УДК 530.145

# К ОПИСАНИЮ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ ПОД БАРЬЕРОМ

**А. К. Зайченко**

*Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев*

Получены приближенные выражения для нестационарных волновых функций, описывающих движение частиц под прямоугольным потенциальным барьером, и их параметров. Предложен простой метод уточнения значений этих величин.

## Введение

Движение частиц в ограниченной области пространства описывается волновыми пакетами [1]. При описании, например, одномерного движения частиц вдоль оси $x$ волновой пакет (ВП) обычно представляют в виде суперпозиции

$$\varphi(x,\,t)=\int_0^\infty g(k)F(k,\,x)\exp(-iEt/\hbar)\,dk \qquad (1)$$

стационарных волновых функций $F(k,x)$ частиц с волновым числом $k$, массой $m$ и энергией $E=\hbar^2k^2/2m$ с весами

$$g(k)=C\exp\left\{-\left[\left(k-\bar{k}\right)/2\Delta k\right]^2\right\},$$

$$C=[(2\pi)^{3/2}\Delta k]^{-1/2}, \qquad (2)$$

где $C$ – нормировочный множитель, $\bar{k}$ – среднее значение волнового числа частиц в пакете, а $\Delta k$ – параметр ширины пакета. Для описания туннелирования весовые множители (2) в ВП (1) следует заменить распределениями [2]

$$g(k)=C\exp\left\{-\left[\left(k-\bar{k}\right)/2\Delta k\right]^2-i(k-\bar{k})x_0\right\}, \quad (3)$$

где $x_0<0$ – точка приготовления (источник) ВП. Если точка $x_0$ выбрана достаточно далеко слева от барьера, чтобы взаимодействием ВП с барьером в момент времени $t=0$ можно было пренебречь, то налетающий ВП можно получить подстановкой в ВП (1) стационарной волновой функции свободного движения $F(k,x)=\exp(ikx)$ и последующим интегрированием [2, 3]:

$$\psi_{in}(x,\,t)=C_0 s_{in}^{-1/2}\exp\left[-\frac{(x-x_{in})^2}{2s_{in}}+i\bar{k}x-i\bar{E}t/\hbar\right], \quad (4)$$

где

$$x_{in}=x_0+\mathrm{v}t, \qquad C_0=(s_0/\pi)^{1/4},$$

$$s_{in}=s_0+i\hbar t/m, \qquad s_0=(\Delta k)^{-2}/2, \qquad (5)$$

$\mathrm{v}=\hbar\bar{k}/m$, а $\bar{E}=\hbar^2\bar{k}^2/2m$. Из этих формул видно, что в момент времени $t=0$ центр налетающего ВП находится в точке $x=x_0$, а амплитуда и начальная ширина этого ВП определяются параметром $\Delta k$. Таким образом, интегральное представление ВП (1) с весовыми множителями (3) удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера для свободного движения и содержит все необходимые начальные и граничные условия. В экспериментах величина $\Delta k$ обычно значительно меньше величины $\bar{k}$. В работе [4], например, использовался пучок нейтронов со значением $\Delta k=0,05\bar{k}$.

Отраженную, подбарьерные и прошедшую компоненты ВП тоже можно получить подстановкой в формулу (1) соответствующих стационарных волновых функций и последующим приближенным интегрированием. Приближенные выражения для отраженной и прошедшей компонент ВП были найдены в работе [5]. Там же были найдены и приближенные выражения для параметров, определяющих амплитуды, положения центров и ширины этих компонент в различные моменты времени. Они нужны для определения вероятности отражения ВП барьером, вероятности прохождения ВП сквозь барьер и времени туннелирования. Целью этой работы является вывод выражений для подбарьерных компонент ВП и их параметров. Они необходимы для исследования движения частиц под барьером. Туннелирование играет важную роль во многих процессах в биологии, квантовой электронике, физике и химии, поэтому оно должно быть изучено и само по себе.

## Приближенное представление подбарьерных компонент

Ограничимся простейшим случаем туннелирования частиц слева направо вдоль оси $x$ сквозь прямоугольный потенциальный барьер шириной $a$ и высотой $U_0$, локализованный в интервале [0, $a$]. ВП (1) в этом случае можно представить в виде

$$\varphi(x,t) = \int_0^{\sqrt{V_0}} g(k) f(k,x) \exp(-iEt/\hbar)\, dk +$$

$$+ \int_{\sqrt{V_0}}^{\infty} g(k) h(k,x) \exp(-iEt/\hbar)\, dk , \qquad (6)$$

где $V_0 = 2mU_0/\hbar^2$, $f(k,x)$ – стационарная волновая функция частиц под барьером, а $h(k,x)$ – над барьером. Из формулы (3) видно, что основной вклад в интегралы в формуле (6) дает область волновых чисел $\bar{k} - 2\Delta k \le k \le \bar{k} + 2\Delta k$. Рассмотрим случай, когда $\bar{k} + 2\Delta k < \sqrt{V_0}$. В этом случае вторым интегралом в формуле (6) можно пренебречь.

Под барьером стационарная волновая функция частицы равна сумме

$$f(k,x) = A_+(k)\exp(-qx) + A_-(k)\exp(+qx)$$

экспоненциально затухающего и экспоненциально нарастающего решений стационарного уравнения Шредингера с амплитудами

$$A_\pm(k) = \pm k(k \pm iq)\exp(\pm qa)/d , \qquad (7)$$

где $q = [V_0 - k^2]^{1/2}$, а $d = (k^2 - q^2)\,\mathrm{sh}(qa) + 2ik\,\mathrm{ch}(qa)$. Составим волновые функции

$$\varphi_\pm(x,t) = \int_0^\infty g(k) A_\pm(k) \exp(\mp qx - iEt/\hbar)\, dk \qquad (8)$$

из этих решений с весовыми множителями (3). Нетрудно убедиться, что волновые функции (8) удовлетворяют нестационарному уравнению Шредингера для подбарьерного движения

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U_0\psi . \qquad (9)$$

Из определений (7) следует, что амплитуды $A_\pm(k)$ – гладкие функции энергии. Представим их в виде

$$A_\pm(k) = \exp(2i\delta_\pm(k)) . \qquad (10)$$

Ограничимся тремя первыми членами в разложениях

$$\delta_n(k) = \delta_n(\bar{k}) + \delta_n'(\bar{k})(k - \bar{k}) +$$

$$+ (1/2)\delta_n''(\bar{k})(k - \bar{k})^2 + \cdots, \qquad (11)$$

$$q = \bar{q} + q'(\bar{k})(k - \bar{k}) + (1/2)q''(\bar{k})(k - \bar{k})^2 + \cdots, \qquad (12)$$

где $\bar{q} = [V_0 - \bar{k}^2]^{1/2}$, а штрих обозначает дифференцирование по волновому числу $k$. В этом случае интегрирование в формуле (8) приводит к выражениям

$$\psi_\pm(x,t) = C_\pm s_\pm^{-1/2} \exp\left[\frac{(x - x_\pm)^2}{2s_\pm} \mp \bar{q}x - i\frac{\bar{E}}{\hbar}t\right] \qquad (13)$$

с параметрами

$$C_\pm = C_0 A_\pm(\bar{k}) , \qquad (14)$$

$$x_\pm(t) = i(\bar{q}/\bar{k})[(\pm x_0 \mp 2\delta_\pm'(\bar{k}) \pm \mathrm{v}t] \qquad (15)$$

и

$$s_\pm(x,t) = (\bar{q}/\bar{k})^2[s_0 - 2i\delta_\pm''(\bar{k}) + q''(\bar{k})x + i(\hbar/m)t] \qquad (16)$$

(в этих формулах учтено, что $\bar{q}' = -\bar{k}/\bar{q}$). При учете большего числа членов в разложениях (11) и (12) интегралы в формуле (8) не выражаются через элементарные функции.

Выражения (13) - (16) приближенные. Они дают только общий вид волновых функций $\psi_\pm(x,t)$ и приближенную структуру их параметров. Для уточнения этих выражений выясним вначале, при каких значениях параметров $x_\pm$ и $s_\pm$ волновые функции (13) удовлетворяют уравнению (9).

## Решения нестационарного уравнения Шредингера

Прямой подстановкой нетрудно убедиться, что волновые функции (13) удовлетворяют уравнению (9), если

$$x_\pm(t) = x_\pm^0 \pm i(\hbar\bar{q}/m)t , \qquad (17)$$

$$s_\pm(t) = s_\pm^0 - i(\hbar/m)t , \qquad (18)$$

где $x_\pm^0$ и $s_\pm^0$ – начальные значения параметров $x_\pm$ и $s_\pm$. Параметры $C_\pm$, $x_\pm^0$ и $s_\pm^0$ не определяются из уравнения (9) и должны находиться из условий непрерывности волнового пакета и его производных по координате и по времени на границах барьера.

Для определения параметров ВП нужно сформировать 12 комплексных уравнений. Но сшивание вне- и подбарьерных составляющих ВП и их производных по координате и по времени дает только половину из этих уравнений. Для вывода недостающих уравнений нужно обосновать, сформировать и сшить линейно независимые комбинации отдельных составляющих ВП и их производных. Для решения полученной таким образом системы нелинейных алгебраических уравнений нужно построить матрицу производных этих уравнений по параметрам и найти приближенные начальные значения параметров, близкие к значениям корней системы [6]. Все это превращает определение параметров $C_\pm$, $x_\pm^0$ и $s_\pm^0$ из условий непрерывности волнового пакета и его производных на границах барьера в чрезвычайно трудоемкую задачу. Ниже предлагаются более простые способы определение параметров $C_\pm$, $x_\pm^0$ и $s_\pm^0$.

Найдем сначала приближенные выражения для этих величин.

### Приближенные выражения для параметров $C_\pm$, $x_\pm^0$ и $s_\pm^0$

Зависимость от времени параметров (17) такая же, как и зависимость параметров (15), поэтому выражения (15) можно использовать в качестве приближенных выражений для параметров $x_\pm$. В этом случае

$$x_\pm^0 = i(\bar{q}/\bar{k})[(\pm x_0 \mp 2\delta_R'(\bar{k})]. \qquad (19)$$

Ситуация же с величинами $s_\pm^0$ несколько сложнее.

Сравнение формул (16) и (18) показывает, что интегрирование в формуле (8) при ограничении тремя первыми членами в разложениях (11) и (12) приводит к неверной зависимости параметров $s_\pm$ от координаты и от времени. Волновые функции (13) с параметрами (16), в отличие от волновых функций (8), не удовлетворяют уравнению (9). Для того чтобы волновые функции (13) удовлетворяли этому уравнению, параметры (16) не должны зависеть от координаты $x$, а зависимость их от времени должна быть такой же, как и зависимость параметров (18). Следовательно, в качестве приближенных выражений для параметров $s_\pm$ в волновых функциях (13) вместо выражений (16) нужно использовать выражения

$$s_\pm(t) = (\bar{q}/\bar{k})^2[s_0 - 2i\delta_\pm''(\bar{k})] - i(\hbar/m)t. \qquad (20)$$

В этом случае параметры $s_\pm^0$ в формуле (18) примут вид

$$s_\pm^0 = (\bar{q}/\bar{k})^2[s_0 - 2i\delta_\pm''(\bar{k})]. \qquad (21)$$

Таким образом, для качественного исследования подбарьерного движения можно использовать волновые функции (13) с параметрами (14), (15) и (20). При этом амплитуды (14) и начальные значения параметров (15) и (20) – параметры (19) и (21) – определяются теми же величинами, что и параметры налетающего ВП (4) (см. формулы (5)). Следовательно, интегральные представления подбарьерных компонент (8) не только удовлетворяют уравнению (9), но и содержат все начальные и граничные условия, необходимые для определения волновых функций (13).

Из формулы (14) видно, что приближенные значения амплитуд $C_\pm$ в волновых функциях (13) выражаются произведениями коэффициента $C_0$, определенного в формуле (5), и амплитуд подбарьерной стационарной волновой функции $f(\bar{k}, x)$.

Величина $x_0 - 2\delta_+'(\bar{k}) + \mathrm{v}t$ в формуле (15) описывает движение из точки, смещенной из положения источника $x = x_0$, слева направо, так как $x_0 < 0$, а величина $-x_0 + 2\delta_-'(\bar{k}) - \mathrm{v}t$ – движение из точки, смещенной из мнимого изображения источника $x = -x_0$, справа налево. Смещения определяются величинами

$$\Delta x_\pm = \mp 2\delta_\pm'(\bar{k}). \qquad (22)$$

Они обусловлены взаимодействием ВП с барьером (исходный ВП при $t = 0$ не ограничен в пространстве). Используя формулы (7), (10) и (11), нетрудно получить и явные выражения для смещений (22):

$$\Delta x_\pm = \frac{1}{\bar{q}} \pm i\left(\frac{1}{\bar{k}} \mp \frac{\bar{k}a}{\bar{q}} - \frac{d'}{d}\right), \qquad (23)$$

где

$$\frac{d'}{d} = -\frac{(2 - i\bar{k}a)}{|d|^2\,\bar{q}}[2\bar{k}\bar{q}(\bar{k}^2 - \bar{q}^2) + iV_0^2 \mathrm{ch}(\bar{q}a)\mathrm{sh}(\bar{q}a)],$$

$$|d|^2 = 4\bar{k}^2\bar{q}^2 + V_0^2 \mathrm{sh}^2(\bar{q}a).$$

Множитель $i\bar{q}/\bar{k}$ в формулах (13) и (14) обусловлен изменением волновых чисел частиц при входе их в барьер.

Формула (20) определяет характер изменения параметров $s_\pm$ в процессе туннелирования. Уже в момент времени $t = 0$ параметры $s_\pm$ отличаются от начального значения параметра ширины налетающего пакета $s_0$ слагаемым

$$\Delta s_\pm = -2i\delta_\pm'' \qquad (24)$$

и множителем $(\bar{q}/\bar{k})^2$. Величины $\Delta s_\pm$ обусловлены искажением ВП барьером. Учитывая определения (7), (10) и (11), можно показать, что

$$\Delta s_{\pm} = \frac{d''}{d} - \left(\frac{d'}{d}\right)^2 + \frac{1}{\bar{k}^2} \pm \frac{aV_0}{\bar{q}^3} \pm i\frac{\bar{k}}{\bar{q}^3}, \qquad (25)$$

где

$$\frac{d''}{d} = \frac{2\bar{k} - iV_0 a}{(2 - i\bar{k}a)\bar{q}^2}\frac{d'}{d} - \frac{1}{\bar{q}^2}(2 - i\bar{k}a)^2.$$

Множитель $(\bar{q}/\bar{k})^2$ обусловлен изменением волновых чисел частиц при входе их в барьер. По аналогии с соответствующим множителем в волновых пакетах высоковозбужденных состояний атомов и молекул [7] его можно назвать коэффициентом сжатия. При $k < q$ параметр $s_{\pm}$ увеличивается, а при $k > q$ уменьшается по величине. Зависимость параметров $s_{\pm}$ от времени определяется величиной $-i(\hbar/m)t$.

Из определений (22) - (25) видно, что изменения параметров волновых функций (13) не зависят от выбора положения источника ВП $x_0$ и определяются только волновыми числами частиц вне барьера и под барьером, а также высотой и шириной барьера.

Приближенный характер параметров $C_{\pm}$, $x_{\pm}^0$ и $s_{\pm}^0$ обусловлен учетом только подбарьерных стационарных волновых функций в интегральных представлениях (8) и ограничением тремя первыми членами в разложениях (11). Первое ограничение допустимо лишь в том случае, когда $\bar{k} + 2\Delta k < \sqrt{V_0}$, а второе – когда $\left|\delta_n''(\bar{k})\Delta k\right| <<$ $<< \left|\delta_n'(\bar{k})\right|$. Перейдем теперь к выводу более общих выражений для параметров $C_{\pm}$, $x_{\pm}^0$ и $s_{\pm}^0$.

## Вывод формул для уточнения параметров $C_{\pm}$, $x_{\pm}^0$ и $s_{\pm}^0$

Из формул (13), (17) и (18) видно, что

$$\psi_{\pm}'(x,0) = [(x - x_{\pm}^0)/s_{\pm}^0 \mp q]/\psi_{\pm}(x,0), \qquad (26)$$

$$\dot{\psi}_{\pm}(x,0) = i(\hbar/2m)\{[(x - x_{\pm}^0)/s_{\pm}^0 \mp q]^2 +$$

$$+ (1/s_{\pm}^0) - V_0\}/\psi_{\pm}(x,0), \qquad (27)$$

где штрих обозначает дифференцирование по координате $x$, а точка над буквой – дифференцирование по времени. Исключив величины $(x - x_{\pm})/s_{\pm} \mp q$ из этих уравнений, получим следующие выражения для параметров $s_{\pm}^0$:

$$s_{\pm}^0 = \frac{\psi_{\pm}^2(x,0)}{V_0\psi_{\pm}^2(x,0) - i(2m/\hbar)\dot{\psi}_{\pm}(x,0)\psi_{\pm}(x,0) - \psi_{\pm}'^2(x,0)}. \qquad (28)$$

Значения этих величин можно вычислить, используя вместо волновых функций $\psi_{\pm}(x,t)$ интегральные представления этих функций (8). По этим же представлениям можно определить и значения производных волновых функций $\psi_{\pm}(x,t)$ по координате и по времени:

$$\psi_{\pm}'(x,t) = \mp\int_0^{\infty} g(k)A_{\pm}(k)\exp(\mp qx - iEt/\hbar)\,q\,dk, \qquad (29)$$

$$i(2m/\hbar)\dot{\psi}_n(x,t) = \int_0^{\infty} g(k)A_{\pm}(k)\exp(\mp qx - iEt/\hbar)\,k^2 dk. \qquad (30)$$

Интегрирование в формулах (8), (29) и (30) может быть легко выполнено численно.

Волновые функции и их производные в правой части формулы (28) зависят от координаты $x$. Но вероятность прохождения частиц сквозь барьер существенна лишь в том случае, когда длина ВП значительно больше ширины барьера [5]. В этом случае величины $s_{\pm}^0$, вычисленные по формуле (28), должны слабо зависеть от координаты $x$. Предварительные вычисления подтвердили этот вывод.

После вычисления значений величин $s_{\pm}^0$ из уравнения (26) можно вычислить значения параметров $x_{\pm}^0$:

$$x_{\pm}^0 = x - (\psi_{\pm}'(x,0)/\psi_{\pm}(x,0) \pm q)s_{\pm}^0, \qquad (31)$$

а из определений (13) – значения амплитуд $C_{\pm}$:

$$C_{\pm} = \sqrt{s_{\pm}^0}\exp\{-[(x - x_{\pm}^0)^2/2s_{\pm}^0] \pm \bar{q}x\}\psi_{\pm}(x,0). \qquad (32)$$

Это более точный и универсальный метод определения параметров $C_{\pm}$, $x_{\pm}^0$ и $s_{\pm}^0$, чем определение их по формулам (14), (15) и (20). Его можно использовать и в тех случаях, когда условие $\left|\delta_n''(\bar{k})\Delta k\right| << \left|\delta_n'(\bar{k})\right|$ не выполняется, и при таких значениях энергии частиц, при которых надбарьерной составляющей в ВП (6) пренебрегать уже нельзя.

Полученные таким образом выражения для подбарьерных составляющих ВП и их параметров могут использоваться как для исследования эволюции ВП под барьером, так и для определения начальных значений параметров ВП при определении их из условий непрерывности волнового пакета и его производных на границах барьера.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Condon E. U.* Quantum mechanics of collision processes // Rev. Mod. Phys. -1931. - Vol. 3. - P. 74 - 76.
2. *Зайченко А.К.* Выбор начальных условий в определении времени туннелирования // Зб. наук. праць Ін-ту ядерних досл. - 2004. - № 1(12). - С. 43 - 49.
3. *Olkhovsky V.S., Petrillo V.*, *Zaichenko A. K.* Decrease of the tunneling time and violation of the Hartman effect for large barriers // Phys. Rev. - 2004. - Vol. A70. – P. 102409-1.
4. *Франк А. И., Бондаренко И. В., Васильев В.В.* и др. Измерение времени взаимодействия нейтрона с квантовыми объектами // Письма в ЖЭТФ. - 2002. - Т. 75. - № 2. - С. 729 - 732.
5. *Зайченко А.К.* Изменение параметров волновых пакетов в процессе туннелирования // Ядерна фізика та енергетика. - 2006. - № 1 (17). - С. 51 - 55.
6. *Press W. H., Flannery B. P., Teukolsky S. A., Vetterling W. T.* Numerical Resipes. - Cambridge: Cambridge University Press, 1984.
7. *Авербух И. Ш., Перельман Н. Ф.* Динамика волновых пакетов высоковозбужденных состояний атомов и молекул // УФН. - 1991. - Т. 161. - № 7. - С. 41 - 81.

## ДО ОПИСУ РУХУ ЧАСТИНОК ПІД БАР’ЄРОМ

**О. К. Зайченко**

Одержано наближені вирази для нестаціонарних хвильових функцій, що описують рух частинок під прямокутним потенціальним бар’єром, та їх параметрів. Запропоновано простий метод уточнення значень цих величин.

## TO THE DESCRIPTION OF THE SUBBARIER PARTICLES’ MOVING

**A. K. Zaichenko**

The approximate expressions for the nonstationary wave functions, describing the movement of the particles under the rectangular potential barrier, and their parameters are obtained. Simple method of more accurate determination of these values is proposed.

Поступила в редакцию 22.10.07,
после доработки – 21.12.07.