

УДК 539.141

ПРОБЛЕМЫ ПРОНИЦАЕМОСТИ НЕОДНОМЕРНЫХ БАРЬЕРОВ

*Р. Ринг**, *Дж. Расмуссен,*
*Г. Массман***

Лаборатория Лоуренса,
Калифорнийский университет, Беркли,
Калифорния

Дается обзор квантовомеханической теории туннельного эффекта для неоднородного барьера. Рассмотрено несколько примеров из области ядерной и молекулярной физики, таких, как α -распад сфероидальных ядер, спонтанное деление и коллинеарные столкновения атомов водорода с его молекулами. Исследованы пределы применимости различных приближений, которые сводят задачу к одномерным интегралам по траектории и к матрицам Фремана — Носова. Это сделано сравнением с точным квантовомеханическим решением задачи на связь каналов. Для модельной несепарабельной делящейся системы использованы классические уравнения движения с комплексными переменными (однородное квазиклассическое приближение). Рассмотрено влияние вариации ширины долины, ее искривления, а также изменения тензоров инерции.

Quantum mechanical tunneling theory in more than one dimension is reviewed.

Several systems from nuclear and molecular science are considered specifically, such as alpha decay of spheroidal nuclei, spontaneous fission, and reactive collinear collisions of hydrogen atoms with hydrogen molecules. The range of validity of various approximations that reduce to one-dimensional path integrals or Fröman — Nosov matrices are examined, testing where possible against fully quantum mechanical coupledchannels solutions. The classical equations of motion methods using complex variables (uniform semi-classical approximation) are explored for non-separable fission-like model systems. Effects of variable valley widths, curving valleys, and of variable inertial tensors are delineated.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема квантовомеханической проницаемости барьера двух или более измерений встречается в некоторых физических ситуациях. Здесь дадим обзор только некоторых из них, а именно тех,

* Физический факультет Технического университета, Мюнхен, ФРГ.

** Мейтнеровский институт атомного ядра, Западный Берлин.

в которых проницаемость барьера входит наиболее простым и явным образом.

Обсудим задачи о проницаемости для α -частиц, рассмотренной с помощью нескольких подходов. Кроме того, изучим проблему проницаемости барьера в случае спонтанного деления. Опишем различные приближенные методы рассмотрения этой задачи с учетом новейших моделей барьера деления. Рассмотрим область молекулярных реакций, когда только электрон и атом водорода имеют достаточно малые массы, чтобы туннельные эффекты были значительными, и в качестве примера обсудим подробнее проблему коллинеарного рассеяния протона на молекуле водорода. Эта проблема весьма актуальна в теории молекул. Во всех случаях, однако, исследуются только ситуации, когда энергия системы не слишком близка к вершине барьера.

Другая область ядерной физики, где туннельные процессы имеют место, — это проникновения одного или нескольких нуклонов в реакциях срыва и подхвата. В старой квазиклассической формулировке Брейта и Эбеля [1] туннельные эффекты проявляются достаточно явно, однако в улучшенных, более современных версиях теории реакций передачи [2, 3] туннелирование не входит столь простым путем, так что в данном обзоре его не будем обсуждать. Туннельные эффекты для электронов, входящие достаточно сложным образом в задачу об электронном захвате и в проблему ионизационных потерь при движении заряженных частиц через вещество, также не рассматриваются здесь. Обзор ранних квантовомеханических подходов к этим задачам [4,5] дан Райзбеком и Юио [6].

В данном обзоре представляются различные методы, используемые при решении проблемы туннельного проникновения через многомерные барьеры. Будут рассмотрены координаты ортогональные к координате, от которой зависит проницаемость барьера, а также координатная зависимость от компонент тензора инерции. При этом попытаемся разделить эти различные аспекты проблемы.

1. ПРОНИЦАЕМОСТЬ МНОГОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА В ПРОБЛЕМЕ α -РАСПАДА

Рассмотрение проведем для случая двумерного барьера. Исследуем более детально проблему проницаемости анизотропных барьеров в α -распаде. Вне радиуса действия ядерных сил имеем простой гамильтониан для системы с нулевым спином:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}} J_{\theta_j}^2 + \frac{2Ze^2}{r} + \frac{2e^2Q_0}{2r^3} P_2(\cos \gamma), \quad (1)$$

где ∇^2 — лапласиан, действующий на координаты α -частицы для фиксированных в лабораторной системе переменных θ , ψ ; r —

расстояние между центрами масс дочернего ядра и α -частицы. Приведенная масса $\mu = Mt_\alpha/(M + m_\alpha)$; \mathcal{J} — ядерный момент инерции; J_{θ_j} — квадрат оператора ядерного ротационного углового момента, действующего на углы Эйлера θ_j , определяющие ориентацию оси симметрии ядра в лабораторной системе; Z — заряд; Q_0 — внутренний квадрупольный момент дочернего ядра; γ — угол между направлением вылета α -частицы (θ, ψ) и ядерной осью симметрии (θ_1, θ_2). Проблема сводится к двумерной (в переменных r и γ), если перейти к системе координат, связанной с родительским ядром [7]. Волновое уравнение преобразуется к системе дифференциальных уравнений второго порядка на связанные каналы с помощью следующего разложения волновой функции:

$$\Psi = \sum_{\substack{l, \text{четн.}, \\ m}} \frac{u_l(r)}{r} \sum C_{m-m_0}^{ll_0} Y_{lm}(\theta, \psi) \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi^2}} D_{-m_0}^l(\theta_j). \quad (2)$$

Умножая волновое уравнение $(H - E)\Psi = 0$ слева на комплексно-сопряженную угловую часть функции $\sum_{m'} C_{m'-m_0}^{l'l'_0} \times Y_{l'm'}^*(\theta, \psi) \sqrt{(2l'+1)/8\pi^2} D_{-m'_0}^{l'l'_0}(\theta_j)$ и интегрируя по всему угловому пространству θ, ψ и θ_j , получаем систему уравнений на связь каналов:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[\frac{2Ze}{r} + \left(\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{J}} \right) l'(l'+1) - E \right] u_l + \\ + \frac{Q_0 e^2}{r^3} \sum_l u_l \langle l'l', 0 | P_2(\cos \gamma) | ll, 0 \rangle = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Для случая полного спина, равного нулю (например, при α -распаде основных состояний четно-четных ядер), матричные элементы в (3) имеют простую форму, впервые полученную Рака [8]:

$$\langle l'l', 0 | P_2(\cos \gamma) | ll, 0 \rangle = \frac{1}{5} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} [C_{000}^{ll'}]^2.$$

Численное решение задачи для проблемы α -распада проводится с использованием граничных условий на ядерной поверхности и на асимптотике. При этом на ядерной поверхности (вблизи сферы радиуса R_s) находятся иррегулярные решения для всех u_l , т. е. все решения должны быть экспоненциально убывающие в соответствии с квазистационарностью состояния родительского ядра. На больших расстояниях волновые функции осциллируют и их амплитуды определяются соотношениями между экспериментальными относительными вероятностями α -распада на различные ротационные состояния. Практически оказывается невозможным провести интегрирование уравнений от малых расстояний к большим, поскольку экспоненциально убывающее решение неустой-

чиво относительно малых погрешностей округления. Поэтому решение проводится методом интеграции вовнутрь, т. е. начиная от расстояний, где квадрупольным членом в потенциале можно пренебречь. Для системы N уравнений полный набор $2N$ линейно-независимых решений получается последовательным сплыванием при больших r каждого канального решения u_l и его производной с иррегулярной $G_l(\eta, \rho)$ и затем регулярной $F_l(\eta, \rho)$ кулоновскими функциями. Величины этих волновых функций в точке R_s образуют вещественную (для граничного условия G_l) и мнимую (для F_l) компоненты некоторой матрицы A размерности $N \times N$. Действие обратной матрицы A^{-1} на вектор-столбец $\{u_l(r)\}$ дает амплитуды и фазы по отношению к чисто кулоновскому решению) в асимптотической области. Интенсивности α -переходов равны тогда квадратам этих амплитуд, умноженным на соответствующие скорости α -частиц. Матрица A^{-1} обычно факторизуется на диагональную матрицу P , элементы которой $P_{ll}^{1/2}$ равны корням квадратным из квазиклассических факторов проницаемости для каждого канала в отсутствие квадрупольного члена в гамильтониане (1), и матрицу K размерности $\{N \times N\}$: $A^{-1} = PK$. Матрица K обычно называется матрицей Фремана [9], и она переходит в единичную матрицу при $Q_0 \rightarrow 0$.

Пример матрицы K для случая α -распада ^{242}Cm , полученной [10] из решения системы уравнений на связь каналов, показан ниже:

$$K = \begin{pmatrix} 1,015+0,0116i & -0,1674-0,0176i & 0,01166+0,00217i & (-5,09-1,3i) \cdot 10^{-4} \\ -0,2107-0,0456i & 0,954-0,00158i & -0,120-0,00592i & (7,26+0,679i) \cdot 10^{-3} \\ 0,02114+0,0135i & -0,190-0,0595i & i0,919-0,0036i & -0,101-0,00187i \\ -0,00109-0,00216i & 0,0189+0,0187i & -0,205-0,0893i & 0,909-0,0241i \end{pmatrix}.$$

Здесь последовательные элементы соответствуют $l = 0, 2, 4, 6$. Матрица P в этом случае имеет элементы $P_{00} = 1,3 \cdot 10^{-27}$; $P_{22} = 4,67 \cdot 10^{-28}$; $P_{44} = 4,21 \cdot 10^{-29}$; $P_{66} = 9,3 \cdot 10^{-31}$. Из-за наличия недиагональных элементов у K -матрицы волновая функция, имеющая на поверхности ядра только одну гармонику l , на больших расстояниях вне барьера представляет собой смесь состояний с различными l . Иногда вместо разложения на сферической поверхности, использованного в приведенном выше численном примере, для построения матрицы K волновую функцию разлагают по функциям Лежандра на сфероидальной поверхности или на поверхности постоянной плотности, или, наконец, на нильссоновской координатной поверхности [11]. Примеры применения сфероидальных координат приведены в работах [7, 12].

На первый взгляд может вызывать недоумение то, что K -матрица, приведенная выше, имеет знакопеременные элементы, тогда как все элементы аналогичной матрицы Фремана [9] имеют один и тот же знак. В обоих случаях рассматриваются вытянутые

ядра. Однако приведенная выше K -матрица преобразует лежандровское разложение на сферической поверхности, тогда как матрица Фремана действует на соответствующее разложение, выполненное на сфероидальной ядерной поверхности. Распространение волны со сферической поверхности более благоприятно в экваториальной области, поскольку квадрупольный член делает барьер ниже в этой области для заданного значения радиуса. С другой стороны, при распространении волны со сфероидальной ядерной поверхности полярные области более благоприятны. Большим расстояниям от центра ядра на полюсах соответствует более низкий потенциальный барьер и, кроме того, барьер еще и самый тонкий в полярных областях.

Расчеты методом связанных каналов были также сделаны [13] для нечетных ядер, таких, как ^{253}Es и ^{255}Fm , где при вычислении K -матрицы 9×9 учитывались нижайшие пять уровней разрешенной ротационной полосы и парциальные гармоники $l = 0, 2, 4$.

Рассмотрим несколько подробнее приближение Фремана. Оно наиболее точно в случае исчезающих интервалов между уровнями ротационной полосы, т. е. бесконечного момента инерции, так что изучим именно эту ситуацию. В методе Фремана лежандровское разложение волновой функции проводится на поверхности ядра, так же как и в методе связанных каналов. Распространение каждой парциальной (по l) компоненты волновой функции от ядерной поверхности к большим расстояниям описывается одномерными траекторными интегралами для фиксированного полярного угла γ с учетом потенциальных членов в гамильтониане.

При использовании ВКБ-приближения каждая парциальная l компонента преобразуется от значения $Y_{l_0}(\gamma, \psi)$ при R_h ,

$$Y_{l_0}(\gamma, \psi) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{R_s(\gamma)}^{r_t(\gamma)} V 2\mu (V(\gamma, r) - E) dr \right\}, \quad (4)$$

где

$$V(\gamma, r) = \frac{2Ze^2}{r} + \frac{Q_0 e^2}{r^3} P_2(\cos \gamma), \quad (5)$$

а $r_t(\gamma)$ — внешняя классическая точка поворота. Волновая функция вне барьера переразлагается по функциям Лежандра. Если коэффициенты последнего разложения разделить на факторы проницаемости барьера, не имеющего квадрупольного искажения, то получатся элементы $K_{ll'}$ матрицы Фремана K . Выпишем

их в явном виде:

$$K_{ll'} = \iint Y_{l'0}^* \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{R_s(\gamma)}^{r_t(\gamma)} \sqrt{2\mu (V(r, \gamma) - E)} dr + \right. \\ \left. + \frac{1}{\hbar} \int_{R_0}^{r_t} \sqrt{2\mu (V_c - E)} dr \right\} Y_{l0} d\omega, \quad (6)$$

где

$$V_c = 2Ze^2/r. \quad (7)$$

В целях дальнейших упрощений Фреман разлагает подынтегральные выражения в (6), предполагая, что квадрупольный член мал:

$$\sqrt{V(r, \gamma) - E} \approx \sqrt{V_c - E} (1 + (Q_0 e^2 / r^3) P_2(\cos \gamma) / [2(V_c - E)] + \dots).$$

Аргументы экспоненты сводятся тогда к следующему виду:

$$-P_2(\cos \gamma) \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int_{R_s}^{r_t} \frac{1}{2} \frac{Q_0 e^2}{r^3 \sqrt{V_c - E}} dr = -BP_2(\cos \gamma),$$

определяющему аргумент матрицы Фремана B . При этом формулу (6) можно приближенно записать в такой форме:

$$K_{ll'}^{(B)} = \iint Y_{l'0}^* \exp \{ -BP_2(\cos \gamma) \} Y_{l0} d\omega. \quad (8)$$

Здесь не будем выводить аналитическое выражение для фремановского аргумента B , соответствующего K -матрице, получаемой при использовании сферической граничной поверхности. Вместо этого приведем полученное Фреманом выражение для случая сферической ядерной поверхности:

$$B = \chi \beta_2 \sqrt{[5kR_0 / (4\pi\chi)] (1 - kR_0/\chi) [4/5 - (2/5)(kR_0/\chi)]}, \quad (9)$$

где $\chi = 4Ze^2 / (\hbar v)$ — удвоенный параметр Зоммерфельда; k — волновое число. Формула (9) получена для обычного случая однородно заряженного сфероиды. Параметр β_2 — обычный коэффициент при функции Y_{20} в разложении для формы ядра.

В. Г. Носов [14], независимо от Фремана, исходя из уравнений Струтинского [15], пришел к выражениям для матричных элементов, подобным (9). В обозначениях Фремана они имеют вид:

$$B = \chi \beta_2 \sqrt{\frac{5}{4\pi} \left[\sqrt{\frac{kR_0}{\chi} \left(1 - \frac{kR_0}{\chi}\right)} \frac{4}{5} - i \frac{2}{5} \frac{k^2 R_0}{\chi} \right]}. \quad (10)$$

Важным новым аспектом выражения (10) является наличие мнимой компоненты, соответствующей кулоновскому возбуждению. Реальные части матричных элементов (9) и (10) согласуются с точностью до малых членов.

Другое приближение для рассмотрения данной проблемы было предложено Чесманом и Расмуссенем [16]. Они представляли радиальные волновые функции внутри барьера в виде $(\alpha_l + \beta_l r^{-3/2}) G_l(r)$ и подбирали константы α_l и β_l так, чтобы оптимизировать решение в присутствии квадрупольного потенциала взаимодействия. Матрица проникновения, получаемая таким способом, оказывается в разумном соответствии с точным решением.

2. ПРОНИЦАЕМОСТЬ МНОГОМЕРНОГО БАРЬЕРА И ДЕЛЕНИЕ

Введение. Другой областью ядерной физики, где проницаемость многомерного барьера оказывается важной, являются процессы спонтанного и вынужденного деления. В настоящее время почти все барьеры деления рассчитываются полумикроскопическим методом, в котором медленно меняющиеся (в зависимости от числа частиц и деформации) части потенциальной энергии описываются макроскопической моделью жидкой капли, а локальные флуктуации, называемые также оболочечными поправками, рассчитываются в микроскопической (оболочечной) модели. Здесь не будем давать обзор ранних попыток теоретического расчета проницаемости барьера деления, предшествующих созданию В. М. Струтинским метода [17] рассмотрения оболочечных поправок к жидкокапельным потенциальным поверхностям, а также к высоте и форме барьеров деления.

К настоящему времени несколько групп [18—24] сделали детальные расчеты по методу Струтинского, и теперь с определенной уверенностью можно считать, что основные аспекты «потенциального ландшафта» вдоль траекторий деления хорошо известны. В случаях, когда скорости спонтанного деления известны, барьер деления должен быть, по-видимому, двугорбым с заметной изомерией деления, открытой С. М. Поликановым с сотр. [25], которая связана с существованием метастабильного состояния (изомера формы), в минимуме между двумя горбами барьера. Оказалось, что внутреннее седло может часто быть нестабильным по отношению к γ -деформациям [26], т. е. отклонениям от цилиндрической симметрии, тогда как внешнее седло может быть нестабильным по отношению к нарушениям симметрии отражения [27]. Оказалось также, что асимметрия в массовом распределении осколков деления связана с этой нестабильностью второго барьера.

Для того чтобы описать поверхности энергии деформации для процесса деления, необходимо ввести, по крайней мере, два или три параметра, определяющих форму ядра. Эти сильно связанные обобщенные координаты дают обобщенные силы, действующие на делящееся ядро. Для полного динамического описания процесса деления недостаточно, однако, знать только потенциальные поверхности, необходимо также знание тензора инерции, чтобы

выяснить реакцию ядра на действие обобщенных сил. К сожалению, тензор инерции, столь важный для расчетов проницаемости барьера, недостаточно хорошо известен. Никс [28] провел обширные расчеты неротационных гидродинамических тензоров инерции для траекторий деления. Однако значения компонент тензоров инерции, полученных таким способом, оказываются слишком малыми (на фактор приблизительно равный 5), т. е. поток, проникающий через барьер, не является неротационным. Сейчас считается общепринятым, что первый этап процесса деления — проникновение через барьер — происходит адиабатически и что кренкинг-модель можно использовать для оценки тензора инерции. Группа Паули — Струтинского [18, 29] и другие авторы [30] широко использовали кренкинг-модель для расчета тензора инерции. Эти расчеты показывают, что тензор инерции сильно зависит от обобщенных координат, т. е. он также приводит к связи между различными степенями свободы системы. В одномерном случае координатная зависимость момента инерции не привносит новых трудностей, поскольку ее можно устранить. Хофман и Дитрих [31] показали, как можно преобразовать уравнение Шредингера с переменной массой $m(q)$ к уравнению с постоянной массой m_0 модификацией потенциала. Одномерное уравнение Шредингера записывается в следующем виде *:

$$H\Psi(q) = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{m(q)}} \frac{d}{dq} \frac{1}{\sqrt{m(q)}} \frac{d}{dq} + V(q) \right] \Psi(q) = E\Psi(q). \quad (11)$$

Совершая следующее преобразование

$$x(q) = \int^q \sqrt{m(q')/m_0} dq', \quad (12)$$

где m_0 — произвольная постоянная масса, получаем преобразованное уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) \right] \tilde{\Psi}(x) = E\tilde{\Psi}(x). \quad (13)$$

Здесь $\tilde{V}(x) = \tilde{V}(x(q)) = V(q)$ и $\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}(x(q)) = \Psi(q)$. Это преобразование соответствует такому растяжению потенциала, что масса становится постоянной.

Другой аспект проблемы деления, подчеркнутый недавно Моретто и Бабинэ [33], состоит в том, что кроме координат, описывающих конфигурацию поверхности ядра, необходимо также рассматривать параметры парных корреляций как динамические переменные.

* Общее выражение для кинетической энергии системы с переменной массой в криволинейных координатах при наличии многих степеней свободы было дано Хофманом [32].

Итак, процесс деления в существенной мере сводится к проблеме проницаемости многомерного барьера, проблеме, над которой бились многие группы, вводя более или менее сильные приближения. Некоторые из этих подходов опишем здесь кратко.

Одномерный ВКБ-метод. В первых расчетах [19] делительных времен жизни с учетом процедуры Струтинского в качестве координат, определяющих форму ядра, рассматривались только величины ε_2 и ε_4 , т. е. квадрупольная и гексадекапольная деформации. Для расчета проницаемости задача упрощалась сведением к случаю одномерного барьера, т. е. траектория движения по энергетическому ландшафту конструировалась с помощью минимизации потенциальной энергии по координате ε_4 для каждого значения ε_2 и последующего проектирования этого пути на ось ε_2 . В этом случае проницаемость получается с помощью одномерного ВКБ-приближения:

$$P = \exp \left\{ -2 \int_{\varepsilon'}^{\varepsilon''} \sqrt{\frac{2B}{\hbar^2} (W(\varepsilon) - E)} d\varepsilon \right\} = \exp(-K). \quad (14)$$

Как показано П. Фреманом [34], улучшенное выражение имеет вид:

$$P = \{1 + \exp(K)\}^{-1}. \quad (15)$$

В этих ранних расчетах массовый коэффициент B , связанный с делением, брался постоянным или параметризовался в виде простой функции от ε_2 . (Здесь E — начальная энергия ядра в направлении деления; $W(\varepsilon)$ представляет потенциальный барьер, полученный способом, описанным выше.) Позднее аналогичные расчеты были проведены Рандрупом и др. [35] для делительных времен жизни тяжелых элементов. В этих расчетах, кроме деформаций P_2 и P_4 , учитывались также деформации P_3 и P_5 , а также γ -деформации.

Метод траекторий стационарного действия. Дальнейшее усовершенствование рассмотрения проблемы проницаемости барьера деления было сделано группой Паули — Струтинского [18]. В их расчетах использовались две координаты, характеризующие форму делящегося ядра: растяжение или сепарация s и координата h , описывающая шейку. Контурная карта жидкокапельной энергии, оболочечных поправок для нейтронной и протонной систем, а также полной энергии деформации для ядра ^{240}Pu приведены в работе [18] на рис. VIII.4. В расчетах использовался тензор инерции, полученный с помощью кренкинг-модели. Контурная карта различных компонент этого тензора для ядра ^{240}Pu дана в работе [18] на рис. IX.4. Хорошо заметна сильная зависимость тензора инерции от формы ядра. Массовая компонента, соответствующая растяжению, имеет большой максимум около седловины. Похоже, что делительная траектория проникновения

через барьер может обходить высокоинерциальную область, избегая седловины, даже ценой попадания в область более высокого потенциального барьера. Как отметил Гриффин [36], если тензор инерции имеет ненулевые недиагональные компоненты или если его компоненты зависят от координат, тогда интуитивные представления о траекториях деления, основанные на потенциальных картах, могут оказаться совершенно неверными. Другими словами, допущение, что делительная траектория проходит по дну долины, может быть неадекватным. Для того чтобы найти искомую траекторию, обратимся к помощи классической механики, к ее принципу наименьшего действия.

В классической механике действие определяется выражением

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i p_i \dot{q}_i dt = \int_{q_1}^{q_2} \sum_i p_i dq_i. \quad (16)$$

Здесь $\{q_i\}$ — координаты, описывающие систему; $\{p_i\}$ — соответствующие канонически-сопряженные импульсы. Принцип наименьшего действия [17, 38] утверждает, что для консервативной системы, т. е. если гамильтониан $H(q, p) = E = \text{const}$, $\Delta S = 0$, где вариация Δ включает не все виртуальные смещения системы, а только те, для которых выполнен закон сохранения энергии. Тогда имеем

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \left(\sum_{i,j} B_{ij}(q) \dot{q}_i \dot{q}_j - W \right) = \sum_j B_{ij}(q) \frac{dq_j}{dt} \quad (17)$$

и

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(q) \frac{dq_j}{dt} \frac{dq_i}{dt} + W(q). \quad (18)$$

Из этих соотношений находим

$$dt = \sqrt{\sum_{i,j} B_{ij}(q) dq_i dq_j} / [2(E - W)]. \quad (19)$$

Подставляя выражения (19) и (17) в формулу (16), получаем

$$S = \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} d\sigma \sqrt{2(E - W(\sigma)) \sum_{i,j} B_{ij}(q) \frac{dq_i}{d\sigma} \frac{dq_j}{d\sigma}}, \quad (20)$$

где σ — некоторый произвольный параметр по траектории; B_{ij} — тензор инерции, который также может зависеть от σ . При туннелировании $W > E$ и подынтегральное выражение (20) оказывается чисто мнимым. Вероятность туннелирования выражается обычным образом:

$$P = |\exp(iS)|^2 = \exp(-2|S|). \quad (21)$$

В работе [18] нахождение траектории наименьшего действия (в смысле модуля S) осуществлялось проведением пробных траекторий через несколько промежуточных (между концевыми σ_1 и σ_2) точек с последующей вариацией этих точек до получения $\min |S|$. Построенная таким способом траектория не соответствует пути скорейшего спуска потенциала и не проходит через экстремальные точки энергии деформации. Необходимо также отметить, что входная σ_1 и выходная σ_2 точки в (20) должны определяться таким образом, чтобы интеграл действия был бы также стационарен и по отношению к вариации этих концевых точек. Входная точка σ_1 выбирается обычно так, что она расположена на $0,5 M\epsilon\epsilon$ (точка отсчета энергии) выше дна потенциальной ямы (локального минимума полной энергии деформации). Точка σ_2 должна тогда лежать на энергетическом контуре с той же самой энергией E .

Ледергербер и Паули [30] с помощью метода работы [18] провели ряд расчетов, используя три параметра деформации — растяжение, сжатие и параметр, описывающий лево-правую асимметрию. Времена жизни, полученные в этих расчетах, с точностью до порядка величины согласуются с экспериментальными данными. Кроме того, ими была получена предпочтительность асимметричного деления, причем соотношение между наиболее вероятными массами осколков оказалось в согласии с экспериментом.

Однако в этом многомерном подходе [18, 30] все еще игнорируется кинетическая энергия, связанная с перпендикулярным к траектории деления движением, которая может изменяться вдоль траектории. Вопрос о включении этой энергии в качестве делительной степени свободы зависит от способа получения потенциальных поверхностей.

В работах, где используется модель жидкой капли с оболочечными поправками (метод Струтинского), обычно игнорируют поправки, связанные с колебаниями около нулевой точки, поскольку описание последних требует определенных допущений относительно тензора инерции. Так, параметры модели жидкой капли согласованы с высотами барьеров деления. Поэтому к полученным отсюда потенциальным поверхностям нельзя просто добавить вибрационные энергии. Это обстоятельство тесно связано с фактом, полученным Маруном и Грайнером [39], а именно, что для спонтанного деления ядра, находящегося в сфероидальном основном состоянии, число степеней свободы для квадрупольных колебаний равно трем, так что это состояние в качестве точки отсчета энергии должно иметь $E_0 = 3\hbar\omega/2$. В седловой точке частота β -вибрационной моды в направлении деления должна стать мнимой, причем γ -вибрационная (нарушающая осевую симметрию) мода примет на себя энергию $2E_0$. Чтобы включить эти поправки, связанные с энергией вибрационных мод (без модификации высот барьеров деления), Марун и Грайнер вновь провели

подгонку некоторых жидкокапельных параметров Майерса и Святецкого [40] для более низкой потенциальной энергии основного состояния (начального ядра и результирующих фрагментов) с учетом колебательной энергии, которая была получена из экспериментальной информации о первых 2^+ -состояниях соответствующих ядер.

Туннелирование и поверхности энергии инвертированного потенциала. Рассмотрим систему, которая движется по направлению к барьеру и пусть время будет параметром в уравнениях движения, описывающих систему. Если временной инкремент остается реальным, то система, приблизившись к барьеру, отразится от него и будет двигаться назад. Если, однако, временные инкременты окажутся чисто мнимыми в точке поворота, то система начнет туннелировать. Другими словами, в процессе туннельного перехода система подчиняется классическим уравнениям движения с чисто мнимыми временными инкрементами (см. также рис. 4 и обсуждение ниже).

Пусть система, достигнув классической точки поворота по делительной степени свободы и по другим степеням свободы, также окажется в соответствующих точках поворота (или иначе — если система, достигнув барьера деления, оказывается в состоянии покоя), тогда процесс туннельного перехода можно представить простым и наглядным образом. Допустим, что система находится в покое в точке поворота и что в этот момент и вплоть до завершения процесса туннелирования ей соответствуют чисто мнимые временные инкременты, тогда все координаты будут оставаться реальными, все величины, связанные с нечетными степенями времени (скорости, импульсы, угловые моменты и пр.), будут чисто мнимыми, а величины, зависящие от квадрата момента (например, кинетическая энергия, центробежная сила и т. д.), будут менять знак.

Легко видеть, что эквивалентное описание рассматриваемой системы можно провести с помощью вещественных временных инкрементов, если изменить знак разности ($V - E$), т. е. траектории туннельного проникновения можно получить при исследовании движения системы по инвертированным потенциальным поверхностям [41]. Для деления, например, входная точка σ_1 будет теперь близка к вершине холма, а делительная долина превратится в горный хребет, начинающийся где-то близко от холма (рис. 1). Система теперь должна скатываться с холма, а затем подниматься на горный хребет, следуя классическим уравнениям движения, и двигаться строго по его гребню, пока не достигнет выходной точки σ_2 , где скорость снова обращается в нуль. В этой точке, если мы хотим проследить за системой, уходящей в долину деления, необходимо вновь перейти к обычным потенциальным поверхностям. Если после того, как система достигнет точки σ_2 , держать

временной инкремент чисто мнимым (или эквивалентно, используя реальное время, работать с инвертированными потенциальными поверхностями), система будет двигаться вновь по направлению к точке σ_1 . При этом нахождение траектории туннелирования эквивалентно отысканию периодических орбит на инвертированной потенциальной поверхности. В случае рис. 1 классиче-

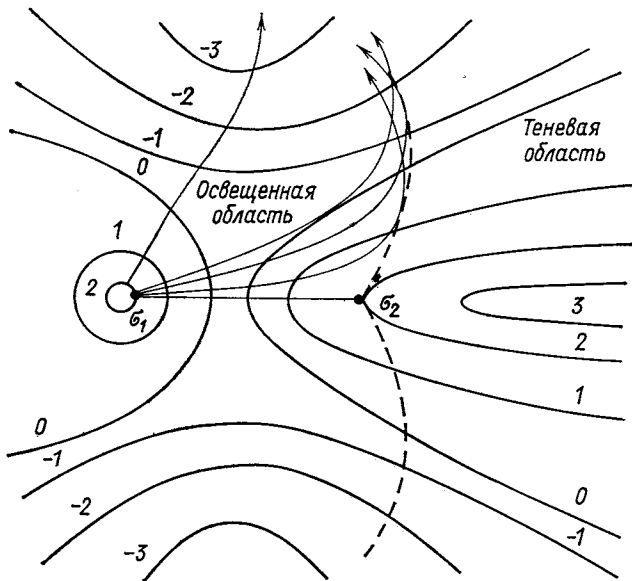


Рис. 1. Схема контурной карты поверхностей потенциальной энергии для случая классического движения ниже барьера:

входная σ_1 и выходная σ_2 точки лежат на одной и той же эквипотенциали; «ялов» с левой стороны рисунка соответствует потенциальной яме, в которой ядро находится до деления; «горный район» с правой стороны — долина деления.

скими уравнениями движения связаны только одна точка на входном и одна точка на выходном энергетических контурах. Следовательно, рассматривая траекторию, соответствующую наименьшему действию S , необходимо также варьировать концевые точки σ_1 и σ_2 до достижения минимума действия. Другой пример движения по инвертированной потенциальной поверхности приведен в приложении 1.

Квантовомеханическое приближение искаженных волн. Двумерное уравнение Шредингера для исследуемой проблемы имеет вид

$$H\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j=1,2} \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial q^i} Dg^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} + V(q^1, q^2) \right] \Psi = E\Psi, \quad (22)$$

где g^{ij} — контравариантные компоненты тензора инерции $\{g_{ij}\}$; $D = \sqrt{\det(g_{ij})}$; $V(q^1, q^2)$ — потенциальная энергия, зависящая от криволинейных координат q^1 и q^2 .

В приложении А к работе [42] Хофман описывает метод построения новых координат $x = x(q^1, q^2)$ и $y = y(q^1, q^2)$, которые обладают следующими свойствами: 1) недиагональные компоненты инерциального тензора в новых координатах исчезают, т. е. $m_{xy} = m_{yx} = 0$; 2) траектория $y = 0$ определяет геометрическое место точек, где потенциальная энергия минимальна, т. е. $\partial V(x, y)/\partial y|_{y=0} = 0$.

Используя описанное преобразование координат и гармоническое приближение для потенциала, перпендикулярного траектории деления, а также принимая дополнительное допущение, что компоненты массового тензора не зависят от координаты y , Хофман [42] преобразовал гамильтониан из уравнения (22) к следующему виду:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{\sqrt{m_x m_y}} \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\frac{m_y}{m_x}} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] + V(x, 0) + \frac{m_y \omega^2}{2} y^2 \quad (23)$$

и получил с этим гамильтонианом приближенное решение уравнения Шредингера. Это решение впервые дает настоящее двумерное квантовомеханическое динамическое описание процесса деления. В (23) величина $\omega(x)$ определяется соотношением

$$\omega^2(x) = \frac{1}{m_y(x)} \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y^2} \Big|_{y=0}. \quad (24)$$

Гамильтониан разделяется на адиабатическую $H^{\text{ад}}$ и неадиабатическую $H^{\text{неад}}$ части. Если система первоначально находится в осцилляторном состоянии n , то $H^{\text{неад}} = H - H^{\text{ад}}$ может вызвать переходы в другие осцилляторные состояния m . Амплитуда вероятности A_{mn} обнаружить систему после проникновения через барьер в состоянии m удовлетворяет интегральному уравнению, для которого Хофман использовал борновское приближение с искаженными волнами ($DWBA$), чтобы получить приближенное решение. Использование $DWBA$ -приближения, как увидим ниже, по всей вероятности удовлетворительно только, когда рассматриваются переходы из основного состояния делящегося ядра. Если же исходным является возбужденное состояние, то вероятность перехода в основное, как правило, на несколько порядков величины больше, чем для переходов в возбужденные состояния (даже если связь между обеими степенями свободы весьма мала). Причина состоит в том, что проницаемость для случая основного состояния намного выше.

Изучение модельной системы для барьера деления. Изучим двумерную модельную систему с барьером делительного типа. Для

того чтобы исследовать полным образом двумерную динамику и проверить различные приближения, полезно изучить модельную систему с потенциалом, заданным в виде аналитической функции. Масман и др. [43] изучили гамильтониан, имеющий гауссов барьер в x направлении (x — координата деления) и гармонический потенциал в y направлении. Массовый тензор взят диагональным и постоянным, ширина же долины — переменной. Рассмотренный гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = p_x^2/2m_x + p_y^2/2m_y + V_0 \exp[-(x/a)^2] + C \{1 + \alpha \exp[-(x/a)^2]\} y^2/2. \quad (25)$$

Не нулевая величина «константы связи» α позволяет варьировать ширину долины после седла и связывать две степени свободы. Выбранные численные значения параметров соответствуют типичному случаю деления: $m_x = 500 \text{ Мэв}^{-1}$; $V_0 = 7 \text{ Мэв}$; $m_y = 4,7 \text{ Мэв}^{-1}$; $a = 0,185$; $C = 5,1 \text{ Мэв}$; $E_{\text{полн}} = 6,0 \text{ Мэв}$. С этим выбором для величин C и m_y получаем частоты около 1 Мэв , характерные для γ -вибрационной моды. Координаты x и y безразмерны и соответствуют параметрам деформации ϵ_2 и ϵ_4 .

Точное квантовомеханическое решение. Полное двумерное квантовомеханическое решение этой модели возможно для не слишком большой константы связи. Метод решения аналогичен методу связанных каналов, описанному для случая α -распада. Двумерная волновая функция разлагается в виде

$$\Psi^{(\mu_0)} = \sum_{\nu} u_{\nu}^{(\mu_0)}(x) \Psi_{\nu}(y), \quad (26)$$

где $\{\Psi_{\nu}\}$ — подходящий ортонормированный базис, в качестве которого разумно выбрать набор собственных функций потенциала гармонического осциллятора, зависящего от координаты y при условии $|x| \rightarrow \infty$. В этом случае членом с константой связи α пренебрежем. Индекс μ_0 характеризует граничное условие, согласно которому в канале μ_0 для $x \rightarrow -\infty$ имеется входящая волна с единичной амплитудой $\exp(ik_{\mu_0}x)$ и отраженная волна $r_{\mu_0} \exp(-ik_{\mu_0}x)$, тогда как во всех других каналах для $|x| \rightarrow \infty$ имеются только входящие волны. Подставляя это разложение в волновое уравнение

$$(H - E) \Psi = 0,$$

умножая слева на $\Psi_{\nu'}^*(y)$ и интегрируя по y от $-\infty$ до ∞ , получаем систему связанных уравнений для функций, зависящих от координаты x :

$$\frac{d^2}{dx^2} u_{\nu}^{(\mu_0)}(x) = \sum_{\nu'} B_{\nu\nu'}^{(\mu_0)}(x) u_{\nu'}^{(\mu_0)}(x). \quad (27)$$

Для $\alpha = 0$ уравнения будут несвязанными и искомые решения — просто произведения одномерных волновых функций, описывающих движение в x - и y -направлениях. Конечно, часть полной энергии ($\mu_0 + 1/2$) $\hbar\omega$ заключена в y -моде, так что эффективная энергия для проникновения через одномерный барьер в x -направлении соответственно уменьшается. Входящая в уравнение (27) матрица $B_{\mu\mu'}$ (x) определяется формулой

$$B_{\mu\mu'}(x) = \langle \Psi_{\mu} | \left\{ -\frac{m_x}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2m_x}{\hbar^2} (V(x, y) - E) \right\} | \Psi_{\mu'} \rangle. \quad (28)$$

Чтобы получить решение с правильными граничными условиями, проинтегрируем связанные уравнения (27) от области $x \rightarrow \infty$

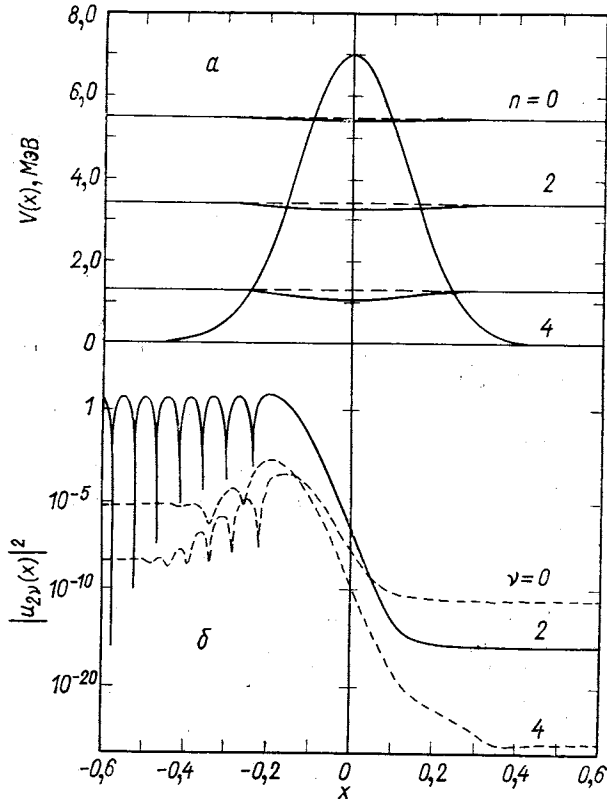


Рис. 2. Барьер деления и квадрат квантовомеханической каналовой функции $u_{2\nu}(x)$ для входящей волны (канала) с $\mu = 2$

в направлении области $x \rightarrow -\infty$ с выходящими волнами в качестве начальных условий. Это повторяется для каждого канала

в области $x > 0$ уравнения (27), причем если канал закрыт, вместо выходящей волны используем экспоненциально убывающие волны. С левой стороны барьера будем тогда иметь входящие и выходящие волны в каждом канале. Обращение матрицы позволяет получить правильную линейную комбинацию волн, удовлетворяющую граничным условиям в области $x \rightarrow -\infty$.

Форма гауссова барьера вместе с адиабатическими трансляционными энергиями в x направлении для трех колебательных

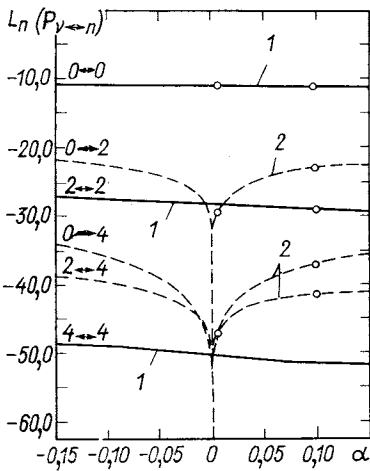


Рис. 3. Проницаемости $P_{\nu n}$ для различных констант связи α : линии соответствуют квантовомеханическому расчету с учетом связи каналов; 1 — для диагональных проницаемостей; 2 — для недиагональных; точки соответствуют расчетам в ОЖКП

прошедшие волны с $\nu = 0, 2$ и 4 с интенсивностями $10^{-10}, 10^{-15}$ и 10^{-24} соответственно. Полученные результаты можно интерпретировать как эффект вибрационного «охлаждения» * при прохождении через барьер, когда состояние с $\nu = 0$ доминирует в прошедшей волне независимо от того, какое было исходное вибрационное состояние в падающей волне. Только в случае константы связи α очень близкой к нулю и долины постоянной ширины эффект «охлаждения» не будет появляться (рис. 3). Для реалистического делительного ландшафта связь достаточно сильная и, кроме того, как ширина долины, так и массовый тензор непостоянны.

* Это «охлаждение» не следует понимать в рамках термодинамики, поскольку рассматриваемый здесь процесс полностью обратим.

(по координате y) каналов с $n = 0, 2$ и 4 показана на рис. 2, а. Вспомним, что рассматриваемая проблема представляет собой типичное подбарьерное деление с энергией возбуждения около $4,5 \text{ Мэв}$, причем классический барьерный порог лежит примерно на $1,5 \text{ Мэв}$ выше (константа связи $\alpha = 0,1$). Каналы с большими n очевидно закрыты, а с каналами, у которых n нечетно, связь отсутствует по соображениям четности. На рис. 2, б приведены графики квадратов волновых функций для падающей (слева) в канале $\mu = 2$ волны, т. е. $|u_{2\nu}(x)|^2$. В канале $\mu = 2$ с левой стороны от барьера наблюдается стоячая волна, поскольку большая часть падающего потока упруго отражается: около 10^{-5} полного потока неупруго отражается в канал $\mu = 4$ и примерно 10^{-8} — в канал $\mu = 0$.

Справа от барьера присутствуют

Как и в случае α -распада с анизотропными барьерами, можно выразить изменение амплитуд трансмиссии с помощью квадратной $(N \times N)$ -матрицы. Эта матрица, действуя на вектор-столбец амплитуд падающих волн, соответствующих различным вибрационным состояниям, дает результирующую матрицу амплитуд прошедших волн:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 3,74 \cdot 10^{-3} & 9,64 \cdot 10^{-6} & 1,01 \cdot 10^{-8} \\ 9,64 \cdot 10^{-6} & 5,17 \cdot 10^{-7} & 9,93 \cdot 10^{-10} \\ 1,01 \cdot 10^{-8} & 9,93 \cdot 10^{-10} & 6,83 \cdot 10^{-12} \end{pmatrix}.$$

Представляя эту матрицу в виде произведения $A^{-1} = PK$, где матрица P соответствует решению задачи без связи каналов ($\alpha = 0$)

$$P = \begin{pmatrix} 4,09 \cdot 10^{-3} & 0 & 0 \\ 0 & 7,4 \cdot 10^{-7} & 0 \\ 0 & 0 & 1,2 \cdot 10^{-11} \end{pmatrix},$$

выделим матрицу K , аналогичную матрице Фремана, фигурирующей в проблеме α -распада:

$$K = \begin{pmatrix} 0,905 & 2,36 \cdot 10^{-3} & 2,47 \cdot 10^{-6} \\ 13,0 & 0,699 & 1,34 \cdot 10^{-3} \\ 841,0 & 82,8 & 0,569 \end{pmatrix}.$$

Эта K -матрица в случае деления столь сильно асимметрична, что применение приближения Фремана, предложенного для процесса α -распада, совершенно неправомерно. Указанная асимметрия K -матрицы вытекает, очевидно, из того факта, что компоненты, отвечающие различным каналам, имеют весьма различные барьеры. Сама же матрица проницаемости A^{-1} симметрична из-за симметричности потенциала в исследуемой модели.

Алгоритм расчета по методу связанных каналов, описанный выше, ограничен случаем конечного числа учитываемых каналов. Он, следовательно, полезен только тогда, когда достаточную сходимость можно получить при учете разумного числа каналов. В описанные выше расчеты было включено три открытых канала. Учет четвертого (закрытого) канала изменяет результаты только в четвертом знаке. Для реалистических поверхностей в разложении (26) необходимо включать намного больше каналов. Это не только увеличивает время вычислений, но и требует модификации метода, чтобы включить в рассмотрение закрытые каналы с большей энергией.

Квантовомеханическое адиабатическое приближение. Первое очевидное приближение, которое должно быть проверено сравнением с точным решением, состоит в том, что волновая функция, которая зависит от y , в частности, гауссиан, соответствующий

низшему состоянию, адиабатически меняет свою ширину в соответствии с тем, как долина изменяет свою ширину вдоль траектории. В этом, так называемом вибрационно-адиабатическом приближении (ВАП) принимаем, что в процессе деления система остается в одном и том же осцилляторном состоянии μ . Проведем в этом приближении одномерный расчет, учитывая только изменение осцилляторной энергии. Вероятности диагональных переходов в отсутствие связи каналов ($\alpha = 0$), которые вычислены с помощью точной квантовомеханической программы (КМ) и одномерной квазиклассической (ВКБ) формулы (11), а также соответствующие вероятности для $\alpha = 0,1$, рассчитанные квантовомеханически точно и в адиабатическом приближении (КМ_{ад}), приведены в табл. 1. В данном примере адиабатическое приближение оказывается хорошим.

Таблица 1

Сравнение результатов квантовомеханических (КМ), адиабатических квантовомеханических (КМ_{ад}) и квазиклассических (ВКБ) расчетов для диагональных переходов

Переход	$\alpha = 0$		$\alpha = 0,1$	
	КМ	ВКБ	КМ	КМ _{ад}
$0 \rightarrow 0$	$1,67 \cdot 10^{-5}$	$1,60 \cdot 10^{-5}$	$1,40 \cdot 10^{-5}$	$1,40 \cdot 10^{-5}$
$2 \rightarrow 2$	$5,48 \cdot 10^{-13}$	$5,21 \cdot 10^{-13}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$	$2,42 \cdot 10^{-13}$
$4 \rightarrow 4$	$1,44 \cdot 10^{-22}$	$1,34 \cdot 10^{-22}$	$4,66 \cdot 10^{-23}$	$3,62 \cdot 10^{-23}$

В рассматриваемой модели тензор инерции не зависит от координат и диагонален, так что методы, описанные выше, т. е. одномерное квазиклассическое приближение и метод траекторий наименьшего действия дают одинаковые результаты и не зависят от α . Эти результаты также приведены в табл. 1. [Заметим, что они эквивалентны приближению сохраняющейся вибрационной энергии (ПСВЭ).] Причина того, почему одномерный ВКБ-метод и метод траекторий наименьшего действия дают результаты, независящие от α , заключается в общем для обоих методов пренебрежении изменением энергии, которая связана с движением, перпендикулярным траектории деления. (На самом же деле в процессе туннелирования эта энергия может меняться.)

Однородное квазиклассическое приближение. Рассмотрим справедливость однородного квазиклассического приближения (ОККП) для нашей модельной задачи. Основная идея этого приближения заключается в том, что используется аналитическое продолжение классических уравнений движения, описывающих динамику

системы, вместе с условиями квантования и принципом суперпозиции при сложении амплитуд для различных траекторий. Обоснование этого приближения и его многих приложений к различным проблемам молекулярного рассеяния и реакций было дано Миллером и др. [44—46]. Поэтому здесь приведем только основные результаты ОККП в применении к нашей модели.

Введем для модельной задачи в асимптотических областях ($|x| \rightarrow \infty$) переменные J, q для описания поперечной коллективной степени свободы. Переменная действия J связана с «квантовым числом» n гармонического осциллятора соотношением $J = 2\pi\hbar(n + 1/2)$, а угловая переменная q с фазой φ осциллятора — соотношением $q = \varphi/2\pi$.

Квазиклассическая S -матрица, квадрат которой определяет вероятность перехода между квантовыми состояниями $n_\mu \rightarrow n_\nu$, дается выражением [44]:

$$S_{\nu \leftarrow \mu} = \sum \left(-2\pi i \left(\frac{\partial n_f(q_i)}{\partial q_i} \right)_{n_\mu} \right)^{-1/2} \exp[i\Phi(n_\nu, n_\mu)], \quad (29)$$

где фаза Φ — классический интеграл действия:

$$\Phi(n_\nu, n_\mu) = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (x\dot{p}_x + y\dot{p}_y) dt - \frac{1}{\hbar} (Jq - yp_y/2) \Big|_{t_i}^{t_f}. \quad (30)$$

Суммирование в (29) распространяется на все возможные классические траектории, удовлетворяющие принятым граничным условиям, т. е. на траектории проникновения через барьер, для которых $n(t_i \rightarrow -\infty) = n_\mu$ и $n(t_f \rightarrow \infty) = n_\nu$.

Имеются некоторые различия между методом ОККП и двумерным методом, использованным в работах [18, 30] и описанным выше. Основная разница проявляется в граничных условиях, используемых в этих двух методах. Граничные условия, которые применяются в ОККП, позволяют рассчитывать проницаемость для любого заданного начального состояния, т. е. не только для основного, в произвольное конечное. Однородное квазиклассическое приближение принимает во внимание полную динамику проблемы: включает в рассмотрение и энергию, которая связана с движением, перпендикулярным траектории деления.

Один из способов найти искомые траектории с корректными граничными условиями состоит в следующем. Проинтегрируем связанные классические гамильтоновы уравнения движения, начиная с некоторой точки $x = x_i (< 0)$, расположенной слева от барьера вне области действия сил, и принимая, что система находится в квантованном, коллективном колебательном состоянии n и обладает некоторым начальным значением угловой переменной q_i . Интегрирование проводится таким образом, что туннельное проникно-

вление приводит в точку $x = x_f (> 0)$, расположенную вне области действия сил справа от потенциального барьера. Результирующее «квантовое число» n_f (обычно не целое), которое описывает конечное состояние поперечных колебаний, оказывается функцией переменной q_i . Классические траектории, которые соответствуют правильным граничным условиям, удовлетворяют уравнению

$$n_f(q_i) = n_v. \quad (31)$$

Искомые траектории туннельного проникновения можно получить при движении по временным траекториям (в плоскости комплексно-

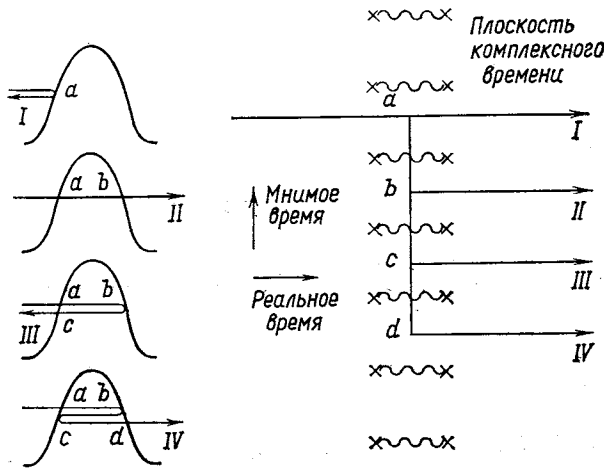


Рис. 4. Диаграмма временных путей:

× — точки ветвления; — — соединяющие их разрезы

го времени), проходящим вокруг соответствующих точек ветвления [45]. Легче всего это проследить на простом одномерном примере туннельного проникновения через симметричный барьер, образованный потенциалом Эккарда [46]. Эту задачу можно решить аналитически, и основные результаты приведены на рис. 4. В плоскости комплексного времени решение имеет пары точек ветвления, соединенные разрезами. Если временной инкремент веществен, то частицы отражаются от барьера; если же он чисто мнимый, то частица, достигшая барьера, проникает в него. Если перейти к реальным временным инкрементам в момент, когда частица достигнет противоположной стороны барьера, то она будет продолжать движение справа от барьера, т. е. произойдет процесс туннельного проникновения. Аналогичным способом необходимо действовать и в нашем двумерном примере.

В рассматриваемом квазиклассическом методе аналитическое продолжение уравнений движения необходимо совершить в комплексную плоскость. Для этого требуется получить аналитическое выражение для потенциальной энергии в гамильтониане. Для потенциала, образованного кусочно-гладкими функциями, не существует однозначного аналитического продолжения в комплексную плоскость, и, следовательно, в таком случае ОККП не применимо. Данное обстоятельство не накладывает, однако, серьезных ограничений на метод, поскольку любую поверхность потенциальной энергии можно аппроксимировать аналитической функцией в интересующей нас области.

Для нашей модели находим, что уравнение (31) всегда имеет два решения, т. е. имеются две величины q_i (обычно комплексные), которые удовлетворяют уравнению $n_f(q_i) = n_v$. Наличие комплексных начальных и конечных фаз не вызывает проблем, поскольку эти фазы ненаблюдаемы. Наблюдаемые величины (например, начальные и конечные квантовые числа n_μ и n_ν) оказываются вещественными в асимптотических областях. В наших расчетах были использованы $\alpha = 0,1$ и $0,01$, что соответствует слабой связи и, следовательно, как и в случае кулоновского возбуждения [48] (другие примеры даны в работах [47]), для недиагональных переходов только одно из двух решений уравнения (27) дает вклад в S -матрицу, что необязательно правильно для больших констант связи. В случае диагональных переходов дают вклад оба корня. Поскольку функция $n_f(q_i)$ (ввиду слабой связи) весьма

Таблица 2

Сравнение вероятностей переходов, полученных с помощью квантовомеханических (КМ) вычислений с результатами расчетов в однородном квазиклассическом приближении (ОККП)

Метод	$\alpha = 0,1$			
	$0 \rightarrow 0$	$0 \rightarrow 2$	$0 \rightarrow 4$	$2 \rightarrow 2$
КМ ОККП	$1,40 \cdot 10^{-5}$ $1,44 \cdot 10^{-5}$	$9,30 \cdot 10^{-11}$ $9,49 \cdot 10^{-11}$	$1,03 \cdot 10^{-16}$ $0,97 \cdot 10^{-16}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$ $2,52 \cdot 10^{-13}$
Метод	$\alpha = 0,1$	$\alpha = 0,01$		
	$2 \rightarrow 4$	$0 \rightarrow 0$	$0 \rightarrow 2$	$0 \rightarrow 4$
КМ ОККП	$9,86 \cdot 10^{-19}$ $9,15 \cdot 10^{-19}$	$1,64 \cdot 10^{-5}$ $1,56 \cdot 10^{-5}$	$1,22 \cdot 10^{-12}$ $1,30 \cdot 10^{-12}$	$1,49 \cdot 10^{-20}$ $1,42 \cdot 10^{-20}$

плавная, выражение для S -матрицы в однородном квазиклассическом приближении можно записать [47, 49] с помощью функций Бесселя. Здесь использовалось выражение для S -матрицы (несколько модифицированное и обобщенное для наших целей), которое первоначально было получено Стином и Маркусом [49]. С помощью известной S -матрицы сразу получаем вероятности переходов $P_{\nu \leftarrow \mu} = |S_{\nu \leftarrow \mu}|^2$. Как видно из рис. 3 и табл. 2, между результатами расчетов в ОККП и точными квантовомеханическими расчетами, выполненными методом связанных каналов, имеется очень хорошее согласие, хотя рассмотренная здесь модель сильно неклассична.

Это хорошее согласие дает уверенность в том, что квазиклассический метод можно также применять в реалистических случаях с более сильной связью каналов, где объем численных расчетов возрастает ненамного, тогда как квантовомеханические вычисления становятся невыполнимыми. Поскольку координатная зависимость инерциальных параметров не вносит дополнительных трудностей, ОККП может быть полезным средством исследования динамики связи между делительной координатой и другими степенями свободы, такими, как гексадекагональные деформации, асимметрия массовых распределений осколков деления и изменения парных корреляций.

3. КОЛЛИНЕАРНАЯ СИСТЕМА, СОСТОЯЩАЯ ИЗ АТОМА И ДВУХАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Проницаемость барьера для искривленной долины и недиагонального массового тензора. Хотя данный обзор преимущественно затрагивает проблемы проницаемости барьера в ядерной физике, целесообразно обсудить также очень важную для теоретической химии проблему проницаемости двумерного барьера в случае коллинеарного столкновения атома водорода с молекулой H_2 . Эта система описывается двумя координатами x и y , причем x (y) — расстояние от левого (правого) атома до центрального. Гамильтониан относительного движения в системе координат, где полный центр масс покоится, можно записать в виде

$$H = m\dot{x}^2/3 + m\dot{x}\dot{y}/3 + m\dot{y}^2/3 + V(x, y). \quad (32)$$

Здесь m — масса атома водорода; потенциал $V(x, y)$ имеет вид двух долин, протянувшихся параллельно соответственным координатным осям и отстоящих от них на расстояния, равные равновесному удалению атомов в молекуле H_2 . Глубина долин в асимптотической области — энергия связи молекулы плюс энергия ее нулевых колебаний. При приближении вдоль долин к их началу дно долин повышается к седловой точке, соответствующей энергии

линейно-симметричного «активационного комплекса» в реакции обмена с центральным водородным атомом. Отметим, что при сделанном выборе координат инерциальный тензор оказывается недиагональным. В седловой точке можно провести стандартный анализ с использованием нормальных координат, разлагая в ряд потенциал и оставляя в этом разложении только квадратичные члены:

$$V_{\text{седл}}(x, y) = V_s + C_{xx}x^2/2 + C_{xy}xy + C_{yy}y^2/2, \quad (33)$$

где ввиду условий симметрии для констант упругости имеем $C_{xx} = C_{yy}$ на линии $x = y$. Из двух собственных частот детерминантного уравнения одна ω_s , отвечающая симметричному растяжению, вещественна, тогда как другая — для асимметричного растяжения ω_a оказывается мнимой. Нормальные координаты параллельны осям, повернутым на 45° , а именно $(x + y)/\sqrt{2}$ и $(x - y)/\sqrt{2}$ для симметричной и асимметричной мод соответственно. Легко проверить (подстановкой), что такое преобразование координат делает диагональными и массовый тензор, и потенциальную энергию в седловой точке. Заметим, что в любой точке вдоль линии $x = y$ это преобразование устраняет недиагональные члены в кинетической и потенциальной энергиях, но линейный потенциальный член, зависящий от координаты симметричного растяжения, существует всюду кроме седловой точки.

Вне линии $x = y$ имеем $C_{xx} \neq C_{yy}$, так что переход к нормальным координатам, устраняющим перекрестные члены типа xy и xy , будет осуществляться различным образом в разных местах. Применительно к вибрационно-адиабатическому приближению (ВАП) для проницаемости многомерного барьера с недиагональными массовыми тензорами необходимо проводить преобразование к нормальным координатам для последовательных точек вдоль траектории туннелирования, чтобы можно было определять энергию, которая связана с движением, перпендикулярным этой траектории.

В некотором смысле проблема коллинеарных реакций является не идеальной для понимания деталей двумерного туннелирования из-за наличия сразу нескольких осложнений — недиагональности массового тензора, искривленности и непостоянной ширины долины (она более широкая в седловой точке, чем в асимптотических областях). Тем не менее требуемый (весьма большой) объем вычислений можно выполнить, так что данная система оказывается наилучшей иллюстрацией того, как происходит проникновение через неодномерный барьер.

Трулар и Куперман [50] провели проверку возможностей двух простых траекторных приближений, сравнивая их с полным квантовомеханическим описанием. В обоих приближениях траектория

туннелирования выбиралась вдоль дна потенциальной долины, но в приближении сохраняющейся колебательной энергии (ПСВЭ)—аналогичное приближение в случае спонтанного деления — профиль потенциальной долины прямо становится потенциалом для одномерного расчета проницаемости. В другом приближении — вибрационно-адиабатическом с нулевой кривизной (ВАНК) — для последовательных точек вдоль траектории туннелирования энергия получается вычитанием из полной энергии ее части, отвечающей «поперечным» колебаниям. Имея более широкую долину в седловой точке и более низкую точку отсчета энергии, приближение ВАНК приводит к большим проницаемостям, чем ПСВЭ. При этом приближение ВАНК оказывается в гораздо лучшей согласии с результатами точного квантовомеханического расчета. Однако для более подбарьерного туннелирования приближение ВАНК существенно недооценивает проницаемости, и это несогласие связано с эффектом «срезания углов» при прохождении седловой точки. (В приложении 1 рассмотрим простую модельную систему с искривленной долиной, на примере которой можно понять явление «срезания углов».)

Выше было показано, что интегрируя классические уравнения движения с комплексными переменными (ОККП), можно получить отличное согласие с результатами квантовомеханических расчетов по методу связанных каналов. При этом рассматривается прямая долина переменной ширины. Наша работа в большой степени была инспирирована статьей Джорджа и Миллера [45], посвященной проблеме реакции $H + H_2$. Получилось хорошее согласие между их квазиклассическими и квантовомеханическими результатами, хотя Хорнстейн и Миллер [51] предложили некоторые модификации, которые должны улучшить уровень согласия по сравнению с достигнутым Даффом и Труларом [52]. Траекторная карта Джорджа и Миллера [45], отлично иллюстрирующая эффект срезания углов при различных энергиях, приведена на рис. 5. Повторим предостережения этих авторов: на рис. 5 изображены только реальные части комплексных координат и выбор временной траектории в этих расчетах неоднозначен.

Даже в отсутствие колебательных возбуждений необходимо проявлять осторожность при отыскании реальных траекторий наименьшего действия и при адиабатическом вычитании энергии нулевых колебаний в случае рассмотрения проблем с искривленными долинами или с особенностями в массовом тензоре. Такие проблемы требуют для своего изучения или полного квантовомеханического подхода, или применения метода ОККП с комплексными траекториями. На первый взгляд кажется, что двумерные траектории туннелирования должны начинаться с контура, проходящего через классические точки поворота. Однако рассмотрение случая прямых долин постоянной ширины, когда задача

точно сепарабельна, приводит к выводу, что траектория туннелирования должна начинаться с контура, который расположен ниже контура классических точек поворота на энергию нулевых колебаний в направлении, перпендикулярном оси деления. Для энергий,

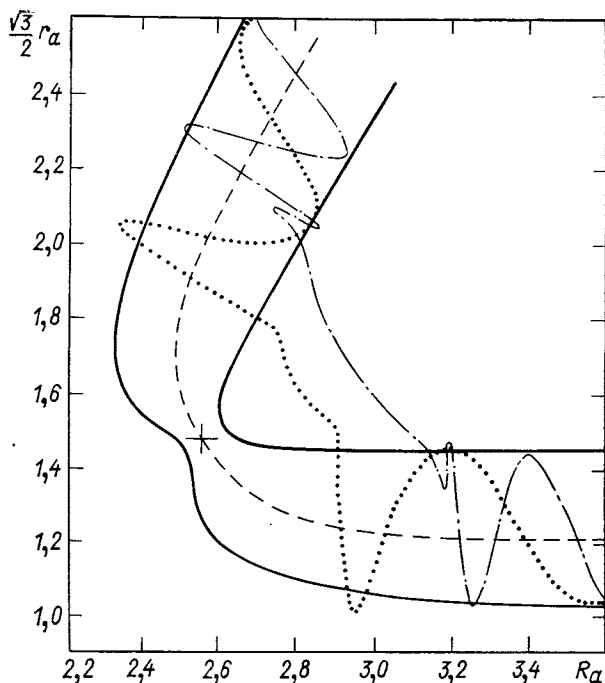


Рис. 5. Траектории туннелирования из основного состояния в основное для реакции $H + N_2$:

... — энергия столкновения $E_0 + 0,2 \text{ эВ}$; — · — · — $E_0 - 0,2 \text{ эВ}$; — — — — координаты реакции, т. е. траектория минимума потенциальной энергии; + — седловая точка; переменные R_α и r_α — реальные части комплексных трансляционных и вибрационных координат соответственно. Значения R_α и r_α связаны с координатами x и y соотношениями $y = r_\alpha$, $x = R_\alpha - r_\alpha/2$

близких к вершине барьера, применение простого приближения ВКБ является некорректным. Вместо этого для проницаемости можно использовать выражение, предложенное Фреманами [34]:

$$P_{BA} = \left\{ 1 + \exp \left(\frac{2}{\hbar} \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{2B_{xx}(V - E - \hbar\omega_y(x)/2)} dx \right) \right\}^{-1}, \quad (34)$$

где интеграл берется вдоль пути наименьшего действия, который находится с помощью прямой минимизации или решения класси-

ческих уравнений движения для периодических орбит с чисто мнимым временем.

Другие проблемы проникновения через барьер по искривленной траектории возникают при рассмотрении парных корреляций в терминах коллективных координат, как это было предложено Моретто и Бабинэ [33] для спонтанного деления. В этом случае путь наименьшего действия «выталкивается» со дна долины за счет компоненты V_{xx} инерциального тензора, которая уменьшается с \bar{y} (Δ). (Пример из приложения 2 иллюстрирует этот эффект «выталкивания», связанный с переменностью массового тензора.) Эта интересная проблема заслуживает дальнейшего изучения с реалистическими параметрами и полным анализом двумерной динамики.

4. РЕЗЮМЕ ПО ПРОБЛЕМАМ ПРОНИЦАЕМОСТИ ДВУМЕРНЫХ БАРЬЕРОВ

Кроме проблем барьерной проницаемости, допускающих точное разделение переменных и сводящихся поэтому к простому одномерному случаю, были рассмотрены здесь два класса несепарабельных проблем. Первый из них α -распад сфероидалных ядер характеризуется разностями между энергиями каналов, малыми по сравнению с высотой барьера и кинетическими энергиями вдали от него. Явления проникновения через барьер деления и коллинеарных реакций между тремя атомами водорода образуют второй класс проблем, для которых разности между энергиями каналов сравнимы с высотой барьера и внешними кинетическими энергиями, и, кроме того, необходимо учитывать вклад закрытых каналов.

Проблему проницаемости двумерных барьеров можно решать прямыми двумерными методами типа тех, которые использовались Кумаром и Баранжером [53] для получения функций связанных состояний ядер в пространстве переменных β и γ , описывающих форму ядра. Практически же наиболее сильным методом, применяемым для решения указанных выше проблем, является метод связанных каналов. В этом методе волновая функция разлагается в ряд по ортогональной системе функций, которые не зависят от переменных, описывающих непосредственно процесс проникновения через барьер. Зависимость от этих переменных входит только в коэффициенты разложения. После подстановки указанного разложения в уравнение движения, выраженное в частных производных, и интеграции по переменным, не описывающим проникновение, получается система связанных обыкновенных дифференциальных уравнений на коэффициенты разложения искомой функции.

Оба класса упомянутых выше проблем содержат сходные трудности, препятствующие проведению численных расчетов, а именно только половина из полного набора линейно-независимых реше-

ний волнового уравнения устойчива в процессе интеграции для сильных барьеров. Экспоненциально убывающие решения нельзя получить из-за экспоненциально возрастающих в процессе вычислений погрешностей округления. Часто используются двусторонние граничные условия для решения матричных уравнений, основанных на полной системе линейно-независимых решений. Применяемые приближенные методы учитывают существенные различия двух классов проблем. Для первого класса (α -распад), характеризующегося малыми разностями энергий каналов, хорошие результаты дает матричное приближение Фремана — Носова [9, 14]. В этом приближении матрица проницаемости конструируется с помощью решений одномерного волнового уравнения, описывающего процесс проникновения через барьер для фиксированных значений остальных переменных. Кинетическая энергия, связанная с этими последними переменными, не игнорируется, а рассматривается усредненным способом.

Для проблем деления и трехатомных столкновений подход Фремана — Носова не приемлем. Часто для этого класса проблем интересуются только проницаемостями при отсутствии вибрационных возбуждений. В таком случае уместно искать ответ в терминах одномерного ВКБ интеграла по траектории наименьшего действия. Только сравнительно недавно было обращено внимание на некоторые тонкости, которые касаются выбора траектории и распределения полной энергии между степенями свободы, ответственными за проницаемость барьера, и остальными степенями свободы. Было показано, что в случае изогнутых потенциальных долин традиционный выбор траекторий по их дну и аналогичный выбор для седловин являются некорректными. Истинный путь наименьшего действия «срезает углы» тем сильнее, чем ниже энергия по отношению к седловой точке, причем такая траектория приводит к увеличению проницаемости по сравнению с движением по дну долины. Моретто и Бабин [33] показали, что переменность массового тензора может также приводить к выталкиванию пути наименьшего действия вверх со дна долины.

Наконец, существует вопрос распределения кинетической энергии между степенью свободы, связанной с проницаемостью, и степенями свободы, характеризующими внутреннее состояние системы. В традиционных подходах полностью пренебрегают энергией, так сказать, нулевых колебаний. Некоторое улучшение достигается, когда энергия, с которой рассчитывается проницаемость барьера, получается вычитанием из полной энергии ее части, связанной с внутренним движением туннелирующей системы. Трулар и Кусерман [50] показали, что для проблемы столкновения $\text{H} + \text{H}_2$ такое приближение сохраняющихся вибраций ПСВЭ является не очень хорошим. В этом случае долина значительно уширяется в седловой точке. Вибрационно-адиабатическое при-

ближение (ВАП) оказывается гораздо лучше. В этом приближении варьируемая энергия нулевых колебаний вычитается из полной энергии для каждой точки вдоль траектории при вычислении одномерного ВКБ интеграла.

Для случаев, когда о барьер ударяется система, находящаяся в возбужденных колебательных состояниях, мало что еще известно о применимости тех или иных приближений. Решение в рамках метода связанных каналов указывает на возможное существование эффекта «вибрационного охлаждения» при проникновении сквозь барьер, т. е. первоначально возбужденная система после прохождения через барьер оказывается преимущественно в самом низком по вибрациям состоянии. Возможно, что полную проницаемость можно получить в ВАП в виде произведения проницаемости для системы, находящейся в возбужденном состоянии (в области барьера с достаточно сильной связью) и соответствующей проницаемости для системы в основном состоянии (для остальной части барьера).

Существуют другие, подлежащие проверке, приближенные методы. Например, в квазиклассическом методе интеграция классических уравнений движения проводится в плоскости комплексного времени, причем для чисто мнимых временных инкрементов происходит туннельный переход через барьер. Такой подход может оказаться в некоторых случаях более приемлемым по сравнению с методом связанных каналов и приведет к более глубокому физическому пониманию исследуемых проблем. Однако применение квазиклассических методов становится более сложным при приближении энергии к вершине барьера, где начинают давать вклад кратные траектории. Кроме того, решение задачи с двусторонними граничными условиями становится значительно сложнее для более чем двумерных барьеров.

Недавно привлек к себе внимание метод отыскания периодических орбит для движения с чисто мнимым «временем». Для чисто мнимых временных инкрементов члены кинетической энергии в классических уравнениях движения меняют знак на противоположный, а потенциальные барьеры превращаются во впадины. При этом в обобщенном квазиклассическом описании остальные переменные (кроме времени) могут оставаться реальными. Однако для полного описания двумерной динамики проблемы необходимо доказать, что в описанном выше подходе можно провести учет движения, который соответствует степеням свободы, не связанным с проникновением через барьер. Тем не менее уже в нынешнем состоянии метод представляется полезным при рассмотрении проницаемости многомерного барьера и для понимания взаимного соответствия между ситуациями с положительной и отрицательной кинетическими энергиями. Примеры, проанализированные в приложениях 1 и 2, показывают, что за счет действия отрицательного

центробежного потенциала траектория проникновения срезает углы искривленных барьеров, в то время как надбарьерные траектории выталкиваются наружу из искривленной долины. Траектории проникновения для случая отрицательной кинетической энергии выталкиваются «в сторону» более низких компонент массового тензора, тогда как для положительной кинетической энергии траектории определяются тензорными компонентами, имеющими большие значения. Связь каналов приводит для отрицательных кинетических энергий к эффекту «вибрационного охлаждения», и к дополнительному возбуждению вибрационных мод для случая положительных кинетических энергий. Из опыта учета связи каналов можно высказать предположение, что включение в классические уравнения движения членов, соответствующих трению, может привести к выигрышу кинетической энергии для траектории туннелирования на величину, которая равна потерям кинетической энергии, необходимым на разогрев.

Заметим в заключение, что в целом теоретическое изучение классически запрещенных процессов с более чем одной степенью свободы переживает период активного развития. Открываются новые проблемы и есть надежда, что будет достигнут новый более глубокий уровень понимания изучаемых явлений.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Туннелирование вдоль долины, повернутой углом

Как квантовомеханический, так и квазиклассический расчеты траекторий туннельного проникновения для коллинеарных реакций $\text{H} + \text{H}_2$ показали, что эффект проникновения больше, когда движение происходит по пути наименьшего действия, «срезающего углы», т. е. проницаемость всегда усилена для долин, имеющих кривой профиль, по сравнению с долинами, обладающими плоским дном. Численное изучение проблемы столкновения $\text{H} + \text{H}_2$ не позволяет отделить эффекты, связанные с кривизной долины, от эффектов, определяемых ее уширением в седловой точке. Так что полезно исследовать модельную систему с «кривой» долиной постоянной ширины.

Рассмотрим частицу массы μ , движущуюся в циркулярной долине (рис. 6, а), сечение которой определяется соотношением:

$$V(r) = (\hbar^2/2\mu)(A/r^2) + Cr^2/2 \quad (\text{П.1})$$

с $\sqrt{A} \gg 1$. Долина наиболее глубокая для радиуса

$$r_0 = \sqrt{\hbar/(\mu\omega)} A^{1/4} = aA^{1/4}, \quad (\text{П.2})$$

где $C = \mu\omega^2$ и $a = \sqrt{\hbar/(\mu\omega)}$, причем $V(r_0) = \sqrt{A}\hbar\omega$. Решим следующее уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + \frac{\hbar^2 A}{2\mu r^2} + \frac{Cr^2}{2} - E \right] \Psi(r, \varphi) = 0. \quad (\text{П.3})$$

Его решение имеет вид

$$\Psi(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R_{nl}(r/a) \exp(i l \varphi), \quad (\text{П.4})$$

где R_{nl} удовлетворяет радиальному уравнению

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(\frac{2E_{nl}}{\hbar\omega} - \rho^2 + \frac{l^2 + A}{\rho^2} \right) \right] R_{nl}(\rho) = 0. \quad (\text{П.5})$$

Решение последнего уравнения имеет приемлемые граничные условия только, когда E_{nl} выражается в виде

$$\begin{aligned} E_{nl} &= \hbar\omega (2n + 1 + \sqrt{A + l^2}) = E_{00} + E_{\text{рад}} + E_{\text{угл}} = \\ &= \hbar\omega \sqrt{A} + \hbar\omega (2n + 1) + \hbar\omega (\sqrt{A + l^2} - \sqrt{A}), \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

где n — целое. Решение уравнения (П.5) можно записать в форме [54]

$$R_{nl}(\rho) = N_{nl} \exp(-\rho^2/2) \rho^{\sqrt{A+l^2}} L_n(\sqrt{A+l^2}) (\rho^2), \quad (\text{П.7})$$

где функции Лаггерра определены согласно [55]:

$$L_n^{(\alpha)}(Z) \equiv \frac{e^Z Z^{-\alpha}}{n!} \frac{d^n}{dZ^n} (\exp(-Z) Z^{n+\alpha}).$$

Среднее расстояние, на котором частица с угловым моментом l и энергией

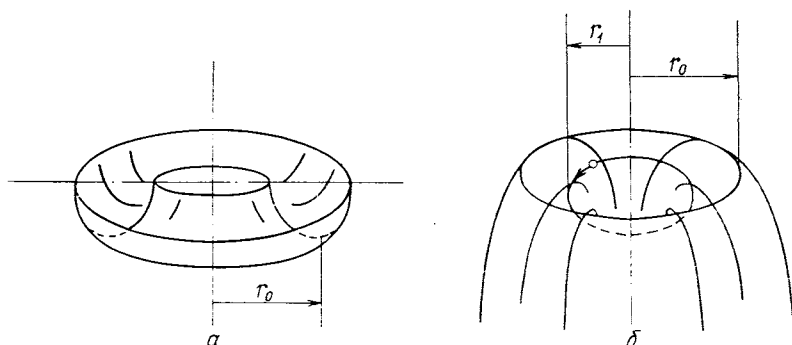


Рис. 6. Круговая долина с дном, удаленным от оси симметрии на расстояние r_0 (а); на рис. б показан случай с инвертированным, по сравнению с рис. а, потенциалом

E_{nl} движется вдоль по долине, определяется формулой

$$r_1 = \sqrt{\langle r^2 \rangle} = \left[\int_0^\infty R_{nl}^2(r/a) r^3 dr \right]^{1/2} = a (2n + 1 + \sqrt{A + l^2})^{1/2}. \quad (\text{П.8})$$

Изучим процесс туннелирования, т. е. случай, когда энергия $E_{\text{угл}}$ (П.6) отрицательна. Это имеет место, когда l чисто мнимое $l = il_0$ ($l_0 > 0$). Рассмотрим далее случай $n = 0$, поскольку для $n \neq 0$ ситуация подобная. Из уравнения (П.4) видно, что волновая функция для мнимых l не описывает стационарного состояния, а отвечает экспоненциально затухающему состоянию $\exp(-l_0\Phi)$. Тогда для величины r_1 имеем, принимая $\sqrt{A} \gg l_0$:

$$r_1 = a \sqrt{1 + \sqrt{A - l_0^2}} \approx a \sqrt[4]{A - l_0^2} \approx r_0 (1 - l_0^2/A), \quad (\text{П.9})$$

т. е. частица движется с большей вероятностью по внутреннему склону долины. Таким образом, в «процессе проникновения» система «режет угол».

Этот же результат можно понять с более классической точки зрения, при нахождении минимума \bar{r}_1 эффективного потенциала:

$$V_{\text{эф}} = V(r) + V_{\text{центр}}(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{A}{r^2} + \frac{1}{2} Cr^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{(il_0)^2}{r^2}; \quad (\text{П.10})$$

$$\bar{r}_1 = a \sqrt[4]{A - l_0^2}. \quad (\text{П.11})$$

Полученная таким способом величина \bar{r}_1 согласуется с r_1 из (П.9), т. е. минимум эффективного потенциала сдвинут к меньшим r по сравнению с минимумом $V(r)$. Последний результат связан с тем, что процесс проникновения можно понять, используя классические уравнения движения с инвертированным потенциалом. При этом проблема сводится к нахождению стабильных орбит для системы, «движущейся» на холме с кратером (см. рис. 6, б) и обладающей угловым моментом l_0 . Чем быстрее движение, тем глубже в «кратере» оно должно происходить. Приравнивая центробежную силу силе, действующей на систему в потенциале, находим

$$\mathbf{f}_{\text{пот}} = - \frac{\partial V}{\partial r} \hat{r} = \left(Cr - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{A}{r^3} \right) \hat{r}; \quad \mathbf{f}_{\text{центр}} = \mu \frac{v^2}{r} \hat{r} = \frac{l^2}{\mu r^3} \hat{r};$$

$$\mathbf{f}_{\text{центр}} + \mathbf{f}_{\text{пот}} = \left(Cr - \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{A}{r^3} + \frac{l_0^2}{\mu r^3} \right) \hat{r} = 0; \quad \bar{r}_1 = a \sqrt[4]{A - l_0^2}.$$

Итак, при движении по изогнутой долине для положительных кинетических энергий центробежные силы выталкивают систему на внешний борт долины (бобслей-эффект); для отрицательных же энергий центробежные силы имеют отрицательный знак и в процессе туннелирования система «срезает угол».

Введем $f = (r_0 - r_1)/r_0$, характеризующую степень срезания угла, и выразим ее в терминах константы «упругости» кривой долины C' и радиуса кривизны долины r_0 . В результате найдем

$$f = 8 |E_{\text{угл}}| / (C' r_0^2), \quad (\text{П.12})$$

где

$$C' = 4\hbar^2 A / (ar_1^2).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Туннелирование с переменной массой вдоль прямой долины

Рассмотрим потенциал

$$V(x, y) = Cy^2/2, \quad (\text{П.13})$$

который представляет прямую долину, причем ось x совпадает с дном долины. Массовый тензор будет в этом случае диагональным, но зависящим от координаты y :

$$m_{xy} = m_{yx} = 0; \quad m_{xx} = m_0 (1 + \alpha y/y_0); \quad m_{yy} = m_0, \quad (\text{П.14})$$

где $y_0 = [\hbar^2 / (m_0 C)]^{1/4}$. Параметр α принимается малым. Исходя из классического лагранжиана, находим следующие (классические) уравнения движе-

ния:

$$\frac{d}{dt} [m_0(1 + \alpha y/y_0) \dot{x}] = 0; \quad (\text{П.15})$$

$$m_0 \ddot{y} - \frac{1}{2} m_0 \frac{\alpha}{y_0} \dot{x}^2 + Cy = 0. \quad (\text{П.16})$$

Первое из этих уравнений дает закон сохранения линейного момента в направлении оси x . Траектория туннелирования есть прямая линия для случая, когда составляющая кинетической энергии вдоль оси x отрицательна. Эта траектория имеет, конечно, $\dot{y} = \ddot{y} = 0$ и $y = \bar{y} = \text{const}$, где \bar{y} — величина удаления от дна долины. При этом из уравнений движения находим

$$\bar{y} = \alpha m_0 \dot{x}^2 / (Cy_0).$$

Вводя энергию в направлении туннелирования, которая, конечно, отрицательна:

$$E_{\text{Тун}} = (m_0/2) (1 + \alpha \bar{y}/y_0) \dot{x}^2 \approx \dot{x}^2 m_0/2 < 0,$$

получаем

$$\bar{y} = -y_0 \frac{\alpha}{2} \left(\frac{|E_{\text{Тун}}|}{Cy_0^2/2} \right) = -\frac{\alpha |E_{\text{Тун}}|}{Cy_0}. \quad (\text{П.17})$$

Существенно те же результаты получаются при рассмотрении интегралов действия и минимизации величины y . Последнее имеет место, когда

$$\frac{\partial}{\partial y} \sqrt{2m(1 + \alpha y/y_0)(V - E)} = 0$$

или

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\left(1 + \alpha \frac{y}{y_0} \right) \left(\frac{1}{2} Cy^2 - E \right) \right] \approx \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{2} Cy^2 - E - \frac{E\alpha y}{y_0} \right] = Cy - E\alpha/y_0 = 0.$$

Мы рассматриваем прямой трек, т. е. случай, когда в гармоническом движении энергия отсутствует, тогда E есть энергия движения в направлении туннелирования $E = E_{\text{Тун}} < 0$. Исходя из этого, легко приходим к соотношению (П.17).

В заключение можно сказать, что траектории для процессов туннелирования будут сдвигаться в направлении областей с меньшей энергией. Зависимость расстояния \bar{y} между дном потенциальной долины и равновесной траекторией от существенных параметров проблемы определяется (П.17).

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Туннелирование вдоль прямой долины с переменной шириной

Проведем рассмотрение со следующей потенциальной энергией:

$$V(x, y) = [C_0 + C_1 \delta(x)] y^2/2. \quad (\text{П.18})$$

Это соответствует прямой долине (ось x совпадает с ее дном), ширина которой испытывает резкий скачок в точке $x = 0$. Массовый тензор при этом диагонален, его элементы постоянны и равны μ . Уравнение Шредингера

записывается в следующем виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{2} [C_0 + C_1 \delta(\alpha x)] y^2 - E \right] \Psi(x, y) = 0. \quad (\text{П.19})$$

Рассмотрим случай туннелирования вдоль долины ($E < 0$). В обеих областях ($x \geq 0$) проблема сепарабельна, так что волновая функция представляется в форме

$$\Psi = \sum_{n \geq 0} [A_n \exp(-k_n x) + B_n \exp(k_n x)] N_n H_n(\alpha y) \exp(\alpha^2 y^2 / 2), \quad (\text{П.20})$$

где

$$k_n = [2\mu(\hbar\omega(n+1/2) - E)]^{1/2}/\hbar; \quad \alpha = (\mu\omega/\hbar)^{1/2},$$

причем

$$\hbar\omega = \hbar \sqrt{C_0/\mu}.$$

Найдем решение с таким граничным условием, что при больших отрицательных x существует только одно вибрационное состояние с $n = n_0$ ($A_n^{(л)} = \delta_{nn_0}$), а при больших положительных x присутствуют только убывающие волны ($B_n^{(п)} = 0$). На границе, в точке $x = 0$, левое и правое решения должны спиваться непрерывно, однако δ -функция приводит к разрывности в производной, т. е.

$$\Psi^{(л)}(x=0, y) = \Psi^{(п)}(x=0, y); \quad (\text{П.21})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(л)}(x, y) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(п)}(x, y) \Big|_{x=0} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{C_1 y^2}{2\alpha} \Psi(x=0, y). \quad (\text{П.22})$$

Подставляя в соотношения (П.21) и (П.22) разложение (П.20), умножая затем слева на $H_m(\alpha y) \exp(-\alpha^2 y^2 / 2)$ и интегрируя по y , находим, используя ортогональность волновых функций гармонического осциллятора:

$$A_m^{(л)} + B_m^{(л)} = A_m^{(п)} + B_m^{(п)}; \quad (\text{П.23})$$

$$k_m (A_m^{(л)} - B_m^{(л)}) = k_m (A_m^{(п)} - B_m^{(п)}) + \frac{\mu C_1}{\alpha \hbar^2} \sum_n \langle m | y^2 | n \rangle (A_n^{(п)} + B_n^{(п)}). \quad (\text{П.24})$$

Применяя граничные условия, получаем

$$\delta_{mn_0} + B_m^{(л)} = A_m^{(п)}, \quad (\text{П.25})$$

$$\delta_{mn_0} - B_m^{(л)} = A_m^{(п)} + \frac{\mu C_1}{\alpha \hbar^2 k_m} \sum_n \langle m | y^2 | n \rangle A_n^{(п)}. \quad (\text{П.26})$$

Исключая $B_m^{(л)}$, имеем

$$A_m^{(п)} + \frac{\mu C_1}{2\hbar^2 \alpha k_m} \sum_n \langle m | y^2 | n \rangle A_n^{(п)} = \delta_{mn_0}. \quad (\text{П.27})$$

Матричные элементы выражаются формулами

$$\langle m | y^2 | m \rangle = \frac{\hbar}{2\mu\omega} (2m+1);$$

$$\langle m | y^2 | m+2 \rangle = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \sqrt{(m+1)(m+2)};$$

$$\langle m | y^2 | m-2 \rangle = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \sqrt{m(m-1)}.$$

Рассмотрим случай невозбужденной падающей волны ($n_0 = 0$):

$$A_0^{(\text{np})} + \frac{\mu C_1}{2\hbar^2 k_0 \alpha} \frac{\hbar}{2\mu\omega} [A_0^{(\text{np})} + \sqrt{2} A_2^{(\text{np})}] = 1;$$

$$A_2^{(\text{np})} + \frac{\mu C_1}{2\hbar^2 k_2 \alpha} \frac{\hbar}{2\mu\omega} [\sqrt{2} A_0^{(\text{np})} + 5A_2^{(\text{np})} + \sqrt{12} A_4^{(\text{np})}] = 0;$$

.

.

Эти уравнения можно решить в приближении теории возмущений, если принять, что $C_1/(4\hbar\alpha\omega) = k < k_0$. Тогда в наиминиме по параметру k/k_n порядке имеем

$$A_2^{(\text{np})} \approx k \sqrt{2}/k_2; \quad A_0^{(\text{np})} \approx 1 - k/k_0.$$

Для случая падающей волны с $n_0 = 2$ подобным же образом находим в нижайшем порядке:

$$A_0^{(\text{np})} \approx k \sqrt{2}/k_0; \quad A_2^{(\text{np})} \approx [1 - (k/k_2) 5];$$

$$A_4^{(\text{np})} \approx -(k/k_4) \sqrt{12}.$$

Волна с $n = 0$ не распадается так быстро, как волна с $n = 2$, так что на некотором расстоянии \bar{x} они будут пересекаться, причем первая будет доминирующей на больших расстояниях. Величину \bar{x} можно найти из уравнения

$$A_0^{(\text{np})} \exp(-k_0 \bar{x}) = A_2^{(\text{np})} \exp(-k_2 \bar{x}).$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Breit G., Ebel M. E. «Phys. Rev.», 1956, v. 103, p. 679; Breit G., Ebel M. E. «Phys. Rev. B», 1954, v. 104, p. 404.
2. Alder K. e.a. «Nucl. Phys. A», 1972, v. 191, p. 399.
3. Broglia R. A., Winther Aa. «Phys. Report C», 1972, v. 4, p. 155.
4. Oppenheimer J. R. «Phys. Rev.», 1928, v. 31, p. 349.
5. Brinkman M. C., Kramers H. A. «Proc. Acad. Scient. Amsterdam», 1930, v. 33, p. 973.
6. Raisbeck G., Yiou F. «Phys. Rev. A», 1971, v. 4, p. 1858.
7. Rasmussen J. O., Segall B. «Phys. Rev.», 1956, v. 103, p. 1298.
8. Racah G. «Phys. Rev.», 1942, v. 62, p. 438.
9. Fröman P. O. «Mat. Fys. Skr. Dan. Vid. Selsk.», 1957, Bd. 1, No. 3.
10. Rasmussen J. O., Hansen E. R. «Phys. Rev.», 1958, v. 109, p. 1656.
11. Nilsson S. G. «Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.», 1955, No. 16. (cf. Appendix A).
12. Pennington E. M., Preston M. A. «Canad. J. Phys.», 1958, v. 36, p. 944.
13. Soinski A. Study of partial wave branching in the alpha decay of ^{241}Am , ^{253}Es and ^{255}Fm . Ph. D. Thesis, University of Calif. Berkeley, 1974. LBL-3411.
14. Носов В. Г. «Докл. АН СССР», 1957, т. 112, с. 414.
15. Струтинский В. М. «ЖЭТФ», 1957, т. 32, с. 1412.
16. Chasman R., Rasmussen J. O. «Phys. Rev.», 1959, v. 115, p. 1257; «Phys. Rev.», 1958, v. 112, p. 512.
17. Strutinsky V. M. «Ark. Fys.», 1967, Bd 36, S. 629; «Nucl. Phys. A», 1967, v. 95, p. 420.
18. Brack M. e.a. «Rev. Mod. Phys.», 1972, v. 44, p. 320.

19. Nilsson S. G. e.a. «Nucl. Phys. A», 1969, v. 131, p. 1.
20. Strutinsky V. M., Pauli H. C. Physics and Chemistry of Fission. Proc. Symp. Vienna, 1969. IAEA, Vienna, 1969, p. 155.
21. Bolsteri M. e.a. «Phys. Rev. C», 1972, v. 5, p. 1050.
22. Pauli H. C., Ledergerber T. «Nucl. Phys. A», 1971, v. 175, p. 545.
23. Möller P., Nix J. R. Physics and Chemistry of Fission. Proc. Symp. Rochester, 1973. IEAE, Vienna, 1974, p. 103.
24. Mustafa M. G., Mosel U., Schmitt H. W. «Phys. Rev. C», 1973, v. 7, p. 1519.
25. Поляканов С. М. и др. «ЖЭТФ», 1962, т. 42, с. 1464.
26. Larson S. E., Leander G. Physics and Chemistry of Fission. Proc. Symp. Rochester, 1973. IAEA, Vienna, 1974, p. 177.
27. Möller P., Nilsson S. G. «Phys. Lett. B», 1970, v. 31, p. 283; Möller P. «Nucl. Phys. A», 1972, v. 192, p. 529.
28. Nix J. R. «Nucl. Phys. A», 1969, v. 130, p. 241.
29. Damgaard J. e.a. Physics and Chemistry of Fission. Proc. Symp. Vienna, 1969. IAEA, Vienna, 1969, p. 213.
30. Ledergerber T., Pauli H. C. «Nucl. Phys. A», 1973, v. 207, p. 1.
31. Hofman H., Dietrich K. «Nucl. Phys. A», 1971, v. 165, p. 1.
32. Hofmann H. «Z. Phys.», 1972, Bd 250, S. 14.
33. Moretto L. G., Babinet R. P. «Phys. Lett. B», 1974, v. 49, p. 147.
34. Fröman P. O., Fröman N. JWKB Approximation, Contribution to the Theory. North Holland Press, Amsterdam, 1965.
35. Randrup J. e.a. «Nucl. Phys. A», 1973, v. 217, p. 221.
36. Griffin J. Proc. of Heavy Ion summer study 1972. Oak Ridge, 1972, p. 123.
37. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М., Физматгиз, 1958.
38. Goldstein H. Classical Mechanics. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1950.
39. Maruhn J., Greiner W. «Phys. Lett. B», 1973, v. 44, p. 9.
40. Meyers W. D., Swiatecki W. J. «Ark. Phys.», 1967, v. 36, p. 343.
41. Miller W. H. «J. Chem. Phys.», 1975, v. 62, p. 1899.
42. Hofmann H. «Nucl. Phys. A», 1974, v. 224, p. 116.
43. Massmann H., Ring P., Rasmussen J. O. «Phys. Lett. B», 1975, v. 57, p. 417.
44. Miller W. H. «J. Chem. Phys.», 1970, v. 53, p. 1949; Miller W. H. «J. Chem. Phys.», 1970, v. 53, p. 3578; Miller W. H., George T. F. «J. Chem. Phys.», 1972, v. 56, p. 5668; Doll J. D., George T. F., Miller W. H. «J. Chem. Phys.», 1972, v. 58, p. 1343.
45. George T. F., Miller W. H. «J. Chem. Phys.», 1972, v. 57, p. 2458.
46. Marcus R. A. «J. Chem. Phys.», 1971, v. 54, p. 3965.
47. Miller W. H. «Adv. Chem. Phys.», 1974, Bd 25, S. 69; Miller W. H. The Classical S-matrix in Molecular Collisions. In: Molecular Beams. Ed. K. P. Lawley, Wiley.
48. Massmann H., Rasmussen J. O. «Nucl. Phys. A», 1975, v. 243, p. 155.
49. Stine J. R., Marcus R. A. «J. Chem. Phys.», 1973, v. 59, p. 5145.
50. Truhlar P. G., Kupperman A. «J. Chem. Phys.», 1972, v. 56, p. 2232.
51. Hornstein S. M., Miller W. H. Preprint LBL-2595.
52. Duff J. W., Truhlar D. G. «Chem. Phys. Lett.», 1973, v. 23, p. 327.
53. Kumar K., Baranger M. «Nucl. Phys. A», 1967, v. 92, p. 608.
54. Shaffer W. H. «Rev. Mod. Phys.», 1944, v. 16, p. 245.
55. Jahnke-Emde-Losch. Tables of Higher Functions. McGraw-Hill, N.Y., 1960.