви поочередно заполняют систему уровней в полной яме

$$\int_1 kdx + \int_2 kdx - \alpha_0 - \alpha_3 - \varphi_{22} = \begin{cases} 2n\pi + \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2), \\ (2n+1)\pi - \sqrt{R} \cos(S_1 - S_2), \end{cases} \quad (38)$$

так что первая ветвь соответствует уровням с четным номером, а вторая — с нечетным, с малым поправочным сдвигом. Плотность спектра в ветвях почти одинакова

$$h \frac{dn^{(1,2)}}{dE} = \frac{1}{2} \tau^{\text{прох}} \pm \left[\frac{1}{2} (\tau_1^{\text{отр}} - \tau_2^{\text{отр}}) \sqrt{R} \sin(S_1 - S_2) - \hbar \frac{d\sqrt{R}}{dE} \cos(S_1 - S_2) \right]. \quad (39)$$

При малых энергиях (глубокое туннелирование) коэффициент отражения близок к единице, $\eta = \arccos[\sqrt{R} \cos(S_1 - S_2)] - \arccos[\cos(S_1 - S_2)]$ — очень малая величина, и для двух ветвей спектра получается характерное чередование застройки системы уровней параметрами отдельных ямок [1]: если целая часть $\frac{S_1 - S_2}{\pi}$ четная, т. е. $\left[\frac{S_1 - S_2}{\pi} \right] = 2n'$, то первая ветвь определяется параметрами первой ямы по формуле

$$\int_1 kdx = \pi \left(n + n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_0 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} - \varphi_{21}) - \frac{1}{2} \eta,$$

а вторая — второй

$$\int_2 kdx = \pi \left(n - n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_3 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} + \varphi_{21} - \pi) + \frac{1}{2} \eta, \quad (40)$$

если же $\left[\frac{S_1 - S_2}{\pi} \right] = 2n' - 1$, то наоборот для первой ветви

$$\int_1 kdx = \pi \left(n - n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_3 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} + \varphi_{21} - \pi) - \frac{1}{2} \eta,$$

а для второй

$$\int_1^{\infty} k dx = \pi \left(n + n' + \frac{1}{2} \right) + \alpha_0 + \frac{1}{2} (\varphi_{22} - \varphi_{21}) + \frac{1}{2} \eta. \quad (41)$$

Вблизи критической энергии можно разложить параметры уравнения ветвей спектра по отклонению энергии от критического значения $E=0$. Возможные расходимости классических периодов колебаний $\tau_1^{\text{кл}}$ и $\tau_2^{\text{кл}}$ при критической энергии компенсируются за счет граничных α_0 , α_3 и внутренних фаз φ_{21} , φ_{22} , что приводит к конечным «квантовым» периодам, определяющим плотность спектра, которая отличается от предсказываемой (14), а уровни энергий имеют вид

$$E_n^{(1,2)} = \hbar \omega_0^{(1,2)} \left\{ n - n_0 \mp \frac{1}{2\pi} \arccos [V \bar{R}_0 \cos (S_1^0 - S_2^0)] \right\}, \quad (42)$$

n_0 удовлетворяет уравнению $S_1^0 + S_2^0 - \varphi_{22}^0 = \pi(2n_0 + 1)$. Плотность спектра и частоты определяются из (35)–(37) при $E=0$, а взаимное расположение ветвей при близких частотах из (42)

$$E_n^{(2)} - E_n^{(1)} = \frac{\hbar \omega_0}{\pi} \arccos [V \bar{R}_0 \cos (S_1^0 - S_2^0)]. \quad (43)$$

Для симметричной степенной особенности (рис. 3, а—в) из (32) и (23) коэффициент отражения

$$R = \cos^2 \left(\frac{\pi}{l+2} + \chi_2 \right), \quad (44)$$

$\varphi_{21} = \frac{\pi}{2}$, а $\varphi_{22} = 2f(\lambda) - \chi_1(\lambda)$, $\chi_{1,2}$ и f определяются (27), и из (42)

$$E_n^{(1,2)} = \hbar \omega_0^{(1,2)} \left\{ n - n_0 \mp \frac{1}{2\pi} \arccos \left[\cos \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) \right] \right\}. \quad (45)$$

Соответствующие частотам периоды

$$\begin{aligned} \tau_0^{(1,2)} = & \frac{\tau_1^{\text{отр}} + \tau_2^{\text{отр}}}{2} \pm \\ & \pm \frac{\hbar \frac{d\chi_2}{dE} \sin \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1^{\text{отр}} - \tau_2^{\text{отр}}}{2} \cos \frac{\pi}{l+2} \sin (S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{1 - \left[\cos \frac{\pi}{l+2} \cos (S_1^0 - S_2^0) \right]^2}} \end{aligned} \quad (46)$$

выражены через периоды отражения для отдельных ямок по формулам (2) и (36)

$$\tau^{\text{отр}} = \tau^{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\alpha}{dE} - 2\hbar \frac{df}{dE} + \hbar \frac{d\chi_1}{dE}. \quad (47)$$

Например, для симметричной квадратичной особенности

$$\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) + \frac{\pi}{4} \right] \pm \frac{\sqrt{\frac{2m}{\beta} \frac{\pi}{4} \cos(S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1' - \tau_2'}{2} \sin(S_1^0 - S_2^0)}}{\sqrt{2 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} + \frac{\tau_1' + \tau_2'}{2}, \quad (48)$$

и, если время движения вне особенности $\tau_1' + \tau_2' \approx \sqrt{\frac{2m}{\beta}}$, периоды почти одинаковы и неклассичны: $\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \ln Z$, а для $\tau_{(1,2)}' \ll \sqrt{\frac{2m}{\beta}}$

$$\tau_0^{(1,2)} = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \Psi(3/4) + \frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi}{4} \frac{\cos(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{2 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} \right]. \quad (49)$$

Для симметричной линейной особенности

$$\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[\sqrt[3]{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{8\pi} \right] \pm \frac{\left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \sqrt[3]{3} \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{4\pi} \cos(S_1^0 - S_2^0) + \frac{\tau_1' - \tau_2'}{2} \sin(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{4 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} + \frac{\tau_1' + \tau_2'}{2} \quad (50)$$

при $\tau_1' + \tau_2' \approx \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3}$ почти одинаковы и близки к классическому $\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \sqrt[3]{Z}$, а поправки неклассичны; при $\tau_{1,2}' \ll \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3}$

$$\tau_0^{(1,2)} = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left| \sqrt[3]{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2(2/3)}{8\pi} \left[1 \mp \frac{\sqrt[3]{3} \cos(S_1^0 - S_2^0)}{\sqrt{4 - \cos^2(S_1^0 - S_2^0)}} \right] \right|. \quad (51)$$

В (49) и (51) периоды ветвей изменяются в зависимости от $S_1^0 - S_2^0$ от значений, соответствующих особенности у непроницаемой стенки (7) и (9), до значений для границы с условием $\Psi'(0) = 0$.

Таким же образом на основе (22), (26) и (27) исследуется структура спектра и в случае несимметричных внутренних особенностей (рис. 3, г, д — одностепенные особенности, е — разностепенные, ж — скачок и степенной склон).

В случае вырождения первая ветвь спектра принадлежит четным состояниям, а вторая — нечетным, а по отношению к отдельной ямке первая ветвь соответствует особенности с граничным условием $\Psi'(0) = 0$, вторая — особенности с условием непроницаемости $\Psi(0) = 0$, так что свойства спектра определяются формулами (3) — (12).

Автор выражает благодарность И. М. Лифшицу и М. И. Каганову за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН, 78, 411, 1962.
2. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ, 33, 387, 1957.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

Харьковский госуниверситет
им. А. М. Горького

Поступила в редакцию
29.I 1973 г.

ON QUASI-CLASSICAL MOTION IN SPECIAL CASES

V. V. Ulyanov

Summary

Quasi-classical motion of a particle is considered in potential fields with such singularities as maxima, salient points, cusps, sultuses, etc. It is shown that within a certain «critical» energy range the wave packets reflection and energy spectrum structure in a potential well with boundary and internal singularities may substantially differ from those usual for the quasi-classical approximation. The results of calculations for power potentials are presented.

УДК 530.145

О ПРОЗРАЧНОСТИ СТЕПЕННОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

В. В. Ульянов

В общем случае несимметричного разностепенного потенциального барьера $U(x) = -\beta_1|x|^{l_1}$ при $x < 0$ и $U(x) = -\beta_2x^{l_2}$ при $x > 0$ коэффициент прозрачности можно представить в виде

$$T(E) = \frac{\sin \Delta_1 \sin \Delta_2}{\frac{1}{4\xi_1\xi_2}(\xi_1 + \xi_2)^2 - \left(\frac{\sin \Delta_1 - \Delta_2}{2}\right)^2}, \quad (1)$$

где вблизи критической энергии $E = 0$ при $|\lambda| \ll 1$ (мелкое туннелирование и слабое надбарьерное)

$$\begin{aligned} \Delta = \pi \frac{l+1}{l+2} - \lambda \frac{\sin \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2), \\ \xi = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} \frac{\pi(l+2)^{\frac{l}{l+2}}}{\sin \frac{\pi}{l+2} \Gamma^2 \left(\frac{1}{l+2} \right)} \times \\ \times \left[1 - \lambda \frac{\cos \frac{2\pi}{l+2} \sin \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{2l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2) \right] \end{aligned} \quad (2)$$

при соответствующих параметрах барьера $\beta_{1,2}$ и $l_{1,2}$, Γ — гамма-функция,

$$\Gamma_n \equiv \Gamma\left(\frac{n}{l+2}\right), \text{ а } \lambda = E\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}.$$

При любых l решение задачи получается с помощью функций Ганкеля для критической энергии, отклонение от которой рассматривается как возмущение ($|\lambda| \ll 1$). При этом результаты справедливы при достаточно большом интервале степенного хода потенциала $X \gg \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta}\right)^{\frac{1}{l+2}}$ (с плавным переходом к возможному фону).

Для несимметричного одностепенного барьера ($l_1 = l_2 = l$)

$$T = T(0) \left[1 + \left(\lambda_1 + \lambda_2 + 2\sqrt{\lambda_1 \lambda_2} \cos \frac{2\pi}{l+2} \right) \frac{\sin \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2) \right], \quad (3)$$

$$T(0) = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2 \frac{4(\beta_1 \beta_2)^{\frac{1}{l+2}}}{(\beta_1^{l+2} + \beta_2^{l+2})^2},$$

а для симметричного барьера $U(x) = -\beta|x|^l$

$$T = T(0) \left[1 + \lambda \frac{2 \sin \frac{2\pi}{l+2} \cos \frac{\pi}{l+2}}{\pi(l+2)^{\frac{l}{l+2}}} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2 \Gamma_3}{\Gamma_4} + O(\lambda^2) \right], \quad T(0) = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2. \quad (4)$$

При малых энергиях ($-\lambda \gg 1$) обычный расчет глубокого туннелирования дает, например, для симметричного барьера

$$T = \exp \left[-\frac{4}{l} |\lambda|^{\frac{l+2}{2l}} B\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{l}\right) \right]$$

B — бета-функция.

При больших энергиях ($\lambda \gg 1$) отражение определяется окрестностью наибольшего значения потенциала (с дальнейшим плавным изменением потенциала), и коэффициент отражения R в общем случае убывает с увеличением энергии по степенному закону. Например, для несимметричного одностепенного барьера

$$R = \frac{1}{E^{\frac{l}{l+2}}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{l}{l+2}} \frac{\Gamma^2(l+1)}{4^{l+2}} (\beta_1^2 + \beta_2^2 - 2\beta_1 \beta_2 \cos \pi l), \quad (5)$$

а для симметричного (кроме случая четных l , для которых закон убывания экспоненциальный [1], например, $R = e^{-\pi\lambda}$ для $l=2$)

$$R = \frac{1}{\lambda^{\frac{l}{l+2}}} \frac{\Gamma^2(l+1)}{4^{l+1}} \left(\sin \frac{\pi l}{2} \right)^2. \quad (6)$$

Расчеты в формулах (5) и (6) проведены с использованием теории возмущений и квазиклассических методов.

При $l=2$ с помощью функций параболического цилиндра для всех энергий получается точное решение (1) с параметрами

$$\Delta = \frac{3\pi}{4} - \operatorname{arctg} \operatorname{th} \frac{\pi\lambda}{4}, \quad \xi = \frac{2\pi \sqrt{2} \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\operatorname{ch} \frac{\pi\lambda}{2} \left| \Gamma\left(\frac{1}{4} + i \frac{\lambda}{4}\right) \right|^2}}, \quad (7)$$

что для симметричного барьера дает известный результат Кэмбла [1] $T = (1 + e^{-\pi\lambda})^{-1}$. При $l=1$ также для всех энергий можно получить точное выражение прозрачности через функции Эйри.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

УДК 530.145

О СТРУКТУРЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

В. В. Ульянов

1. Если движение частицы происходит в потенциальном поле $U(x)$, состоящем из $N-1$ одинаковых ямок и двух граничных, разделенных N одинаковыми барьерами, то методами работы [1], сочетающими точное решение вблизи особых точек потенциала с квазиклассическим приближением вдали от особенностей, зонному решению уравнения для уровней энергии можно придать форму правил квантования, имеющих при $N \rightarrow \infty$ вид

$$\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22} + (-1)^{s+1} \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (1)$$

где $k(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}$, s нумерует зоны, p — приведенный квазиимпульс, интеграл берется при $E < 0$ (энергия отсчитывается от критического значения, соответствующего вершине барьера) между точками поворота в отдельной ямке и при $E > 0$ между точками вершин соседних барьеров, расстояние между которыми равно L , T — коэффициент прозрачности отдельного барьера, а φ_{22} — фазовый параметр оператора перехода через отдельный барьер (см. [1]).

2. Средние энергии зон $\bar{E}_s$ удовлетворяют уравнению $\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \varphi_{22}$ и соответствуют квазиуровням в отдельной ямке между двумя барьерами. Энергетическая плотность зон и расстояние между их средними энергиями определяются «квантовыми» [1] периодом τ и частотой ω отражаемой части пакета стационарных состояний в отдельной ямке, переходящими при малых энергиях в классические для колебаний в отдельной ямке, а при больших энергиях — для условного колебания между точками вершин соседних барьеров:

$$\hbar \frac{ds}{dE} = \tau = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\varphi_{22}}{dE}, \quad \bar{E}_{s+1} - \bar{E}_s = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}, \quad \hbar = 2\pi\hbar. \quad (2)$$

Из уравнений (1) и (2) получаем закон дисперсии

$$E_s(p) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left(\sqrt{T} \cos \frac{pL}{\hbar} \right), \quad (3)$$

где можно считать, что $\omega = \omega(\bar{E}_s)$ и $T = T(\bar{E}_s)$, так как с изменением энергии в пределах одной зоны эти величины очень мало изменяются (при всех энергиях). Ширина зоны $\Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \arcsin \sqrt{T}$.

3. При малых энергиях (глубокое туннелирование) T экспоненциально мал, что приводит к обычному результату для зон

$$E_s(p) = E_s(0) + \frac{2(-1)^s}{\pi} \hbar \omega \sqrt{T} \left(\sin \frac{pL}{2\hbar} \right)^2, \quad \Delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \sqrt{T}. \quad (4)$$

При больших энергиях (сильное надбарьерие) $T \rightarrow 1$, щель между зонами

$$\delta E_s = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \sqrt{1 - T},$$

а закон дисперсии переходит в квадратичный (в схеме расширенных зон).

4. Вблизи критической энергии $E=0$ (мелкое туннелирование и слабое надбарьерие) из уравнения (1) следует, что

$$E_s(p) = \hbar \omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \left(\sqrt{T_0} \cos \frac{pL}{\hbar} \right) \right], \quad (5)$$

где s_0 удовлетворяет уравнению $\left(\int k dx - \Phi_{22} \right)_{E=0} = \pi \left(s_0 + \frac{1}{2} \right)$, а частоты определяются из (2) при $E=0$. Для степенных симметричных „шапок“ барьеров $U(x) = -\beta |x|^l$ с достаточно большими размерами X (т. е. при

$X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}} = Z \gg 1$) $T_0 = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2$, $\Phi_{22}^0 = 0$, и формула (5) справедлива,

если величина критического диапазона энергий $\left(\frac{\hbar^2}{m} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}} \gg |\bar{E}_s|$. При этом

$\Delta E_s = \frac{2\hbar\omega_c}{l+2}$. В частности, для $l=2$ (максимум) число зон в критическом диапазоне энергий оказывается порядка $\ln Z$, а для $l=1$ (излом) — порядка $\sqrt{Z}$.

5. При конечном N уровни энергии в зонах

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left[\sqrt{T} \cos \left(\frac{\pi n}{N} + \delta \right) \right], \quad (6)$$

$$\delta = -\frac{1}{N} \operatorname{arctg} \frac{c \sin \frac{\pi n}{N}}{1 - c \cos \frac{\pi n}{N}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1,$$

где отброшены члены порядка N^{-2} , а величина

$$c = \frac{\sqrt{T} \cos(S_1 + S_2 - \int k dx)}{\sqrt{1 - T \cos(S_1 - S_2) + \cos(S_1 + S_2 - \varphi_{22})}}$$

учитывает влияние граничных ямок и граничных условий в них (параметры S_1 и S_2 из [1]). Граничные уровни образуют две ветви энергетического спектра, исследование которых аналогично проведенному в [1] для случая потенциальной ямы с одной внутренней особенностью.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Ульянов, УФЖ, 18, 1848, 1973.

УДК 530.145

О КВАЗИУРОВНЯХ В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛОВУШКАХ

В. В. Ульянов

1. В односторонней ловушке (одномерной потенциальной яме, отделенной барьером от области инфинитного движения частицы в одном направлении) отношение I квадратов амплитуд волновой функции стационарного состояния в яме и вне ее, а в двусторонней ловушке (потенциальной яме между двумя одинаковыми или являющимися зеркальным отражением друг друга барьерами) коэффициент прозрачности T_2 имеют резонансный характер. Рассчитывая методами работы [1], получаем

$$I = \frac{1 + \sqrt{R}}{1 - \sqrt{R}} \left[1 + 4 \sqrt{R} \left(\frac{\sin \varepsilon}{1 - \sqrt{R}} \right)^2 \right]^{-1}, \quad T_2 = \left[1 + 4R \left(\frac{\sin \varepsilon}{T} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (1)$$

где $\varepsilon = \int k dx - \pi n - \Phi$ (n — целое) с интегралом между точками поворота в яме при $E < 0$, а при $E > 0$ — между точкой поворота в яме и точкой вершины барьера для односторонней ловушки и точками вершин барьеров для двусторонней (энергия отсчитывается от критического значения, соответствующего вершине барьера), T и R — коэффициенты прозрачности и отражения для отдельного барьера. Для односторонней ловушки $\Phi = \alpha + \frac{1}{2}(\varphi_{22} + \pi - \varphi_{21})$, а для двусторонней — $\Phi = \varphi_{22} + \frac{\pi}{2}$ при одинаковых барьерах и $\Phi = \varphi_{22} + \pi - \varphi_{21}$ при зеркальных, φ_{21} и φ_{22} — фазы оператора перехода через отдельный барьер, α — граничная фаза в яме (все фазы определены в [1]).

2. Максимумы I и T_2 (1) достигаются при $\varepsilon = 0$, что дает квазиуровни E_n , энергетическая плотность которых определяется «квантовым» [1] периодом τ колебаний отражаемой части пакета стационарных состояний: $\hbar \frac{dn}{dE} = \tau = \tau_{кл} - 2\hbar \frac{d\Phi}{dE}$ с соответствующими Φ , $\tau_{кл}$ — классический пе-

риод, а расстояние между квазиуровнями — «квантовой» частотой ω :

$$\Delta E = \hbar\omega, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}. \quad (2)$$

Вычисления приводят к следующим выражениям для ширины γ квазиуровней ($E_n - i\gamma$) в односторонней (индекс 1) и в двусторонней (индекс 2) ловушках:

$$\gamma_1 = \frac{\hbar\omega}{2\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R}}, \quad \gamma_2 = \frac{\hbar\omega}{\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R}}. \quad (3)$$

При малых энергиях (глубокое туннелирование) T экспоненциально мал и получается обычный результат: $\gamma_1 = \frac{\hbar\omega}{4\pi} T$, $\gamma_2 = \frac{\hbar\omega}{2\pi} T$, где ω — классическая частота, а при больших энергиях (сильное надбарьерное) $R \rightarrow 0$ и квазиуровни размываются.

3. Вблизи критической энергии $E=0$ (мелкое туннелирование и слабое надбарьерное) для квазиуровней получаем

$$E_n = \hbar\omega_0(n - n_0), \quad \gamma_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R_0}}, \quad \gamma_2 = \frac{\hbar\omega_0}{\pi} \ln \frac{1}{\sqrt{R_0}}, \quad (4)$$

частоты определяются из (2) при $E=0$, а $ln_0 = \left(\int k dx - \Phi \right)_{E=0}$. При этом для степенных симметричных шапок барьеров $U(x) = -\beta |x|^l$ с достаточно большими размерами $X \gg (\hbar^2/2m\beta)^{1/(l+2)}$ (m — масса частицы) формула (4) справедлива при $|E_n| \ll \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/(l+2)} \beta^{l/(l+2)}$, а $R_0 = \left(\cos \frac{\pi}{l+2} \right)^2$, так что

$$\begin{aligned} I(\epsilon) &= \left[\operatorname{ctg} \frac{\pi}{2(l+2)} \right]^2 \left[1 + \cos \frac{\pi}{l+2} \left(\sin \frac{\pi}{2(l+2)} \right)^{-4} (\sin \epsilon)^2 \right]^{-1}, \\ T_2(\epsilon) &= \left[1 + 4 \left(\cos \frac{\pi}{l+2} \right)^2 \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^{-4} (\sin \epsilon)^2 \right]^{-1}, \\ \epsilon &= \pi \frac{E - E_n}{\hbar\omega_0}, \quad \gamma_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi} \ln \sec \frac{\pi}{l+2}, \quad \gamma_2 = \frac{\hbar\omega_0}{\pi} \ln \sec \frac{\pi}{l+2}. \end{aligned} \quad (5)$$

В частности, при $l=2$ (простой максимум) в критическом диапазоне энергий $|E| \lesssim \hbar \sqrt{\frac{\beta}{m}}$ число квазиуровней порядка $\ln Z$ и для односторонней ловушки

$$I(\epsilon) = [3 - 2\sqrt{2} + 4\sqrt{2}(\sin \epsilon)^2]^{-1}, \quad \frac{I_{\max}}{I_{\min}} \approx 34, \quad \gamma_1 = \frac{\ln 2}{4\pi} \hbar\omega_0, \quad (6)$$

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{m}{2\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \psi\left(\frac{3}{4}\right) + \frac{\pi}{4} \right] + \tau'_{\text{кл}}, \quad Z = X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{1/4},$$

а для двусторонней

$$T_2(\epsilon) = \frac{1}{1 + 8(\sin \epsilon)^2}, \quad \gamma_2 = \frac{\ln 2}{2\pi} \hbar\omega_0, \quad (7)$$

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \psi\left(\frac{3}{4}\right) + \frac{\pi}{4} \right] + \tau'_{\text{кл}}, \quad \psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma},$$

при $l = 1$ (симметричный излом) в критическом диапазоне энергий $|E| \lesssim (\hbar^2 \beta^2 / 2m)^{1/3}$ число квазиуровней порядка $\sqrt{Z}$ и для односторонней ловушки

$$I(\epsilon) = \frac{3}{1 + 8(\sin \epsilon)^2}, \quad \frac{I_{\max}}{I_{\min}} = 9, \quad \gamma_1 = \frac{\ln 2}{2\pi} \hbar \omega_0, \quad (8)$$

$$\tau_0 = \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[\sqrt{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2\left(\frac{2}{3}\right)}{8\pi} \right] + \tau'_{\text{кл}}, \quad Z = X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{1/3},$$

а для двусторонней

$$T_2(\epsilon) = \frac{1}{1 + \frac{16}{9}(\sin \epsilon)^2}, \quad \gamma_2 = \frac{\ln 2}{\pi} \hbar \omega_0, \quad (9)$$

$$\tau_0 = \left(\frac{16m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[\sqrt{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2\left(\frac{2}{3}\right)}{8\pi} \right] + \tau'_{\text{кл}},$$

Γ — гамма-функция, $\tau'_{\text{кл}}$ — классическое время движения частицы вне шапок барьеров.

4. Исследованы особенности одномерных квантовых движений частицы в ловушках. Квазиклассические методы в сочетании с точным решением вблизи вершин барьеров приводят к достаточно общим результатам при произвольных формах потенциальных моделей ловушек. Полученные формулы имеют несложный вид и содержат лишь параметры, имеющие простой физический смысл, а также охватывают практически все значения энергии, среди которых особый интерес представляет критический диапазон вблизи вершинной энергии, где по классической картине совершается переход от финитно-инфинитного движения к инфинитному и где квантовые резонансные свойства сохраняются, сглаживаясь с увеличением энергии.

Вычислены характеристики ловушек (1), определяющие свойства как стационарных состояний (резонанс), так и квазистационарных (распад). Они выражены через меры рассеяния на отдельном барьере и параметры ямы. При этом T и R слабо изменяются с энергией, так что основное изменение определяется величиной ϵ . С точки зрения стационарной задачи квазиуровни — это значения энергии, при которых наступает резонанс, в частности, полная прозрачность двусторонней ловушки.

Положение полюсов аналитического продолжения зависимостей $T_2(E)$ и $I(E)$ в область комплексных энергий ($E_n - i\gamma$) то же, что и для плотности распределения по энергиям в пакете стационарных состояний, занимающем вначале всю яму (по координатам). При этом вещественная часть E_n определяет среднее значение энергии квазистационарного состояния и в первом приближении равна энергии квазиуровня (вообще говоря, имеется сдвиг), а мнимая часть γ определяет время жизни квазистационарного состояния и ширину резонанса.

Рассмотрена критическая область энергий (4), где для степенной зависимости потенциала вблизи вершин барьеров вычисления приводят к несложным формулам (5). Наиболее интересные случаи вершин с простым максимумом (6), (7) и изломом (8), (9) рассчитаны с учетом возможного плавного перехода к нестепенной зависимости потенциала.

Аналогичные результаты получаются и в случае разных барьеров двусторонней ловушки, где прозрачность в резонансе, однако, не становится полной.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Ульянов, УФЖ, 18, 1848, 1973.

О ПРОЗРАЧНОСТИ ЦЕПОЧКИ ОДИНАКОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ

В. В. Ульянов

1. В работе [1] рассмотрена задача о связанных состояниях частицы в случае одномерного периодического потенциала с различными граничными условиями. В настоящей работе решается аналогичная задача о квазистационарных состояниях, соответствующих инфинитному движению. Оба подхода в пределе неограниченного потенциала дают одинаковые результаты для зонного энергетического спектра и дополняют друг друга, давая картину происхождения зонной структуры с учетом влияния конечности протяженности потенциала и граничных условий. С другой стороны, рассматривается внешняя задача резонансного отражения волн периодической системой. Обе задачи решаются вычислением коэффициента прозрачности, полюсы аналитического продолжения которого дают среднюю энергию и ширину энергетического распределения (определяющую время жизни) квазистационарного состояния, совпадающих в первом приближении соответственно с резонансными значениями.

2. При прохождении частиц сквозь N одинаковых потенциальных барьеров с одинаковыми ямками между ними коэффициент прозрачности, рассчитанный квазиклассическими методами в сочетании [2] с точным решением вблизи особых точек потенциала, имеет вид

$$T_N = \left[1 + \frac{R}{T} \left(\frac{\sin Nv}{\sin v} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (1)$$

где $\overline{T} \cos v = \cos \left(\int k dx - \Phi_{22} \right)$ с интегралом между точками поворота в отдельной ямке при $E < 0$ и точками вершин соседних барьеров при $E > 0$ (энергия отсчитывается от критического значения, соответствующего вершине барьера), T и R — коэффициенты прозрачности и отражения для отдельного барьера, а Φ_{22} характеризует [2] потерю фазы волновой функции при отражении от отдельного барьера.

3. Резонансная прозрачность $T_N = 1$ наступает при квазиуровнях $E_s(n)$, образующих зоны с $N-1$ подуровнями в каждой (s — номер зоны, n — номер подуровня в зоне) и вычисляемых из уравнения в форме правила квантования

$$\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \Phi_{22} + (-1)^{s+1} \arcsin \left(\bar{T} \cos \frac{\pi n}{N} \right), \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (2)$$

так что

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left(\sqrt{\bar{T}} \cos \frac{\pi n}{N} \right), \quad (3)$$

где $\omega = \omega(\bar{E}_s)$ и $T = T(\bar{E}_s)$. Средние энергии зон $\bar{E}_s$ совпадают с квазиуровнями в цепочке из двух барьеров и следуют из уравнения $\int k dx = \pi \left(s + \frac{1}{2} \right) + \Phi_{22}$, а «квантовая» частота ω определяет [2] расстояние между средними энергиями зон и энергетическую плотность зон:

$$\bar{E}_{s+1} - \bar{E}_s = \hbar \omega, \quad \hbar \frac{ds}{dE} = \tau = \tau_{\text{кл}} - 2\hbar \frac{d\Phi_{22}}{dE}, \quad \omega = \frac{2\pi}{\tau}, \quad (4)$$

$\tau_{\text{кл}}$ — соответствующий классический период. Ширина зоны $\Delta E_N = \frac{2}{\pi} \hbar \omega \arcsin \left(V \bar{T} \cos \frac{\pi}{N} \right)$. Положение полюсов $(E - i\gamma)$ аналитического продолжения T_N в формуле (1) дает при $N \gg 1$ ширину квазиуровней

$$\gamma = \frac{\hbar \omega V \bar{T} \sin \frac{\pi n}{N}}{\pi N \sqrt{1 - T \left(\cos \frac{\pi n}{N} \right)^2}} \operatorname{Arsh} \left(\sqrt{\frac{\bar{T}}{R}} \sin \frac{\pi n}{N} \right). \quad (5)$$

Между подуровнями в зоне прозрачность достигает минимальных значений: вблизи средней энергии зоны $T_N = T$, а у краев $T_N = \left(1 + \frac{R}{T} N^2 \right)^{-1}$. Прозрачность наименьшая в середине щели между зонами, где $T_N = 4T^N (1 + V\bar{R})^{-2N}$ при $N \gg 1$.

4. В окрестности критической энергии (мелкое туннелирование и слабое надбарьерное) решение уравнения (2) имеет вид

$$E_s(n) = \hbar \omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \left(V \bar{T}_0 \cos \frac{\pi n}{N} \right) \right], \quad (6)$$

где $\pi \left(s_0 + \frac{1}{2} \right) = \left(\int k dx - \Phi_{22} \right)_{E=0}$, а частоты получаются из (4) при $E = 0$. Для степенных симметричных «шапок» барьеров $U(x) = -\beta |x|^l$ с

достаточно большими размерами $X \gg \left(\frac{\hbar^2}{2m\beta} \right)^{\frac{1}{l+2}}$ (m — масса частицы) $T_0 = \left(\sin \frac{\pi}{l+2} \right)^2$ и выражение (6) верно при $|\bar{E}_s| \ll \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{\frac{2}{l+2}}$. Так, при $l = 2$ (простой максимум в вершине отдельного барьера) в критическом диапазоне энергий $|E| \lesssim \hbar \sqrt{\frac{\beta}{m}}$ содержится порядка $\ln Z$ зон с параметрами вблизи критической энергии согласно (4) — (6):

$$E_s(n) = \hbar \omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \frac{\cos \frac{\pi n}{N}}{\sqrt{2}} \right],$$

$$Z = X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{1/4},$$

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{2m}{\beta}} \left[\ln Z - \frac{1}{2} \psi \left(\frac{3}{4} \right) + \frac{\pi}{4} \right] + \tau'_{\text{кл}}, \quad \psi = \frac{\Gamma'}{\Gamma}, \quad (7)$$

при $l=1$ (симметричный излом) в критическом диапазоне энергий $|E| \lesssim \left(\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \right)^{1/3}$ число зон имеет порядок 1, Z , а параметры зон вблизи критической энергии равны

$$E_s(n) = \hbar \omega_0 \left[s - s_0 + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \arcsin \frac{\sqrt{3} \cos \frac{\pi n}{N}}{2} \right],$$

$$\tau_0 = 2 \left(\frac{2m\hbar}{\beta^2} \right)^{1/3} \left[\sqrt{Z} - \frac{3^{4/3} \Gamma^2 \left(\frac{2}{3} \right)}{8\pi} \right] + \tau'_{\text{кл}}, \quad (8)$$

$$Z = X \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{1/3},$$

Γ — гамма-функция, $\tau'_{\text{кл}}$ — классическое время движения вне «шапок» барьеров.

В области малых энергий (глубокое туннелирование) T экспоненциально мал, так что выражения (3) и (5) переходят в

$$E_s(n) = \bar{E}_s + \frac{(-1)^{s+1}}{\pi} \hbar \omega \sqrt{T} \cos \frac{\pi n}{N}, \quad (9)$$

$$\gamma = \frac{\hbar \omega}{\pi N} T \left(\sin \frac{\pi n}{N} \right)^2$$

с классической частотой ω . При больших энергиях (сильное надбарьерное) $T \rightarrow 1$ и квазиуровни размываются.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Ульянов, УФЖ, 19, 867, 1974.
2. В. В. Ульянов, УФЖ, 18, 1848, 1973.

В. В. УЛЬЯНОВ

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ РАЗЛОЖЕНИИ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ СТЕПЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА

В работе получены асимптотические разложения волновых функций стационарных состояний для движения частицы в эффективном одномерном потенциальном поле, имеющем степенное поведение в некотором интервале координат.

Решение стационарного уравнения Шредингера для одномерного движения частицы с массой m и энергией E в степенном потенциальном поле $U(x) = -\beta x^l$, $x > 0$, $\beta > 0$, в координатном представлении при $l=1$ можно выразить через функции Эйри (по Фоку [1]) $w(-z-\lambda) = u(-z-\lambda) + iv(-z-\lambda)$, а при $l=2$ — через

функции параболического цилиндра $D_{-\frac{1}{2} + i \frac{\lambda}{2}} \left(z \sqrt{2} e^{-i \frac{\pi}{4}} \right)$ и при всех l для

$E=0$ — через функции Ганкеля, например, первого рода: $V \tilde{z} H_{1/l+2}^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right)$. Во всех случаях второе решение можно взять комплексно сопряженным первому. Обозначения: безразмерные энергия $\lambda = E \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{l}{l+2}} \beta^{-\frac{2}{l+2}}$ и координата

$$z = x \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{l+2}}.$$

Все эти решения для расчетов в надбарьерной области движения можно представить через функции $\frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left(i \int^x K dx \right)$, где для величины K квазиклассическое разложение с учетом членов четвертого порядка по постоянной Планка $\hbar$ имеет вид

$$K(x) = \kappa(x) \left[1 + \frac{5}{64} \frac{\hbar^2 F^2}{m T^3} - \frac{1}{16} \frac{\hbar^2 F'}{m T^2} - \frac{1105}{8192} \frac{\hbar^4 F^4}{m^2 T^6} - \frac{19}{512} \frac{\hbar^4 (F')^2}{m^2 T^4} + \frac{221}{1024} \frac{\hbar^4 F^2 F'}{m^2 T^5} - \frac{7}{128} \frac{\hbar^4 F F''}{m^2 T^4} + \frac{1}{128} \frac{\hbar^4 F'''}{m^2 T^3} + O(\hbar^6) \right], \quad (1)$$

$$\kappa(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m[E - U(x)]}, \quad T = E - U(x), \quad F = -\frac{\partial U}{\partial x}, \quad F' = \frac{\partial F}{\partial x}$$

и т. д. В обычном квазиклассическом приближении $K(x) = \kappa(x)$, а члены в скобках порядка $\hbar^2$ соответствуют приведенным в [2].

Вдали от классических точек поворота при $\lambda \leq 0$ и для всех x при $\lambda \gg 1$ получается следующее квазиклассическое разложение модулей и фаз функций Эйри

$$w(-z - \lambda) = \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{6}} \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left\{ i \left[\frac{\pi}{4} + \frac{2}{3} \lambda^{\frac{3}{2}} \Theta(\lambda) + \int_b^x \kappa dx + \int_x^\infty (\kappa - K) dx \right] \right\},$$

$$\Theta(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Для функций параболического цилиндра такое разложение имеет вид

$$D_p[(1-i)z] = \left(\frac{m\beta}{2\hbar^2 K i} \right)^{1/8} \exp \left\{ \frac{\pi\lambda}{8} + i \left[\frac{\pi}{8} + \frac{\lambda}{4} \ln \frac{|\lambda|}{2e} + \int_b^x \kappa dx - \int_x^\infty K dx \right] \right\}, \quad (3)$$

$$2p = i\lambda - 1.$$

В формулах (2) и (3) b — точка поворота при $\lambda < 0$ и $b = 0$ при $\lambda > 0$. Для функций Ганкеля первого рода —

$$\sqrt{z} H_{l/2+2}^{(1)} \left(\frac{2}{l+2} z^{\frac{l+2}{2}} \right) =$$

$$= \left(\frac{2m\beta}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2(l+2)}} \left(\frac{l+2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{K}} \exp \left\{ i \left[-\frac{\pi(l+4)}{4(l+2)} + \int_0^x \kappa dx + \int_x^\infty (\kappa - K) dx \right] \right\}. \quad (4)$$

Аналогичные результаты получаются и в подбарьерной области движения при $\lambda < 0$, а также для потенциала $U(x) = \beta x^l$, $x > 0$, $\beta > 0$, вдали от точек поворота в классически доступной и недоступной областях движения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В. А. Фок. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн, «Сов. радио», М., 1970. [2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.

Наукове видання

Володимир Володимирович Ульянов
ПРО КВАЗІКЛАСИЧНИЙ РУХ ЧАСТИНОК
У ПОЛЯХ З ОСОБЛИВОСТЯМИ

Збірка статей

Відповідальний за випуск О.М.Єрмолаєв

Підп. до друку 5.06.2002. Формат 60х84 1/16. Папір офсетний
Друк ризографічний. Ум. друк. арк. 1,4. Обл.-вид. арк. 1,6.

ХНУ, 61077 Харків, пл. Свободи, 4.
Видавничий центр

