

Резонансное туннелирование пары связанных частиц в адиабатическом представлении

The resonance tunneling of coupled pair of particles in adiabatic representation

Рассмотрена модель резонансного квантового туннелирования составных пар частиц или ионов, связанных осцилляторным потенциалом, через короткодействующие или далекодействующие отталкивающие потенциальные барьеры. Для симметричных и короткодействующих потенциалов результаты расчетов методом Канторовича совпадают с результатами численного решения двумерного уравнения методом матричной прогонки с использованием метода Нумерова.

A model of the resonance quantum tunneling of coupled pair of particles or ions interacted by potential of oscillator type on short-range or long-range repulsive barrier potentials is considered. For symmetric and short-range potentials results obtained by Kantorovich method are agree with results obtained by solving the two-dimensional boundary-value problem by Numerov method.

Ключевые слова: резонансное квантовое туннелирование, метод Канторовича.

Keywords: resonance quantum tunneling, Kantorovich method.

В статье рассмотрена физически приемлемая и математически обоснованная модель квантового туннелирования составных пар частиц или ионов, связанных осцилляторным потенциалом, через короткодействующие или далекодействующие отталкивающие потенциальные барьеры [1-3]. Авторы анализируют систему двух одномерных частиц или ионов с дискретным спектром по поперечной переменной относительного движения частиц в системе центра масс как для симметричных или несимметричных короткодействующих, так и для далекодействующих потенциальных барьеров. В методе Канторовича сформулирована многоканальная задача рассеяния для двумерного уравнения Шредингера в декартовых координатах с помощью разложения по адиабатическому базису – собственным функциям параметрической задачи Штурма – Лиувилля, зависящей от продольной переменной как от параметра. Используя асимптотические состояния задачи рассеяния, включающие неизвестные матрицы коэффициентов прохождения и отражения, сформулированы краевые условия третьего рода для системы обыкновенных диф-

ференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка с матрицами переменных коэффициентов, заданных на конечном интервале изменения продольной переменной. Для дискретизации краевых задач используется метод конечных элементов. Матрицы связи каналов вычислены с контролируемой точностью программой ODPEVP [4]. Численное решение краевых задач для системы ОДУ реализуется в новой версии программы KANTVP 3.0 [5]. Авторы сравнивают результаты расчета по эффекту квантовой прозрачности, сущность которого заключается в немонотонной зависимости коэффициента прохождения при резонансном туннелировании пары частиц [1]. Частицы, связанные осцилляторным потенциалом, туннелируют сквозь различные потенциальные барьеры. Механизм появления резонансов основывается на факте наличия метастабильных состояний. Для симметричных и короткодействующих потенциалов результаты расчетов методом Канторовича совпадают с результатами численного решения двумерного уравнения методом матричной прогонки с использованием метода Нумерова.

Волновая функция $\tilde{\Psi}(\tilde{x}, \tilde{y})$ двух частиц (ионов), связанных осцилляторным потенциалом, проходящих сквозь отталкивающие барьеры $\tilde{U}_i(\tilde{x}_i)$, подчиняется двумерному уравнению Шрёдингера [3]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\mu}{2} \tilde{\omega}^2 \tilde{x}^2 + \tilde{U}_1(\tilde{x}_1) + \tilde{U}_2(\tilde{x}_2) - \tilde{E} \right) \tilde{\Psi}(\tilde{x}, \tilde{y}) = 0, \quad (1)$$

где $\tilde{\omega}$ – частота осциллятора; \tilde{E} – энергия; $M = m_1 + m_2$ – полная и $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$ – приведенная массы системы; $\tilde{x}_1 = s_2 \tilde{y} + s_1 \tilde{x}$, $\tilde{x}_2 = s_2 \tilde{y} - s_3 \tilde{x}$ – переменные в лабораторной системе $(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ и системе центра масс (\tilde{x}, \tilde{y}) . Параметры $s_1 = m_2 / M$, $s_3 = m_1 / M$, $s_2 = \sqrt{s_1 s_3}$ определяются через массы частиц m_1 и m_2 . В безразмерных переменных x, y : $x = x_{osc}^{-1} \tilde{x}$,

$y = \sqrt{M/\mu} x_{osc}^{-1} \tilde{y}$, где $x_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \tilde{\omega}}}$ – осцилляторная единица длины, уравнение (1) принимает вид

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 + V(x, y) - \mathcal{E} \right) \Psi(x, y) = 0, \quad (2)$$

где $\mathcal{E} \equiv 2E = \tilde{E} / E_{osc}$ – безразмерная энергия и $V(x, y)$ – потенциальный барьер (в осцилляторных единицах энергии, $E_{osc} = \frac{\hbar \tilde{\omega}}{2}$) в терминах $x_1 = s_2 y + s_1 x$ и $x_2 = s_2 y - s_3 x$:

$$V(x, y) = U_1(x_1) + U_2(x_2) \equiv \equiv E_{osc}^{-1} (\tilde{U}_1(\tilde{x}_1) + \tilde{U}_2(\tilde{x}_2)). \quad (3)$$

Модель А. Выбираем потенциальный барьер $U_i(x_i)$ с эффективным зарядом $\hat{Z}_i > 0$ в форме отталкивающего обрезанного кулоновского потенциала, с обрезанием на малых $0 < \bar{x}_{min} < 1$ и больших $\bar{x}_{max} > 1$ расстояниях от $x_i = 0$ как в [1]:

$$U_i(x_i) = \left\{ \frac{2\hat{Z}_i}{\bar{x}_{min}} - \frac{2\hat{Z}_i}{\bar{x}_{max}}, |x_i| \leq \bar{x}_{min}; \frac{2\hat{Z}_i}{|x_i|} - \frac{2\hat{Z}_i}{\bar{x}_{max}}, \bar{x}_{min} < |x_i| \leq \bar{x}_{max}; 0, |x_i| > \bar{x}_{max} \right\}.$$

Модель Б. Квазикулоновский потенциал $U_i(x_i)$, зависит от целочисленного параметра $s \geq 2$, параметра обрезания $\bar{x}_{min} > 0$ [2]:

$$U_i(x_i) = 2\hat{Z}_i (|x_i|^s + \bar{x}_{min}^s)^{-1/s}.$$

Модель В. Рассматриваем также несимметрич-

ный потенциальный барьер гауссовского типа [1]:

$$\tilde{U}_i(\tilde{x}_i) = (A/\sqrt{2\pi\sigma}) \exp(-\tilde{x}_i^2/2\sigma), \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

с параметрами $\sigma = 0.1$, $m_1 = m_2 = 1$, $A = 10$. Для сравнения резонансного туннелирования с прохождением бесструктурной частицы используем одномерные уравнения

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + \frac{b_s a}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{\mu}{m_i} \frac{x_{osc}^2 y^2}{2\sigma}\right) - 2E \right) \chi(y) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (5)$$

для частиц с массами m_1 , m_2 или $m_3 \equiv M = m_1 + m_2$, проходящих сквозь такой же при $b_s = 1$, или удвоенный барьер при $b_s = 2$.

Асимптотические краевые условия для решения $\Psi(y, x) = \{\Psi_{i_0}(y, x)\}_{i_0=1}^{N_0}$ при описании движения связанной пары частиц в состоянии i_0 в

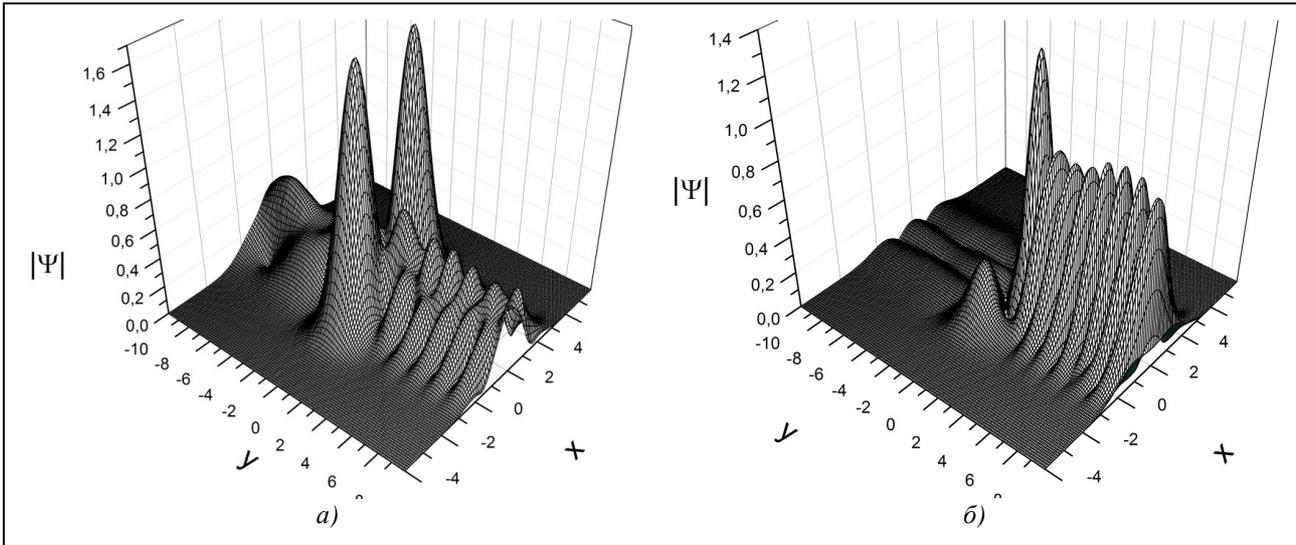


Рис. 1. Абсолютные значения волновых функций модели Б для $\hat{Z}_1 = \hat{Z}_2 = 0,5$: (а) резонансное прохождение $T_{11} = 0,9259$ при $\varepsilon = 2E = 8,1403$ и (б) почти полное отражение $T_{11} = 0,0161$ при $\varepsilon = 2E = 9,4748$

направлении слева направо имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{i_0}(y \rightarrow -\infty, x) &\rightarrow p_{i_0}^{1/2} B_{i_0}^{(0)}(x) \exp\left(i\left(p_{i_0} y - \text{sign}(y) \frac{Z_{12}}{p_{i_0}} \ln(2p_{i_0} |y|)\right)\right) \\ &+ \sum_{j=1}^{N_o} p_j^{1/2} B_j^{(0)}(x) \exp\left(-i\left(p_j y - \text{sign}(y) \frac{Z_{12}}{p_j} \ln(2p_j |y|)\right)\right) R_{ji_0}, \\ \Psi_{i_0}(y, x \rightarrow \pm\infty) &\rightarrow 0. \\ \Psi_{i_0}(y \rightarrow +\infty, x) &\rightarrow \sum_{j=1}^{N_o} p_j^{1/2} B_j^{(0)}(x) \exp\left(i\left(p_j y - \text{sign}(y) \frac{Z_{12}}{p_j} \ln(2p_j |y|)\right)\right) T_{ji_0}, \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь N_o – число открытых каналов при фиксированной энергии $2E = p^2 + \varepsilon_{i_0}^{(0)} > 0$; заряд $Z_{12} = 0$ для моделей А и В и $Z_{12} = (\hat{Z}_1 + \hat{Z}_2)/s_2$ для модели Б; R_{ji_0} и T_{ji_0} – искомые коэффициенты отражения и прохождения; $B_j^{(0)}(x)$ – собственные функции осциллятора с соответствующими собственными значениями энергий $\varepsilon_j^{(0)} = 2j - 1$ при $j \geq 1$:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 - \varepsilon_j^{(0)}\right) B_j^{(0)}(x) &= 0, \\ \int_{-\infty}^{+\infty} B_i^{(0)}(x) B_j^{(0)}(x) dx &= \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (7)$$

Ищем решение краевой задачи (2), (6) в виде разложения Канторовича

$$\Psi_i(x, y) = \sum_{j=1}^N B_j(x; y) \chi_{ji'}(y). \quad (8)$$

Набор базисных функций $B_j(x; y)$ по быстрой переменной x и соответствующих собственных значений $\varepsilon_j(y)$, зависящих от медленной переменной y как от параметра, выбирается как набор решений краевой задачи для уравнения на сетке $\Omega_x \{x_{\min}(y), x_{\max}(y)\}$:

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + V(x, y) - \varepsilon_j(y)\right) B_j(x; y) = 0, \quad (9)$$

$$B_j(x_{\min}(y); y) = B_j(x_{\max}(y); y) = 0, \quad (10)$$

$$\int_{x_{\min}(y)}^{x_{\max}(y)} B_i(x; y) B_j(x; y) dx = \delta_{ij}.$$

Подставляя (8) в (2) и усредняя (2) и (6) по

функциям $B_j(x; y)$ с учетом (10), получаем краевую задачу для системы ОДУ с однородными краевыми условиями третьего рода на сетке $\Omega_y\{y_{\min}, y_{\max}\}$:

$$\left(-\mathbf{I} \frac{d^2}{dy^2} + \mathbf{V}(y) + \mathbf{Q}(y) \frac{d}{dy} + \frac{d\mathbf{Q}(y)}{dy} - 2E\mathbf{I} \right) \chi^{(j)}(y) = 0, \quad (11)$$

$$\left. \frac{d\Phi(y)}{dy} \right|_{y=y_{\min}} = R(y_{\min}) \Phi(y_{\min}), \quad \left. \frac{d\Phi(y)}{dy} \right|_{y=y_{\max}} = R(y_{\max}) \Phi(y_{\max}), \quad (12)$$

где \mathbf{I} , $\mathbf{V}(z)$ и $\mathbf{Q}(z)$ единичная, симметричная и антисимметричная $N \times N$ матрицы

$$Q_{ij}(y) = - \int_{x_{\min}(y)}^{x_{\max}(y)} B_i(x; y) \frac{\partial B_j(x; y)}{\partial y} dx, \quad (13)$$

$$V_{ij}(y) = \varepsilon_j(y) \delta_{ij} +$$

$$+ \int_{x_{\min}(y)}^{x_{\max}(y)} \frac{\partial B_i(x; y)}{\partial y} \frac{\partial B_j(x; y)}{\partial y} dx$$

вычисляются вместе с набором решений (9),(10) с помощью программы ODPEVP [5], $R(y)$ – матрица логарифмических производных размер

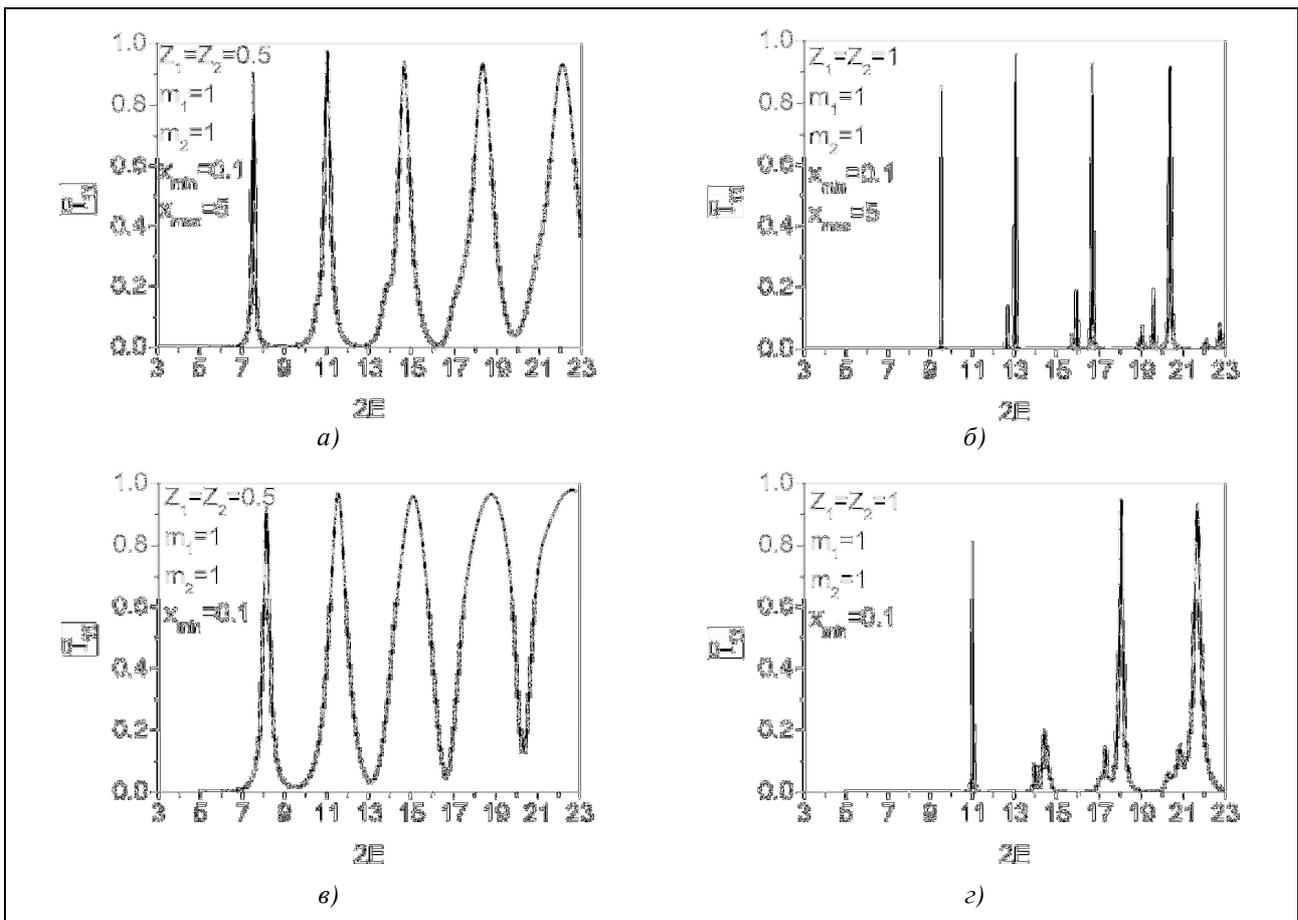


Рис. 2. Зависимость полной вероятности $P \equiv \bar{T}_{11}$ прохождения от энергии $\varepsilon = 2E$ через обрезанный кулоновский барьер (верхние рисунки) и квазикулоновский барьер (нижние рисунки)

ностью $N \times N$ и $\Phi(y) = \left\{ \chi^{(j)}(z) \right\}_{j=1}^{N_0}$ – матрица решений размерностью $N \times N_0$, вычисляются с помощью программы KANTBP 30.

В расчётах были использованы значения параметров: $m_1 = m_2 = 1$, $\bar{x}_{\min} = 0.1$, $\hat{Z}_1 = \hat{Z}_2 = 0.5$ и $\hat{Z}_1 = \hat{Z}_2 = 1$, а также $\bar{x}_{\max} = 5$ для модели А и $s = 8$ для модели Б. На рис. 1 показано поведение волновых функций при резонансном прохождении и полном отражении. Зависимость полной вероятности прохождения $P \equiv \bar{T}_{11} = \sum_{j=1}^{N_0} |T_{1j}|^2$ пары ионов в начальном-

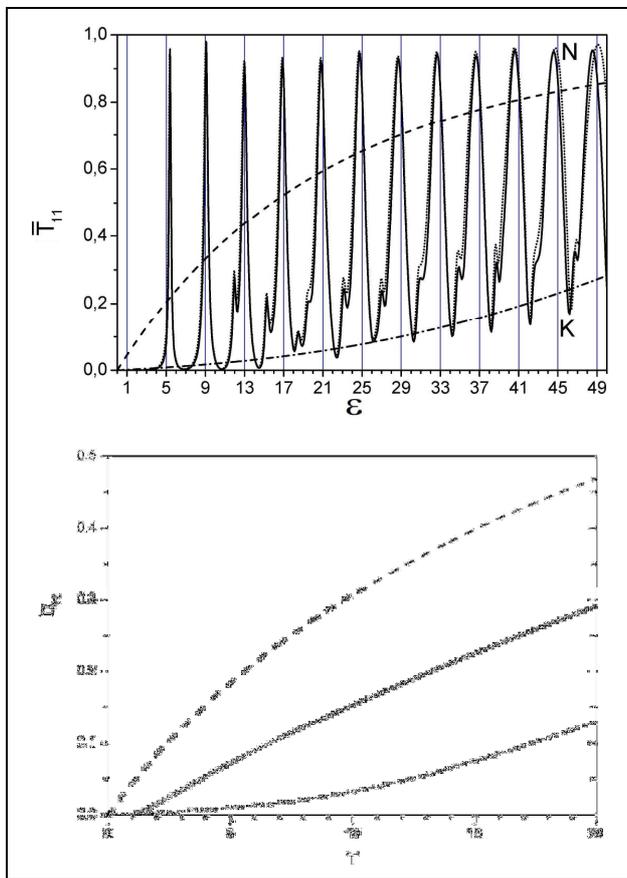


Рис. 3. Сверху – зависимость полной вероятности прохождения $P \equiv \bar{T}_{11}$ через потенциальный барьер (4) структурной частицы от энергии $\varepsilon = 2E$, рассчитанная с помощью метода Канторовича (сплошная линия) и методом матричной прогонки с использованием метода Нумерова (пунктирная линия). Также на рисунке приведена вероятность прохождения бесструктурной частицы массой $m_1 = m_2 = 1$ через одиночный барьер (5) (штриховая линия) и массой $m_3 \equiv M = m_1 + m_2$ (штрихпунктирная линия) через удвоенный барьер при $A = 10$ и $\sigma = 0.1$. Снизу – зависимость квантовой диффузии D_{11} от температуры E_0

состоянии $i_0 = 1$ через обрезанный кулоновский и квазикулоновский потенциальные барьеры моделей А и Б, показаны на рис. 2. Эти графики показывают, что более реалистичным выглядит использование модели Б – квазикулоновского барьера. В этом случае барьер более широкий, чем обрезанный кулоновский, и соответственно набор максимумов в зависимости коэффициента прохождения имеет большую ширину.

В качестве интегральной характеристики процесса рассмотрим квантовую диффузию

$$D(E_0) = \int_0^\infty P(E) e^{-E/E_0} dE, \quad (14)$$

определенную при данной температуре E_0 , как интеграл от вероятности прохождения $P(E)$ с усреднением по распределению Больцмана. Расчеты полной вероятности прохождения $P \equiv \bar{T}_{11}$ в модели В, а также резонансная квантовая диффузия D_{11} , показаны на рис. 2 в сравнении с диффузией для бесструктурной частицы. Видно, что в целом вероятность прохождения структурной частицы ниже, чем бесструктурной частицы массой m_1 или m_2 , но гораздо больше, чем бесструктурной частицы массой $m_3 \equiv M = m_1 + m_2$. Таким образом, вероятности прохождения бесструктурных частиц дают верхнюю и нижнюю оценку вероятности резонансного прохождения барьера связанной парой частиц.

Из рис. 3 также видно, что результаты расчетов методом Канторовича (8)–(13) с незначительными отличиями совпадают с результатами решения двумерного уравнения (2) с асимптотическими краевыми условиями (8) методом матричной прогонки с использованием метода Нумерова. Работа поддержана РФФИ 11-01-00523, 10-01-00200.

Библиографический список

1. Пеньков Ф.М. Квантовая прозрачность барьеров для структурных частиц // ЖЭТФ. 2000. Т. 118. N 4(10). С. 806-815 [JETP 2000 v. 91, P. 698-705].
2. Goodvin G.L., Shegelski M.R.A. Three-dimensional tunneling of a diatomic molecule incident upon a potential barrier // Phys. Rev. A, 2005, v. 72, P. 042713-1-7.

3. **Gusev A.A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P., Rostovtsev V.A.** Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions // Lect. Notes Comp. Sci. 2011, v. 6885, P. 185-191.

4. **Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G.** ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the

parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem // Comput. Phys. Commun. 181, pp. 1358–1375 (2009).

5. **Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Vinitsky S.I., Abrashkevich A.G.** KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach // Comput. Phys. Commun. 2008, v. 179, P. 685-693.

Гусев Александр Александрович – канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований (ОИЯИ).

Тел.: 8 (496)2163348. E-mail: gooseff@jinr.ru

Виницкий Сергей Ильич – д-р физ.-мат. наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ.

Тел.: 8 (496)2163348. E-mail: vinitsky2008@gmail.com

Чулуунбаатар Очбадрах. – д-р физ.-мат. наук, начальник сектора, лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований.

Тел.: 8 (4962)162529. E-mail: chuka@jinr.ru,

Красовицкий Павел Михайлович – канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ.

Тел.: 8 (496)2163348. E-mail: pavel.kras76@gmail.com

Gusev Alexander Alexandrovich - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior research associate of laboratory of information technologies, of Joint Institute for Nuclear Research (JINR).

Tel.: +7 (4962)163348. E-mail: gooseff@jinr.ru

Vinitsky Serguei Ilich - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor, leader researcher of Bogoliubov Laboratory of theoretical physics of JINR.

Tel.: +7 (496)2163348 E-mail: vinitsky2008@gmail.com

Krassovitskiy Pavel Mihailovich - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior researcher of Bogoliubov Laboratory of theoretical physics of JINR.

Tel.: +7 (496)2163348 E-mail: pavel.kras76@gmail.com

Chuluunbaatar Ochbadrakh- Doctor of Physical and Mathematical Sciences, leader of group of laboratory of information technologies of JINR.

Tel.: +7 (496)2162529 E-mail: chuka@jinr.ru
