

Туннельные явления в нанофизике

1. Одноэлектронные задачи. Основные методы расчета.

Содержание

1	Одноэлектронные задачи туннелирования в одномерных и плоскостойких системах	3
1.1	Задача рассеяния в стационарной квантовой механике	3
1.2	Метод матрицы распространения. Точные решения	3
1.2.1	Формализм матрицы распространения	3
1.2.2	Коэффициенты отражения и прохождения. Отражение частицы от скачка потенциала	4
1.2.3	Расчет коэффициентов отражения и прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер	5
1.2.4	Стационарные уровни энергии в прямоугольной потенциальной яме конечной высоты	8
1.2.5	Резонансное туннелирование через двухбарьерную структуру	9
1.2.6	Волновые функции и спектр состояний частицы в связанных потенциальных ямах. Представление о времени туннелирования	13
1.2.7	Туннельный эффект в периодических структурах. Зонный спектр	16
1.3	Квазиклассическое описание туннелирования	18
1.3.1	Приближение Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна. Область применимости	18
1.3.2	Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Лангера	19
1.3.3	Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Свана	21
1.3.4	Прохождение частицы через потенциальный барьер	25
1.3.5	Спектр состояний частицы, локализованной в потенциальной яме. Формула квантования Бора-Зоммерфельда	26
1.3.6	Расчет спектров состояний для частицы, локализованной в связанных потенциальных ямах	27
1.4	Метод туннельного гамильтониана	29
1.4.1	Вывод туннельного гамильтониана для одномерного потенциального барьера	29
1.4.2	Туннельный ток через одиночный барьер в приближении туннельного гамильтониана	31
2	Квазистационарные состояния в квантовой механике	33
2.1	Квазистационарные состояния в двухбарьерном потенциале	33
2.2	Квазистационарные состояния в центрально-симметричном потенциале	34
2.2.1	Стационарные состояния в прямоугольной сферической яме	34
2.2.2	Распад квазистационарных состояний в центрально-симметричном потенциале	35
2.2.3	Альфа-распад. Формула Гамова	37

1. Одноэлектронные задачи тунnelирования в одномерных и плоскостойких системах

В данном разделе будут рассмотрены общие вопросы распространения электронных волн в среде, свойства которой меняются только вдоль определенного направления. Подход основан на использовании одноэлектронного стационарного уравнения Шрёдингера $\hat{H}\psi = E\psi$ для описания процессов упругого рассеяния/тунnelирования невзаимодействующих бесспиновых частиц при условии сохранения их полной энергии E .

1.1. Задача рассеяния в стационарной квантовой механике

1.2. Метод матрицы распространения. Точные решения

1.2.1. Формализм матрицы распространения

Рассмотрим динамику квантово-механической частицы в неоднородной системе, описываемой заданным неоднородным распределением электрического потенциала $\varphi(x)$. Поскольку в данном приближении полная энергия частицы E сохраняется, решение нестационарного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

может быть найдено в следующем виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{iEt/\hbar},$$

где $\hat{H} = (\hbar^2/2m) \Delta + U(x)$ – гамильтониан системы, $U(x) = e\varphi(x)$ – потенциальная энергия частицы.

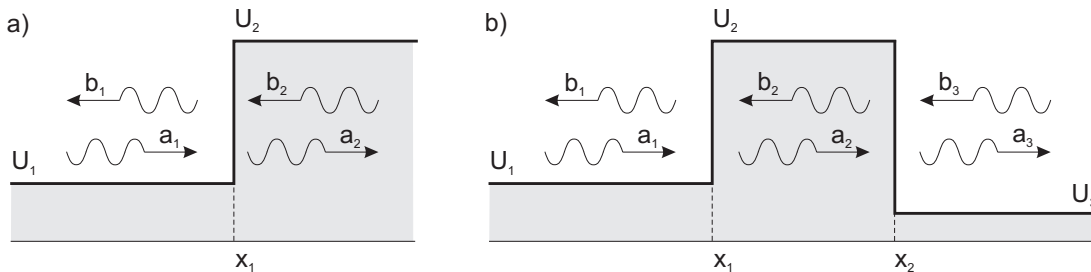


Рис. 1. Постановка задачи о рассеянии частицы на одномерном потенциале: (а) – скачок потенциала, (б) – потенциальный барьер.

Рассмотрим простейший случай нормального падения частицы на одномерный кусочно-постоянный потенциальный барьер (рис. 1)

$$U_s(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x > x_1. \end{cases}$$

Одноэлектронная волновая функция $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x)$ должна удовлетворять одномерному стационарному уравнению Шрёдингера следующего вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (1.1)$$

В каждой из областей 1 и 2, в которых потенциал $U(x)$ не зависит от координаты, уравнение (1.1) принимает вид дифференциального уравнения второго порядка с коэффициентами, независимыми от координаты

$$\text{Область 1 } (x < x_1) : \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar} (E - U_1), \quad (1.2)$$

$$\text{Область 2 } (x > x_1) : \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar} (E - U_2). \quad (1.3)$$

где $k_{1,2}$ – волновые вектора в областях 1 и 2.

Хорошо известно, что общим решением одномерного дифференциального уравнения $\psi'' + k^2\psi = 0$ является линейная комбинация решений вида $a e^{ikx}$ и $b e^{-ikx}$. Предполагая, что общие решения уравнений (1.2) и (1.3) в областях 1 и 2 могут быть представлены в следующем виде

$$\begin{aligned} \text{Область 1 } (x < x_1) : \quad & \psi_1(x) = a_1 e^{ik_1x} + b_1 e^{-ik_1x}, \\ \text{Область 2 } (x > x_1) : \quad & \psi_2(x) = a_2 e^{ik_2x} + b_2 e^{-ik_2x}, \end{aligned}$$

из граничных условий непрерывности волновой функции и ее первой производной

$$\psi_1(x_1) = \psi_2(x_1), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x_1} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x_1},$$

получаем линейную связь между амплитудами волн в областях 1 и 2:

$$a_1 e^{ik_1x_1} + b_1 e^{-ik_1x_1} = a_2 e^{ik_2x_1} + b_2 e^{-ik_2x_1}, \quad (1.4)$$

$$ik_1 a_1 e^{ik_1x_1} - ik_1 b_1 e^{-ik_1x_1} = ik_2 a_2 e^{ik_2x_1} - ik_2 b_2 e^{-ik_2x_1}. \quad (1.5)$$

Запишем решение уравнений (1.4) и (1.5), выражая a_1 и b_1 через a_2 и b_2

$$a_1 = \frac{(k_1 + k_2)}{2k_1} e^{i(-k_1+k_2)x_1} a_2 + \frac{(k_1 - k_2)}{2k_1} e^{i(-k_1-k_2)x_1} b_2, \quad (1.6)$$

$$b_1 = \frac{(k_1 - k_2)}{2k_1} e^{i(+k_1+k_2)x_1} a_2 + \frac{(k_1 + k_2)}{2k_1} e^{i(+k_1-k_2)x_1} b_2, \quad (1.7)$$

Соотношения (1.6) и (1.7) удобно представить в матричном виде

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_2) e^{i(-k_1+k_2)x_1} & (k_1 - k_2) e^{i(-k_1-k_2)x_1} \\ (k_1 - k_2) e^{i(k_1+k_2)x_1} & (k_1 + k_2) e^{i(k_1-k_2)x_1} \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

где матрица перехода \hat{T} размера 2×2 обычно называется матрицей распространения (transfer-matrix), коэффициенты которой зависят от энергии налетающей частицы[†]. Как будет показано ниже, аппарат матрицы распространения позволяет существенно упростить решение задач в случае нескольких потенциальных барьеров.

1.2.2. Коэффициенты отражения и прохождения. Отражение частицы от скачка потенциала

Рассмотрим процесс рассеяния частицы, движущейся из точки $x = -\infty$, на потенциальном барьере $U_s(x)$:

$$U_s(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x > x_1 \end{cases}$$

Для описания процесса рассеяния на потенциальном барьере по принципу причинности следует положить $b_2 = 0$, что соответствует отсутствию источников на бесконечности. Амплитуду падающей волны a_1 будем считать заданной. Связь между амплитудами волн дается уравнением (1.8), которое принимает следующий вид

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

[†] Очевидно, что для однородной среды ($U_1 = U_2$), матрица распространения имеет вид единичной матрицы:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Введем коэффициенты отражения r (reflection) и прохождения t (transmission) как отношение потоков вероятности в отраженной и прошедшей волнах к потоку вероятности частицы в падающей волне. Найдём теперь связь параметров матрицы \hat{T} с коэффициентами прохождения и отражения. Легко видеть, что элементы T_{11} и T_{21} матрицы распространения определяют амплитуды отраженной и прошедшей волн

$$a_2 = \frac{1}{T_{11}} a_1, \quad b_1 = T_{21} a_2 = \frac{T_{21}}{T_{11}} a_1. \quad (1.9)$$

Тогда по определению

$$r = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2, \quad t = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{1}{T_{11}} \right|^2 = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{a_2}{a_1} \right|^2 = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{1}{T_{11}} \right|^2. \quad (1.10)$$

Заметим, что коэффициент прохождения имеет смысл только для действительных k_1 и k_2 , т.е. в классически разрешенных областях.

Вычислим коэффициенты отражения и прохождения для структуры, изображенной на рис. 1(а). Для простоты положим $x_1 = 0$, тогда $T_{11} = (k_1 + k_2)/2k_1$, $T_{21} = (k_1 - k_2)/2k_1$ и

$$r = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \quad (1.11)$$

$$t = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (1.12)$$

Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ и коэффициент прохождения t в зависимости от энергии E представлены на рис. 3. Следует отметить, что коэффициент прохождения отличен от нуля лишь при $E > U_2$ и при $E \rightarrow U_2^+$ имеет следующую асимптотику $t(E) \simeq 4\sqrt{(E - U_2)/(U_2 - U_1)}$. Обратим внимание, что даже при надбарьерном прохождении коэффициент прохождения всегда меньше единицы и лишь асимптотически† при $E \rightarrow \infty$ выходит на предельное значение: $t(E) \sim 1 - (U_2 - U_1)^2/16E^2$.

1.2.3. Расчет коэффициентов отражения и прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер

Рассмотрим задачу о прохождении частицы через потенциальный барьер (рис. 1) следующего вида

$$U_b(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x_1 < x < x_2 \\ U_3 & \text{при } x > x_2 \end{cases}$$

Вводя матрицы распространения $\hat{T}^{(1)}$ и $\hat{T}^{(2)}$, которые соответствуют согласованию граничных условий при $x = x_1$ и $x = x_2$ и имеют такую же структуру, что и выражение (1.8), получаем связь решений в 1 и 3 областях:

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T}^{(1)} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \hat{T}^{(1)} \hat{T}^{(2)} \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix}.$$

Мы показали, что коэффициент прохождения определяется коэффициентом T_{11} результирующей матрицы распространения, который в данном случае равен

$$T_{11} = T_{11}^{(1)} T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)} T_{21}^{(2)} = \frac{1}{2k_1} \frac{1}{2k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1 + k_2)x_1} e^{i(-k_2 + k_3)x_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1 - k_2)x_1} e^{i(k_2 + k_3)x_2} \right\}. \quad (1.13)$$

† Напомним, что

$$\sqrt{1 - \frac{U_i}{E}} \simeq 1 - \frac{1}{2} \frac{U_i}{E} + \frac{1}{8} \frac{U_i^2}{E^2}.$$

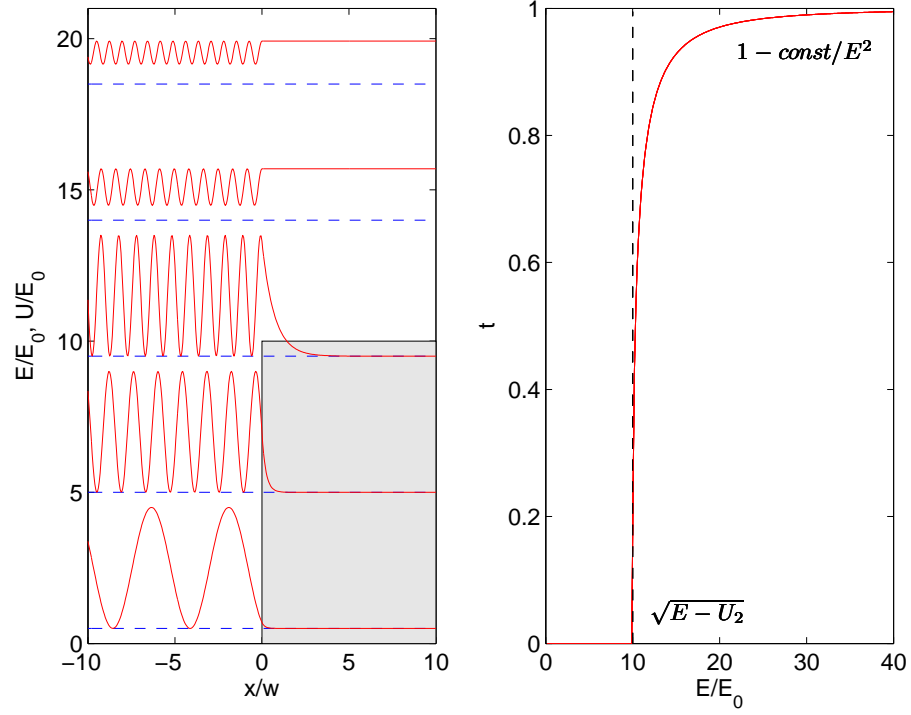


Рис. 2. Структура волновых функций $|\tilde{A}(x)|^2$ в зависимости от энергии E налетающей частицы (пунктирные линии). Коэффициент прохождения t как функция энергии E , $E_0 = \hbar^2/(2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2 = 10E_0$. Осцилляции плотности электрона при $x < 0$ связаны с интерференцией падающей и отраженной волн, которая тем эффективнее, чем больше амплитуда отраженной волны.

Коэффициент прохождения для любого соотношения между энергией частицы и высотой барьера можно записать в следующем виде

$$t = \frac{16 k_1 k_2^2 k_3}{\left| (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{-ik_2 w_2} - (k_2 - k_1)(k_2 - k_3) e^{+ik_2 w_2} \right|^2}, \quad (1.14)$$

где $w_2 = x_2 - x_1$ – ширина потенциального барьера.

Из анализа формулы (1.14) можно сделать следующие важные выводы:

- Коэффициент прохождения симметричен по индексам k_1 и k_3 , т.е. не имеет значения, с какой стороны налетают частицы на барьер – коэффициент прохождения будет одинаковым;
- Для случая надбарьерного прохождения (когда все волновые вектора действительны), можно перейти к более простой форме

$$t = \frac{16 k_1 k_2^2 k_3}{4k_2^2(k_1 + k_3)^2 + 4(k_2^2 - k_1^2)(k_2^2 - k_3^2) \sin^2 k_2 w_2}. \quad (1.15)$$

Для симметричного барьера ($k_1 = k_3$) после дальнейшего упрощения получаем

$$t = \left\{ 1 + \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2}{4k_1^2 k_2^2} \sin^2 k_2 w_2 \right\}^{-1} = \left\{ 1 + \frac{(U_2 - U_1)}{4(E - U_1)(E - U_2)} \sin^2 k_2 w_2 \right\}^{-1}. \quad (1.16)$$

Осцилляции коэффициента прохождения связаны с интерференцией волн, отраженных от потенциального барьера. Согласно (1.15) амплитуда осцилляций определяется разностью $(k_2^2 - k_1^2)$ и $(k_2^2 - k_3^2)$, поэтому по мере уменьшения разности $U_2 - U_3$ осцилляции становятся все менее выраженными и при $U_2 = U_3$ исчезают, при этом формула (1.15) переходит в соотношение (1.12).

- Для анализа подбарьерного прохождения ($E < U_2$) удобно перейти к другой форме выражения (1.14). Если волновой вектор $k_2 = \sqrt{2m(E - U_2)/\hbar^2}$ чисто мнимый ($k_2 = i\kappa_2$), введем фазовые множители $\varphi_1 = \arctg(\kappa_2/k_1)$ и $\varphi_3 = \arctg(\kappa_2/k_3)$. Тогда выражение (1.14) может быть переписано в более компактном виде[‡]

$$t = \frac{16k_1\kappa_2^2k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} \frac{1}{|e^{i\varphi_1+i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_1-i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}|^2}. \quad (1.17)$$

Пусть $e^{\kappa_2 w_2} \gg e^{-\kappa_2 w_2}$ (слабое пропускание), тогда

$$t = \frac{k_3}{k_1} \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{16k_1\kappa_2^2k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2 w_2}. \quad (1.18)$$

- Другим интересным способом получить коэффициент прохождения в случае подбарьерного прохождения из выражения (1.15) является формальный переход $k_2 \rightarrow i\kappa_2$ и $k_2^2 \rightarrow -\kappa_2^2$. В конечном счете для асимметричного барьера получаем

$$t = \frac{16k_1\kappa_2^2k_3}{4\kappa_2^2(k_1 + k_3)^2 + 4(\kappa_2^2 + k_1^2)(\kappa_2^2 + k_3^2) \sinh^2 \kappa_2 w_2}, \quad (1.19)$$

которое в пределе $\kappa_2 w_2 \gg 1$ и $\sinh \kappa_2 w_2 \rightarrow e^{\kappa_2 w_2}/2$ переходит в выражение (1.18): $t = 4k_1 k_2 / (k_1 + k_2)^2$.

- Энергетическая зависимость коэффициента прохождения в значительной мере определяется экспоненциальным множителем: $t(E) \propto \exp\left(-2w_2 \sqrt{2m(U_2 - E)/\hbar^2}\right)$.

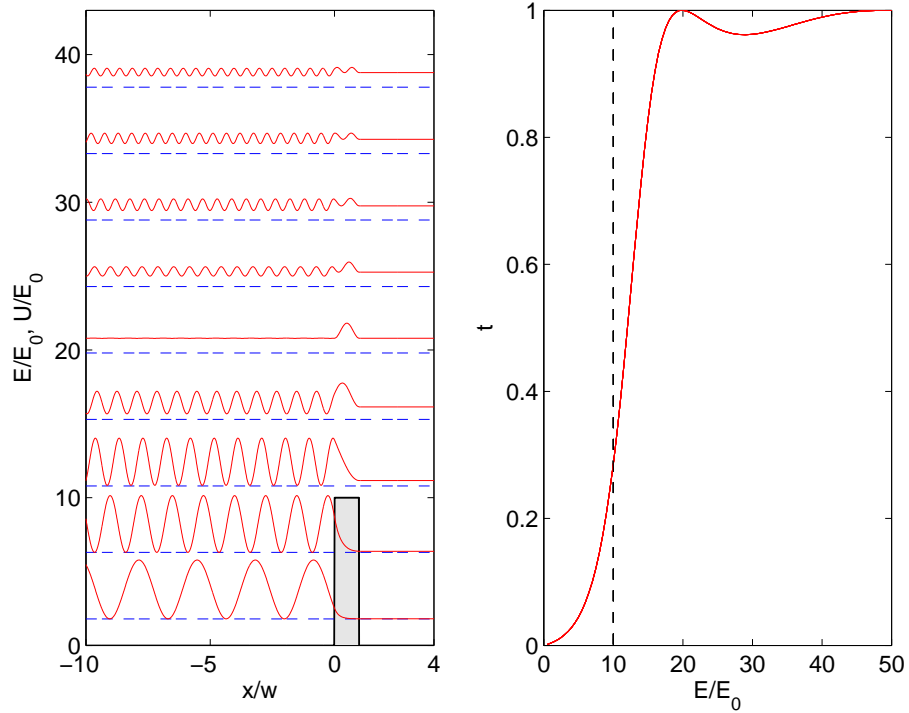


Рис. 3. Структура волновых функций $|\tilde{A}(x)|$ в зависимости от энергии E налетающей частицы (пунктирные линии). Амплитуда налетающей волны a_1 принята равной единице. Коэффициент прохождения t как функция энергии E , $E_0 = \hbar^2 = (2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2 = 10E_0$. Осцилляции плотности электрона при $x < 0$ связаны с интерференцией падающей и отраженной волн.

[‡] Напоминаем, что $k_1 \pm i\kappa_2 = \sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2} e^{\pm i\varphi_1}$, где $\varphi_1 = \arctg(\kappa_2/k_1)$.

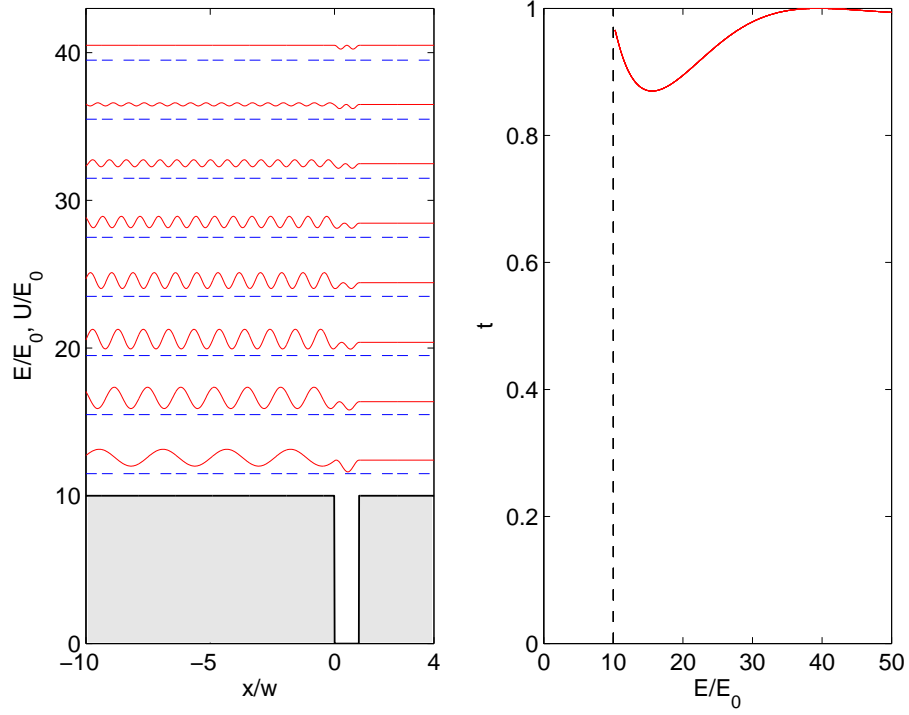


Рис. 4. Структура волновых функций $|\tilde{A}(x)|$ в зависимости от энергии E налетающей частицы (пунктирные линии) при надбарьерном прохождении частицы над потенциальной ямой.

1.2.4. Стационарные уровни энергии в прямоугольной потенциальной яме конечной высоты

Применим аппарат матрицы распространения к задаче о спектре энергии частицы, локализованной в потенциальной яме. Введем матрицы распространения $\hat{T}^{(1)}$ и $\hat{T}^{(2)}$, соответствующие согласованию граничных условий при $x = x_1$ и $x = x_2$. Локализованному состоянию частицы в яме соответствует такое распределение волновой функции, при котором отсутствуют решения, нарастающие на бесконечности, поэтому для исключения решений вида $a_1 e^{-\kappa x}$ и $b_2 e^{\kappa x}$ следует положить $a_1 = b_2 = 0$. В конечном итоге получаем следующую цепочку равенств

$$\begin{pmatrix} 0 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} a_3 \\ T_{21} a_3 \end{pmatrix},$$

откуда с очевидностью следует критерий существования локализованных состояний $T_{11} = 0$. Для структуры, изображенной на рис. 5, результирующая матрица распространения \hat{T} является произведением двум матриц $\hat{T}^{(1)}\hat{T}^{(2)}$. Вычислим элемент T_{11} и найдем условия, при которых он обращается в нуль

$$T_{11} = T_{11}^{(1)}T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{21}^{(2)} = \frac{1}{2k_1} \frac{1}{2k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2+k_3)x_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(k_2+k_3)x_2} \right\}. \quad (1.20)$$

Для удобства введем ширину барьера $w_2 = x_2 - x_1$, волновые вектора $k_1 = \sqrt{2m(E - U_1)/\hbar^2}$, $k_3 = \sqrt{2m(E - U_3)/\hbar^2}$ и фазовые множители $\varphi_1 = \arctg(k_2/\kappa_1)$ и $\varphi_3 = \arctg(k_2/\kappa_3)$. Условие $T_{11} = 0$ приводит к следующему уравнению

$$e^{i\varphi_1+i\varphi_3} e^{-ik_2(x_2-x_1)} - e^{-i\varphi_1-i\varphi_3} e^{ik_2(x_2-x_1)} = 0, \quad \text{или} \quad \sin(\varphi_1 + \varphi_3 - k_2 w_2) = 0.$$

и следующему спектру локализованных состояний в потенциальной яме конечной высоты

$$k_2 w_2 = \varphi_1 + \varphi_3 + \pi n = \arctg(k_2/\kappa_1) + \arctg(k_2/\kappa_3) + \pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.21)$$

Легко видеть, что в предельном случае ямы с бесконечно высокими стенками ($U_{1,3} \rightarrow \infty$ и $\varphi_{1,3} \rightarrow 0$), выражение (1.21) сводится к классическому выражению для энергетического спектра $k_2 w_2 = \pi n$ или $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2m w^2) + U_2$. Заметим, что условие $k_2 w_2 = \pi n$ соответствует квантованию числа полувольт на ширине ямы. Типичные распределения плотности электронов для потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты показаны на рис. 5. Осцилляции коэффициента прохождения при $E > U_2$ соответствуют интерференции волн, отраженных от передней и задней стенок барьера, что для барьера с фиксированной шириной приводит к усилению или ослаблению прохождения для некоторых резонансных значений энергии.

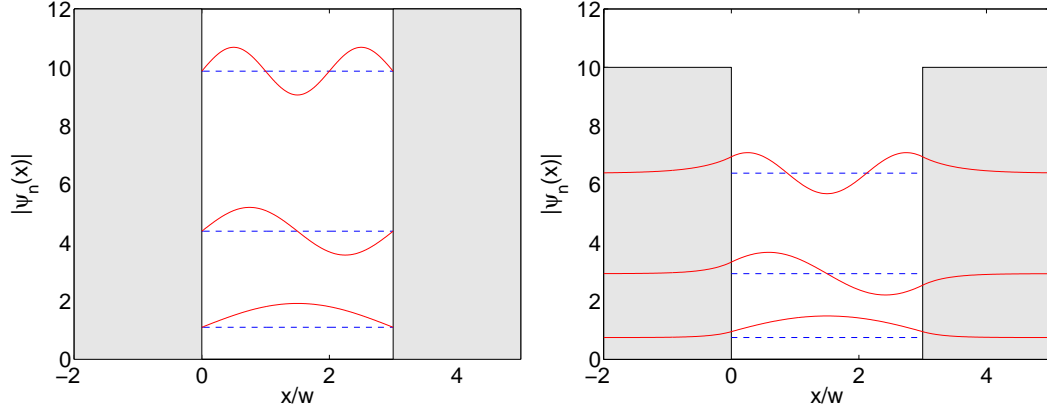


Рис. 5. Структура волновых функций $|\tilde{A}(x)|$ потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками (слева) и с яме со стенками конечной высоты. $E_0 = \hbar^2/(2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2 = 10E_0$.

1.2.5. Резонансное туннелирование через двухбарьерную структуру

Рассмотрим задачу о туннелировании частицы через двухбарьерную структуру (рис. 7). Вводя матрицу распространения $\hat{T} = \hat{T}^{(1)}\hat{T}^{(2)}\hat{T}^{(3)}\hat{T}^{(4)}$, запишем связь между амплитудами падающей a_1 и прошедшей a_5 волн: $a_1 = T_{11}a_5$

$$T_{11} = A \times B + C \times D,$$

$$A = \left\{ T_{11}^{(1)}T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{21}^{(2)} \right\} = \frac{(k_1 + k_2)(k_2 + k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2+k_3)x_2} + \frac{(k_1 - k_2)(k_2 - k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(+k_2+k_3)x_2}, \quad (1.22)$$

$$B = \left\{ T_{11}^{(3)}T_{11}^{(4)} + T_{12}^{(3)}T_{21}^{(4)} \right\} = \frac{(k_3 + k_4)(k_4 + k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(-k_3+k_4)x_3} e^{i(-k_4+k_5)x_4} + \frac{(k_3 - k_4)(k_4 - k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(-k_3-k_4)x_3} e^{i(k_4+k_5)x_4}, \quad (1.23)$$

$$C = \left\{ T_{11}^{(1)}T_{12}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{22}^{(2)} \right\} = \frac{(k_1 + k_2)(k_2 - k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2-k_3)x_2} + \frac{(k_1 - k_2)(k_2 + k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1-k_2)x_2} e^{i(k_2-k_3)x_2}, \quad (1.24)$$

$$D = \left\{ T_{21}^{(3)}T_{11}^{(4)} + T_{22}^{(3)}T_{21}^{(4)} \right\} = \frac{(k_3 - k_4)(k_4 + k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(k_3+k_4)x_3} e^{i(-k_4+k_5)x_4} + \frac{(k_3 + k_4)(k_4 - k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(k_3-k_4)x_3} e^{i(k_4+k_5)x_4}. \quad (1.25)$$

Пусть высота барьеров превышает энергию частицы, $E < U_2, U_4$. Тогда волновые вектора в областях 2 и 4 становятся мнимыми: $k_{2,4} = i\kappa_{2,4}$, $\kappa_{2,4} = \sqrt{2m(U_{2,4} - E)/\hbar^2}$. Для удобства введем ширины областей

$w_2 = x_2 - x_1$, $w_3 = x_3 - x_2$, $w_4 = x_4 - x_3$ и следующие фазовые множители $\varphi_2 = \arctg(\kappa_2/k_1)$, $\varphi_3 = \arctg(\kappa_2/k_3)$, $\varphi_4 = \arctg(\kappa_4/k_3)$ и $\varphi_5 = \arctg(\kappa_4/k_5)$.

$$A = \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2} \sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{ik_3x_2 - ik_1x_1} \times \{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\}. \quad (1.26)$$

$$B = \frac{\sqrt{k_3^2 + \kappa_4^2} \sqrt{\kappa_4^2 + k_5^2}}{4ik_3\kappa_4} e^{ik_5x_4 - ik_3x_3} \times \{e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\}. \quad (1.27)$$

$$C = \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2} \sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{-ik_3x_2 - ik_1x_1} \times \{-e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} + e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\}. \quad (1.28)$$

$$D = \frac{\sqrt{k_3^2 + \kappa_4^2} \sqrt{\kappa_4^2 + k_5^2}}{4ik_3\kappa_4} e^{ik_5x_4 + ik_3x_3} \times \{e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{+i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\}. \quad (1.29)$$

Попарно перемножим выражения (1.26)–(1.29) и получим следующее выражение для коэффициента прохождения

$$|T_{11}|^2 = |A \times B + C \times D|^2 = \frac{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)(k_3^2 + \kappa_4^2)(\kappa_4^2 + k_5^2)}{256 k_1^2 \kappa_2^2 k_3^2 \kappa_4^2} |K|^2, \quad \text{где} \quad (1.30)$$

$$K = e^{-ik_3w_3} \{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\} \{e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\} + \\ + e^{+ik_3w_3} \{-e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} + e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\} \{e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{+i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\} \quad (1.31)$$

Введем фазу $\varphi_1 = k_3 w_3$, соответствующую набегу фазы в области между потенциальными барьерами, и преобразуем выражение для K следующим образом

$$K = 2i e^{\kappa_2 w_2 + \kappa_4 w_4} e^{+i\varphi_2 + i\varphi_5} \sin(-\varphi_1 + \varphi_3 + \varphi_4) + \\ + 2i e^{\kappa_2 w_2 - \kappa_4 w_4} e^{+i\varphi_2 - i\varphi_5} \sin(+\varphi_1 - \varphi_3 + \varphi_4) + \\ + 2i e^{-\kappa_2 w_2 + \kappa_4 w_4} e^{-i\varphi_2 + i\varphi_5} \sin(+\varphi_1 + \varphi_3 - \varphi_4) + \\ + 2i e^{-\kappa_2 w_2 - \kappa_4 w_4} e^{-i\varphi_2 - i\varphi_5} \sin(-\varphi_1 - \varphi_3 - \varphi_4).$$

В конечном итоге получаем коэффициент прохождения двухбарьерной структуры в общем случае

$$t = \frac{k_5}{k_1} \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{256 k_1 \kappa_2^2 k_3^2 \kappa_4^2 k_5}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)(k_3^2 + \kappa_4^2)(\kappa_4^2 + k_5^2)} \frac{1}{|K|^2}, \quad (1.32)$$

Легко видеть, что прозрачность двухбарьерной структуры в значительной мере определяется множителем $|K|^2$, который стоит в знаменателе выражения (1.32). Доминирующим слагаемым является множитель, пропорциональный $e^{\kappa_2 w_2 + \kappa_4 w_4}$, в результате чего результирующий коэффициент пропускания равен произведению ослабляющих факторов отдельных барьеров: $t \propto |K|^{-2} \sim e^{-2\kappa_2 w_2} e^{-2\kappa_4 w_4}$. Однако следует заметить, что при определенных условиях предэкспоненциальный фактор может обратиться в нуль. Условие $\sin(\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1) = 0$ определяет спектр энергий, для которых пропускание уже не будет экспоненциально малым. Это условие

$$\varphi_{1,n} = k_{3,n} w_3 = \varphi_3 + \varphi_4 + \pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.33)$$

описывает квазистационарные состояния частицы с энергией[†]

$$E_n = U_3 + \frac{\hbar^2}{2m} k_{3,n}^2 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.34)$$

Вблизи резонансных уровней ($E \approx E_n$) пропускание определяется следующими слагаемыми в выражении (1.32) и пропорциональными отношению прозрачностей отдельных барьеров: $t \propto e^{2\kappa_4 w_4} / e^{2\kappa_2 w_2}$ (если

[†] Сравните выражения (1.33)–(1.34) с формулой (1.21) для спектра локализованных состояний в потенциальной яме конечной высоты.

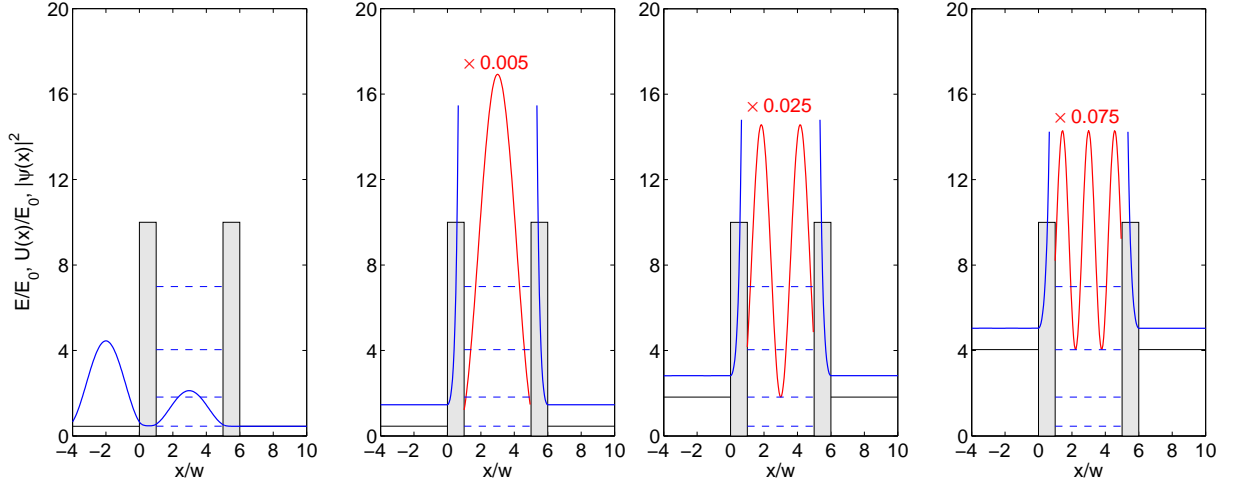


Рис. 6. Структура волновых функций $|\tilde{A}(x)|$ в системе с двумя идентичными прямоугольными барьерами для нескольких значений энергии E :

- (a) вблизи первого резонансного уровня, $E \simeq E_0$, осцилляции слева от барьера свидетельствуют о сильном отражении и формировании стоячей волны;
- (b) энергия частицы точно равна энергии первого резонансного уровня, $E = E_0$, амплитуда прошедшей волны равна амплитуде падающей волны;
- (c) и (d) энергия частицы точно равна энергии второго и третьего резонансных уровней, $E = E_1$ и $E = E_2$, соответственно.

Высота барьеров принята равной $10\hbar^2 = (2mw^2)$, w – масштаб длины, равный ширине барьеров, уровни квазистационарных состояний соответствуют пунктирным линиям в промежутке между барьерами, энергия частицы показана сплошной горизонтальной линией, амплитуда налетающей волны a_1 принята равной единице. Для того, чтобы иметь возможность показать резонансное увеличение амплитуды волновой функции в области между барьерами, на рис. (b), (c) и (d) $|\tilde{A}(x)|$ в области 3 умножена на 0.005, 0.025 и 0.075, соответственно.

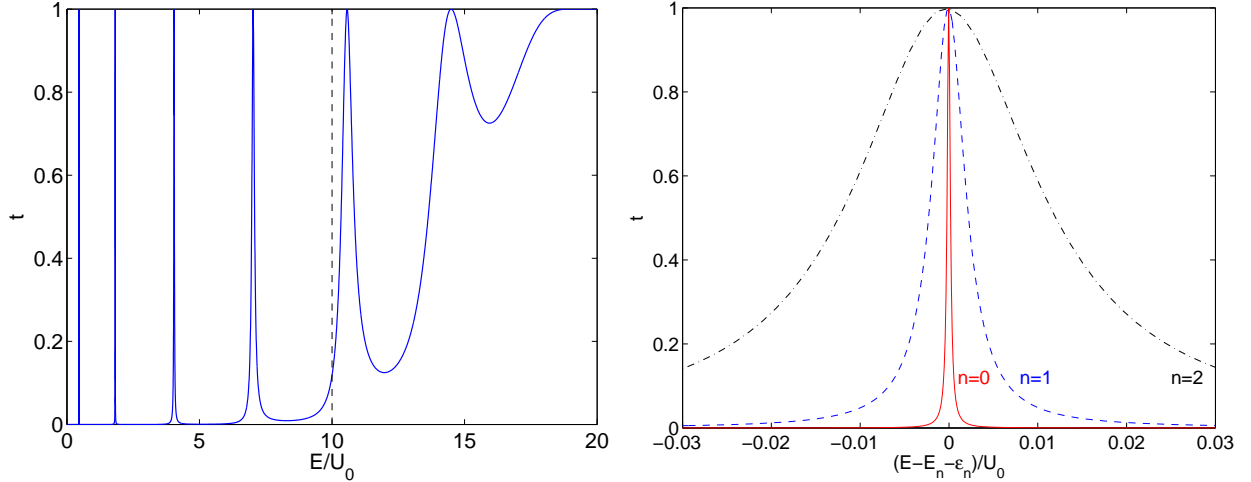


Рис. 7. (a) Коэффициент прохождения $t(E)$ через двухбарьерную структуру с идентичными барьерами ($w_2 = w_4 = w$, $U_2 = U_4 = 10U_0$);

- (b) Лоренцевская форма линии прохождения для трех низших квазистационарных уровней, E_n – квазистационарные уровни энергии. Для представления результатов в качестве масштабов длины и энергии выбраны w и $U_0 = \hbar^2 = (2mw^2)$.

$\kappa_2 w_2 \gg \kappa_4 w_4$) или $t \propto e^{2\kappa_2 w_2} / e^{2\kappa_4 w_4}$ (если $\kappa_2 w_2 \ll \kappa_4 w_4$). Если пропускание обоих барьеров одинаково ($\kappa_2 w_2 = \kappa_4 w_4$), то вблизи резонанса коэффициент прохождения $t \simeq 1$ даже для барьеров с малой

прозрачностью. Это явление получило название резонансного туннелирования. Типичная зависимость коэффициента пропускания от энергии представлена на рис. 7.

Физическая причина резонансного пропускания связана с интерференцией волн, отраженных от первого и второго барьеров, что при определенных энергиях падающей волны может привести к полному подавлению отражения. Подобный эффект имеет место и для обычных резонаторов Фабри-Перо с плоскопараллельными полупрозрачными зеркалами. Как следствие малой прозрачности барьеров, амплитуды стоящей волны в центральной части структуры может значительно превышать амплитуду падающей волны (рис. 6).

Более детально обсудим вид кривой пропускания $t(E)$ вблизи резонансных значений энергии E_n для симметричной двухбарьерной структуры ($w_2 = w_4 = w$, $\kappa_2 = \kappa_4 = \kappa$, $k_1 = k_5 = k$, $\varphi_2 = \varphi_5$, $\varphi_3 = \varphi_4$). Введем отстройку $\varepsilon = E - E_n$ от резонансного уровня, соответствующего условию $\sin(\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1) = 0$. Полагая, что $\sin(\varphi_3 + \varphi_4 - \varphi_1) = \beta\varepsilon$, выражения для K может быть переписано следующим образом

$$K = 2i e^{2\kappa_2 w_2} e^{+2i\varphi_2} \beta\varepsilon + 4i \sin \varphi_1 + 2i e^{-2\kappa_2 w_2} e^{-2i\varphi_2} \sin(-\varphi_1 - \varphi_3 - \varphi_4).$$

Последнее слагаемое важно лишь при рассмотрении надбарьерного прохождения, поэтому мы им пренебрегаем для анализа прохождения низкоэнергетических электронов ($e^{-\kappa_2 w_2} \ll 1$). Для сокращения записи введем величины[‡]

$$a = e^{2\kappa w} \cos 2\varphi_2, \quad b = e^{2\kappa w} \sin 2\varphi_2, \quad c = 2 \sin \varphi_1. \quad (1.35)$$

и запишем K и $|K|^2$ может записано в следующем виде

$$K = 2i \left\{ (a + ib) \beta\varepsilon + c \right\}, \quad |K|^2 = 4(a\beta\varepsilon + c)^2 + 4b^2\beta^2\varepsilon^2. \quad (1.36)$$

Выделяя полный квадрат, переходим к виду

$$|K|^2 = 4 e^{4\kappa w} \left\{ \beta \left(\varepsilon + \frac{1}{\beta} \frac{ac}{(a^2 + b^2)} \right)^2 + \frac{c^2}{(a^2 + b^2)} \frac{b^2}{(a^2 + b^2)} \right\}.$$

Вводя ширину линии пропускания Γ и положение оптимальной энергии ε_0

$$\Gamma = \frac{bc}{(a^2 + b^2)}, \quad \varepsilon_0 = -\frac{1}{\beta} \frac{ac}{(a^2 + b^2)} = -\frac{a}{b} \times \frac{\Gamma}{\beta},$$

приводим выражение для линии пропускания в симметричной структуре вблизи резонанса к следующему виду

$$|K|^2 = 4 e^{4\kappa w} \left\{ \beta^2 (\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \right\}, \quad (1.37)$$

$$t = \frac{256 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{1}{4} \frac{e^{-4\kappa w}}{\left\{ \beta^2 (\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \right\}} \quad (1.38)$$

Выразим ширину линии резонанса через параметры системы в приближении слабой прозрачности барьеров ($e^{-2\kappa w} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{bc}{(a^2 + b^2)} = e^{-4\kappa w} \times e^{2\kappa w} \sin 2\varphi_2 \times 2 \sin \varphi_1 = 8 e^{-2\kappa w} \frac{k \kappa^2 k_3}{(k^2 + \kappa^2)(\kappa^2 + k_3^2)} = \\ &= 8 \frac{\sqrt{(E - U_1)(E - U_3)(U_2 - E)}}{(U_2 - U_1)(U_2 - U_3)} e^{-2\kappa w}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Отметим, что параметр Γ (ширина линии резонансного прохождения) равен половине прозрачности одиночного барьера [сравнить (2.17) и (1.39)].

[‡] Мы пользуемся следующими проверяемыми соотношениями $\cos 2' 2 = 2 \cos^2 ' 2 - 1 = 2[1 + \text{tg}^2 \arctg(\cdot 2 = k_1)]^{-1} - 1 = (k_1^2 - \cdot 2) / (k_1^2 + \cdot 2)$, $\sin 2' 2 = 2k_1 \cdot 2 / (k_1^2 + \cdot 2)$; $\sin ' 1 \simeq \sin 2' 3 = 2k_3 \cdot 2 / (k_3^2 + \cdot 2)$ (справедливо только вблизи резонанса), $a^2 + b^2 = e^{4\kappa w}$, $b = (a^2 + b^2) = e^{-2\kappa w} \sin 2' 2$.

Покажем, что при условии точного резонанса $E = E_n + \varepsilon_0$ коэффициент прохождения точно равен единице. Действительно, при условии

$$\begin{aligned} t &= \frac{64 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{e^{-4\kappa w}}{\Gamma^2} \\ &= \frac{64 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{e^{-4\kappa w}}{64 e^{-4\kappa w}} \times \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2}{k^2 \kappa^4 k_3^2} = 1. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Учитывая те обстоятельства, что форма линии пропускания должна иметь лоренцев вид и максимальное значение функции должно быть равно единице, сразу записываем приближенное выражение для коэффициента пропускания вблизи резонанса $E \simeq E_n + \varepsilon_0$

$$t = \frac{\Gamma^2}{\beta^2 (E - E_n - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2}.$$

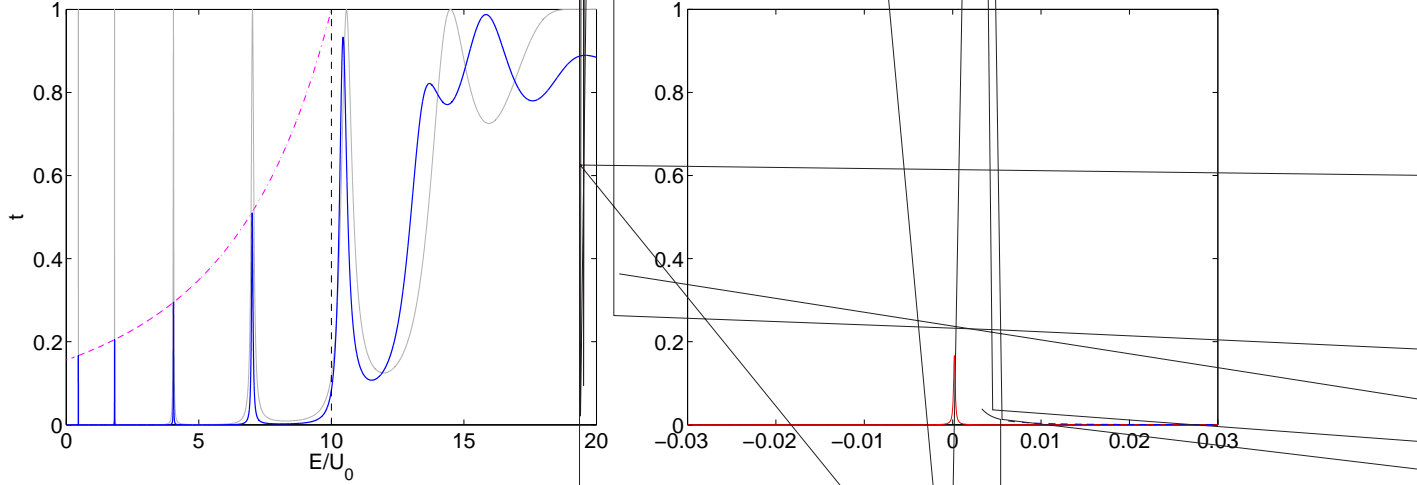


Рис. 8. (а) Коэффициент прохождения $t(E)$ через двухбарьерную структуру с двумя барьерами одинаковой высоты и разной ширины ($w_2 = w$, $w_4 = 1.5w$, $U_2 = U_4 = 10U_0$); (б) Лоренцевская форма линии прохождения для трех нижних квазистационарных уровней, E_n – квазистационарные уровни энергии. Для представления результатов в качестве масштабов длины и энергии выбраны w и $U_0 = \hbar^2 = (2mw^2)$.

В заключение обсудим вопрос о прохождении частицы через несимметричную двухбарьерную структуру. Проще всего проанализировать случай барьеров одинаковой высоты и различной ширины – тогда все фазовые соотношения останутся без изменений. Все различие с предыдущими результатами будет содержаться в множителе

$$c = 2 \sin \varphi_1 \left\{ e^{\kappa(w_4 - w_2)} + e^{-\kappa(w_4 - w_2)} \right\} = \sin \varphi_1 \cosh \kappa(w_4 - w_2).$$

Поскольку c определяет ширину линии пропускания Γ , которая влияет на высоту максимума как Γ^{-2} , то как следствие, в спектре пропускания возникает дополнительный ослабляющий фактор, пропорциональный $\cosh^{-2} \kappa(w_4 - w_2)$. Спектр пропускания и форма линий вблизи резонансных значений представлены на рис. 8. Легко видеть, что наиболее сильное подавление резонансного туннелирования имеет место быть для наиболее глубоких уровней, для которых $e^{\kappa(w_4 - w_2)} \gg 1$. Таким образом, наличие квазистационарных состояний еще не является достаточным условием резонансного туннелирования, необходима высокая идентичность потенциальных барьеров.

1.2.6. Волновые функции и спектр состояний частицы в связанных потенциальных ямах. Представление о времени туннелирования

Используя формализм трансфер-матрицы, рассчитаем спектр энергий в туннельно-связанных потенциальных ямах (рис. 11). Как было показано ранее, стационарные состояния частицы, локализованной в одномерном потенциале, соответствуют условию $T_{11} = 0$. Будем считать высоту разделяющего барьера U_3 , а также потенциальные энергии U_1 и U_5 в областях 1 и 5 превышающими энергию частицы, поэтому соответствующие волновые вектора становятся мнимыми: $k_{1,3,5} = i\kappa_{1,3,5}$, $\kappa_{1,5} = \sqrt{2m(U_{1,5} - E)/\hbar^2}$, $\kappa_3 = \sqrt{2m(U_3 - E)/\hbar^2}$. Для удобства введем ширины областей $w_2 = x_2 - x_1$, $w_3 = x_3 - x_2$, $w_4 = x_4 - x_3$ и следующие фазовые множители $\varphi_2 = \arctg(\kappa_1/k_2)$, $\varphi_3 = \arctg(\kappa_3/k_2)$, $\varphi_4 = \arctg(\kappa_3/k_4)$ и $\varphi_5 = \arctg(\kappa_5/k_3)$.

Используя выражения (1.22) – (1.25) и сделанные допущения, получаем

$$A = \frac{\sqrt{\kappa_1^2 + k_2^2} \sqrt{k_2^2 + \kappa_3^2}}{4i\kappa_1 k_2} e^{-\kappa_3 x_2 + \kappa_1 x_1} \times \{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2}\}. \quad (1.41)$$

$$B = \frac{\sqrt{\kappa_3^2 + k_4^2} \sqrt{k_4^2 + \kappa_5^2}}{4i\kappa_3 k_4} e^{-\kappa_5 x_4 + \kappa_3 x_3} \times \{e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{-ik_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{ik_4 w_4}\}. \quad (1.42)$$

$$C = \frac{\sqrt{\kappa_1^2 + k_2^2} \sqrt{k_2^2 + \kappa_3^2}}{4i\kappa_1 k_2} e^{\kappa_3 x_2 + \kappa_1 x_1} \times \{e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} + e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{ik_2 w_2}\}. \quad (1.43)$$

$$D = \frac{\sqrt{\kappa_3^2 + k_4^2} \sqrt{k_4^2 + \kappa_5^2}}{4i\kappa_3 k_4} e^{-\kappa_5 x_4 - \kappa_3 x_3} \times \{-e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{-ik_4 w_4} + e^{+i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{ik_4 w_4}\}. \quad (1.44)$$

Попарно перемножая эти выражения, получаем условие существования локализованных состояний

$$e^{\kappa_3 w_3} \{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2}\} \{e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{-ik_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{+ik_4 w_4}\} + e^{-\kappa_3 w_3} \{e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2}\} \{-e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{-ik_4 w_4} + e^{i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{+ik_4 w_4}\} = 0.$$

Заметим, что другим простым способом получения уравнения (1.45) является замена $k_1 \rightarrow i\kappa_1$, $\kappa_2 \rightarrow -ik_2$, $k_3 \rightarrow i\kappa_3$, $\kappa_4 \rightarrow -ik_4$, $k_5 \rightarrow i\kappa_5$ в выражении (1.32), полученном при анализе прохождения частиц через двухбарьерную структуру (проверить).

Если ямы одинаковые ($k_2 = k_4$, $w_2 = w_4$), то данное выражение (1.45) может быть упрощено

$$\{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2}\}^2 = e^{-2\kappa_3 w_3} \{e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2}\}^2, \quad (1.45)$$

$$\sin(\varphi_2 + \varphi_3 - k_2 w_2) = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin(\varphi_2 - \varphi_3 - k_2 w_2).$$

Предположим, что потенциальные ямы разделены барьером с малой прозрачностью ($e^{-\kappa_3 w_3} \ll 1$), что позволяет применить теорию возмущения для решения уравнения (1.49). В нулевом порядке теории возмущений получаем очевидное уравнение $\sin(\varphi_2^{(0)} + \varphi_3^{(0)} - k_2^{(0)} w_2) = 0$, которое определяет спектр энергий в потенциальной яме конечной высоты: $k_2^{(0)} w_2 = \varphi_2^{(0)} + \varphi_3^{(0)} + \pi n$, $E_0 = \hbar^2 k_2^{(0)2} / 2m + U_2$.

Введем поправку δE к невозмущенному уровню энергии: $E = E_0 + \delta E$, при этом δE по порядку величины должна совпадать с $e^{-\kappa_3 w_3}$. Сдвиг энергии приводит к сдвигу волнового вектора: $k_2 = k_2^{(0)} + \delta k$, где $\delta k = m\delta E / (\hbar^2 k_2^{(0)})$. Будем считать, что сдвиг энергии не приводит к заметному изменению фазовых соотношений (проверить), поэтому $\varphi_2 \approx \varphi_2^{(0)}$ и $\varphi_3 \approx \varphi_3^{(0)}$. Как обычно, при решении уравнения методом возмущений, в левой части уравнения (1.49) у нас остаются слагаемые первого порядка малости, а в правой части – лишь в нулевом порядке малости

$$\text{Левая часть:} \quad \sin(\varphi_2^{(0)} + \varphi_3^{(0)} - k_2^{(0)} w_2 - \delta k_2 w_2) \approx -\sin(\delta k_2 w_2) \approx -\delta k_2 w_2, \quad (1.46)$$

$$\text{Правая часть:} \quad \sin(\varphi_2^{(0)} - \varphi_3^{(0)} - k_2^{(0)} w_2) = \sin 2\varphi_3^{(0)}, \quad (1.47)$$

$$\delta k_2 w_2 = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin 2\varphi_3^{(0)}, \quad (1.48)$$

$$\delta k_2 w_2 = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin 2\varphi_3^{(0)} \quad (1.49)$$

Таким образом, туннелирование и связанное с ним перекрытие волновых функций частицы, локализованной в правой и левой ямах, пропорциональное $e^{-\kappa_3 w_3}$, приводит к расщеплению энергии: $E_n = E_n^{(0)} \pm \delta E_n$, $\delta E_n = \hbar^2 k_2^{(0)} \delta k_2 / m$. Легко видеть, что расщепление уровней тем меньше, чем глубже расположен уровень.

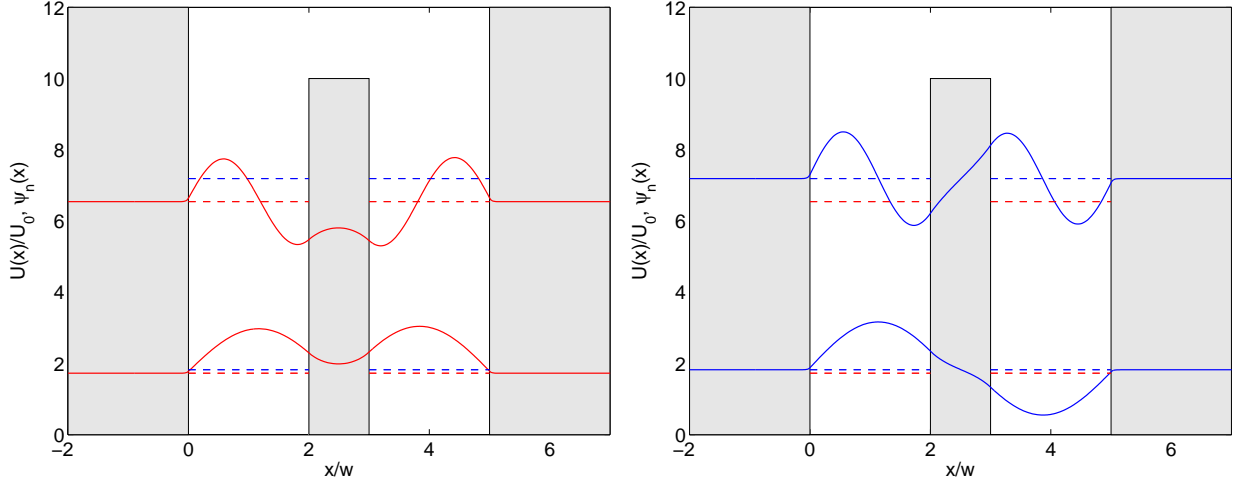


Рис. 9. Структура нормированных волновых функций $\tilde{A}_n(x)$ в системе с двумя идентичными прямоугольными ямами.

Волновые функции основного и высших возбужденных состояний представлены на рис. 11. Волновая функция ψ_0 основного состояния (с энергией $E = E_0 - \delta E_0$) оказывается симметричной и не имеющей нулей (согласно осцилляционной теореме), волновая функция ψ_1 возбужденного состояния (с энергией $E = E_0 + \delta E_0$) – антисимметричной. В предельном случае малого расщепления $e^{-\kappa_3 w_3} \ll 1$, волновые функции этих состояний можно скомбинировать из парциальных волновых функций ψ_{II} и ψ_{IV} , соответствующих локализации частицы в каждой из ям (при отсутствии туннельной связи). Тогда

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \psi_{II}(x) + \psi_{IV}(x), & \Psi_0(x, t) &= [\psi_{II}(x) + \psi_{IV}(x)] \times e^{-i(E_0 - \delta E_0)t/\hbar} \\ \psi_1(x) &= \psi_{II}(x) - \psi_{IV}(x), & \Psi_1(x, t) &= [\psi_{II}(x) - \psi_{IV}(x)] \times e^{-i(E_0 + \delta E_0)t/\hbar} \end{aligned}$$

Заметим, в этих стационарных состояниях частица одновременно находится в обеих ямах.

Обсудим вопрос о времени туннелирования частицы из одной ямы в другую. Для этого (чтобы избежать необходимости решать нестационарное уравнение Шредингера) сформируем линейную комбинацию из волновых функций стационарных состояний таким образом, чтобы при $t = 0$ частица находилась в яме 2:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{2} [\Psi_0(x, t) + \Psi_1(x, t)] = \\ &= \frac{1}{2} [\psi_{II}(x) + \psi_{IV}(x)] \times e^{-iE_0 t/\hbar} e^{+i\delta E_0 t/\hbar} + \frac{1}{2} [\psi_{II}(x) - \psi_{IV}(x)] \times e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-i\delta E_0 t/\hbar} = \\ &= e^{-iE_0 t/\hbar} \times \left\{ \psi_{II}(x) \cos\left(\frac{\delta E_0 t}{\hbar}\right) + i \psi_{IV}(x) \sin\left(\frac{\delta E_0 t}{\hbar}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

Если частица в момент $t = 0$ находилась в яме II, то через время $\pi\hbar/(2\delta E_0)$ частица будет находиться в яме IV. Частоту обмена энергией между ямами можно оценить как

$$\omega = \frac{\delta E_0}{\hbar} \propto e^{-\kappa_2 w_2}. \quad (1.51)$$

Исходя из этого, что скорость туннелирования экспоненциально сильно зависит от прозрачности барьера: чем ниже располагается уровень локализованного состояния в потенциальной яме, тем меньше частота обмена между ямами.

1.2.7. Туннельный эффект в периодических структурах. Зонный спектр

Применим аппарат трансфер-матрицы для изучения особенностей распространения волн через периодические структуры: $U(x+L) = U(x)$. В качестве модельной задачи рассмотрим периодический прямоугольный потенциал, представленный на рис. 11.

Рис. 10. Модель Кронига - Пенни.

Введем две матрицы распространения $\hat{T}^{(2)}$ и $\hat{T}^{(3)}$, соответствующие скачкам потенциала при $x = x_2$ и $x = x_3$. Тогда результирующая матрица распространения, связывающая решения в 2 и 4 областях, является произведением этих матриц: $\hat{T} = \hat{T}^{(2)}\hat{T}^{(3)}$. Используя матрицу \hat{T} и ширину разделяющего барьера $b = x_3 - x_2$, запишем связь амплитуд волн ($k_4 = k_2$)

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

где компоненты матрицы имеют следующий вид

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{(k_2 + k_3)^2}{4k_2k_3} e^{ik_2b - ik_3b} - \frac{(k_2 - k_3)^2}{4k_2k_3} e^{ik_2b + ik_3b}, \\ T_{12} &= \frac{(k_2^2 - k_3^2)}{4k_2k_3} e^{ik_3b - ik_2x_3 - ik_2x_2} - \frac{(k_2^2 - k_3^2)}{4k_2k_3} e^{-ik_3b - ik_2x_3 - ik_2x_2}, \\ T_{21} &= \frac{(k_2^2 - k_3^2)}{4k_2k_3} e^{-ik_3b + ik_2x_3 + ik_2x_2} - \frac{(k_2^2 - k_3^2)}{4k_2k_3} e^{ik_3b + ik_2x_3 + ik_2x_2}, \\ T_{22} &= \frac{(k_2 + k_3)^2}{4k_2k_3} e^{-ik_2b + ik_3b} - \frac{(k_2 - k_3)^2}{4k_2k_3} e^{-ik_2b - ik_3b} \end{aligned}$$

Теперь используем условие периодичности волновой функции $\psi(x)$ в блоховской форме: $\psi(x+L) = e^{iKL} \psi(x)$, где K - квазиимпульс и $L = a + b$ - период структуры. Это условие можно переписать как $\psi_4(x+L) = e^{iKL} \psi_2(x)$ или $a_4 e^{ik_2L + ik_2x} + b_4 e^{-ik_2L - ik_2x} = e^{iKL} (a_2 e^{ik_2x} + b_2 e^{-ik_2x})$. В силу ортогональности множителей $e^{\pm ikx}$, указанное соотношение может быть выполнено для произвольного x только при $a_4 e^{ik_2L} = a_2 e^{iKL}$ и $b_4 e^{-ik_2L} = b_2 e^{iKL}$. Эта пара соотношений может быть записана в матричном виде

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = e^{-iKL} \begin{pmatrix} e^{ik_2L} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix}, \quad (1.53)$$

Объединяя соотношения (1.52) и (1.53), получаем условие существования периодических решений

$$\det \begin{pmatrix} T_{11} - e^{ik_2L - iKL} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{-ik_2L - iKL} \end{pmatrix} = 0 \quad (1.54)$$

или

$$T_{11} T_{22} - T_{11} e^{-ik_2L - iKL} - T_{22} e^{ik_2L - iKL} + e^{-2iKL} - T_{12} T_{21} = 0. \quad (1.55)$$

Распишем подробно каждое слагаемое ($a = L - b$)

$$T_{11} T_{22} = 1 + \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2 k_3^2} \sin^2(k_3 b),$$

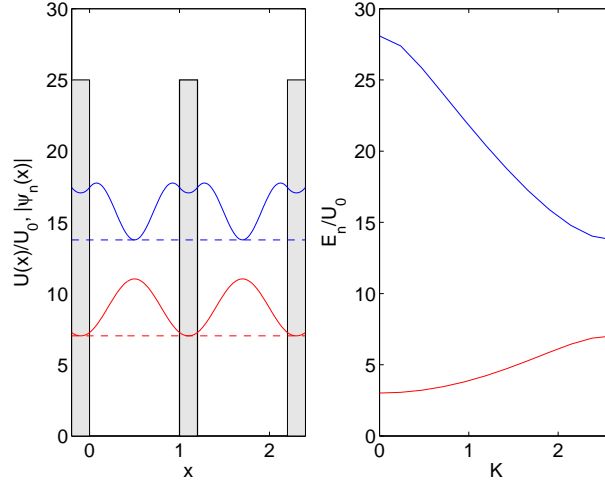


Рис. 11. Волновые функции и зонный спектр в задаче Кронига-Пенни.

$$\begin{aligned}
T_{11} e^{-ik_2 L - iKL} &= \frac{e^{-ik_2 L - iKL + ik_2 b}}{4k_2^2 k_3^2} \left\{ (k_2 + k_3)^2 e^{-ik_3 b} - (k_2 - k_3)^2 e^{+ik_3 b} \right\} = \\
&= \frac{e^{-ik_2 a - iKL}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\}, \\
T_{22} e^{ik_2 L - iKL} &= \frac{e^{ik_2 L - iKL - ik_2 b}}{4k_2 k_3} \left\{ (k_2 + k_3)^2 e^{ik_3 b} - (k_2 - k_3)^2 e^{-ik_3 b} \right\} = \\
&= \frac{e^{ik_2 a - iKL}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\}, \\
T_{12} T_{21} &= \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2 k_3^2} \sin^2(k_3 b).
\end{aligned}$$

В конечном итоге получаем

$$\begin{aligned}
1 + \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2 k_3^2} \sin^2(k_3 b) - \frac{e^{-ik_2 a - iKL}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\}, \\
- \frac{e^{ik_2 a - iKL}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\} - \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2 k_3^2} \sin^2(k_3 b) + e^{-2iKL} = 0.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
e^{iKL} + e^{-iKL} - \frac{e^{-ik_2 a}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\}, \\
- \frac{e^{ik_2 a}}{4k_2 k_3} \left\{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \right\} = 0.
\end{aligned}$$

$$\cos KL = \cos(k_2 a) \cos(k_3 b) - \frac{(k_2^2 + k_3^2)}{2k_2 k_3} \sin(k_2 a) \sin(k_3 b). \quad (1.56)$$

Полученное выражение описывает зависимость энергии блоховской волны, распространяющейся в периодическом потенциале, от квазиимпульса K . Результаты расчета волновых функций на границе зоны Бриллюэна представлены на рис. 11.

1.3. Квазиклассическое описание туннелирования

В данном разделе мы рассмотрим свойства одноэлектронных волновых функций стационарного уравнения Шрёдингера при наличии потенциала $U(x)$, который будем считать медленно меняющейся функцией координаты x .

1.3.1. Приближение Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна. Область применимости

В стационарном уравнении Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \quad (1.57)$$

сделаем замену $\psi = \exp(iS/\hbar)$ и получим эквивалентное уравнение для функции $S = S(x)$

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{d^2S}{dx^2} \right) = E - U(x). \quad (1.58)$$

Полагая, что рассматриваемая система по своим свойствам близка к классической, будем искать решение в виде ряда по степеням \hbar :

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 S_2(x) + \dots \quad (1.59)$$

В нулевом порядке теории возмущений получаем уравнение вида

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_0}{dx} \right)^2 = E - U(x), \quad (1.60)$$

которое элементарно интегрируется

$$p(x) = \sqrt{2m} \sqrt{E - U(x)}, \quad S_0(x) = \pm \int p(x) dx, \quad (1.61)$$

где $p(x)$ – классический импульс частицы.

В первом порядке теории возмущений получаем

$$\frac{dS_0}{dx} \frac{dS_1}{dx} + \frac{1}{2} \frac{d^2S_0}{dx^2} = 0, \quad \frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2} \frac{p'}{p}.$$

Интегрируя, находим

$$S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln p(x). \quad (1.62)$$

В конечном итоге получаем два линейно-независимых решения

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= e^{iS/\hbar} = e^{iS_0(x)/\hbar + S_1(x) + \dots} = e^{-\ln \sqrt{p(x)}} \times e^{iS_0(x)/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right), \\ \psi_-(x) &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right). \end{aligned} \quad (1.63)$$

Общее решение уравнения (1.57) может быть записано в виде линейной комбинации этих решений

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right). \quad (1.64)$$

В классически недоступных областях пространства, где $E < U(x)$, импульс частицы становится чисто мнимым и поэтому общий вид решения в этих областях

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right). \quad (1.65)$$

Отметим, что точность квазиклассического приближения не позволяет учитывать оба слагаемых одновременно, и поэтому экспоненциально малое решение должно быть отброшено на фоне экспоненциально большого слагаемого.

Квазиклассическое приближение справедливо в том случае, когда дебройлевская длина волны частицы $\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ слабо изменяется на масштабах длины волны [18]:

$$\left| \frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| \ll 1.$$

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{p} \right) \right| = \left| \frac{\hbar}{p^2} \left(\frac{dp}{dx} \right) \right| = \left| \frac{\hbar m}{p^3} \left(\frac{dU}{dx} \right) \right| \ll 1.$$

Очевидно, что квазиклассическое описание заведомо неприменимо вблизи классических точек поворота, в которых $E = U(x)$ и, соответственно, $p(x) = 0$.

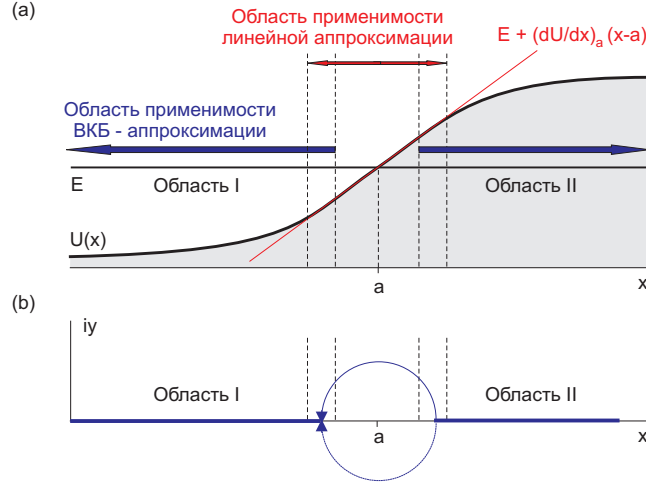


Рис. 12. Задача о сшивке затухающих и осциллирующих решений.

1.3.2. Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Лангера

Рассмотрим изолированную классическую точку поворота при $x = a$. Пусть вдали от этой точки приближение ВКБ применимо для описания процесса отражения частицы от барьера, поэтому решения в разрешенных и запрещенных областях могут быть найдены по формулам (1.64)–(1.65).

Волновая функция вблизи точки поворота может быть найдена в результате решение истинного уравнения Шрёдингера. Вблизи точки поворота потенциальную энергию $U(x)$ можно аппроксимировать линейной зависимостью (рис. 12)

$$U(x) \simeq E + \left(\frac{dU}{dx} \right)_a (x - a)$$

и привести уравнение Шрёдингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \{E - U(x)\} \psi = 0, \quad E - U(x) \simeq -U'_a (x - a)$$

к следующему виду

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U'_a (x - a) \psi = 0.$$

Заменой переменных $\xi = (x - a) [2m(dU/dx)_a/\hbar^2]^{1/3}$ это уравнение сводится в уравнению Эйри

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi\psi = 0.$$

Для определенности рассмотрим случай, когда разрешенная область находится слева от точки $x = a$, а запрещенная область – справа (см. рис. 12). Тогда нас будет интересовать решение, которое экспоненциально затухает при $x \rightarrow +\infty$ и осциллирует при $x \rightarrow -\infty$. Такое решение описывается одной из функций Эйри

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos \left(\frac{u^3}{3} + u\xi \right) du,$$

которая имеет следующие асимптотики

$$\text{Ai}(\xi) \propto \begin{cases} (1/2) \xi^{-1/4} \times \exp \{-(2/3) \xi^{3/2}\} & \text{при } \xi \rightarrow +\infty \\ |\xi|^{-1/4} \times \sin \{(2/3) |\xi|^{3/2} + \pi/4\} & \text{при } \xi \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (1.66)$$

Полное и строгое решение задачи о регуляризации ВКБ-приближения, которое позволит описать волновую функцию для любых x , теперь сводится к задаче о сшивании точного решения уравнения (1.66) вблизи точки $x = a$ с приближенными решениями (1.64)–(1.65) в диапазоне применимости этих выражений.

Заметим, что связь осциллирующих и затухающих решений (1.64)–(1.65) в разрешенных и запрещенных областях может быть получена и без процедуры сшивки решений. Проиллюстрируем это следующим образом. Если предположить, что частица налетает на треугольный потенциальный барьер† слева, то справа от барьера (область II, $x > a$) по принципу причинности будет существовать только одна экспоненциально затухающая мода вида

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left(-\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} (x-a)^{3/2} \right), \quad (1.67)$$

где C – произвольная постоянная. Вводя переменную $\xi = (x-a) [2mU'_a/\hbar^2]^{1/3}$, можно видеть, что это выражение

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\xi^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right), \quad (1.68)$$

которое совпадает с асимптотическим разложением для функции Эйри при $x \rightarrow +\infty$.

В классически разрешенной области I ($x < a$) волновая функция может быть представлена в виде двух бегущих волн

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right) \quad (1.69)$$

или

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(-\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{3/2} \right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left(+\frac{2i}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{3/2} \right) = \\ &= \frac{C_1}{|\xi|^{1/4}} \exp \left(-\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2} \right) + \frac{C_2}{|\xi|^{1/4}} \exp \left(+\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2} \right) \end{aligned} \quad (1.70)$$

Для того, чтобы это выражение имело вид стоячей волны и, тем самым, совпадало с асимптотическим выражением для функции Эйри при $x \rightarrow -\infty$, необходимо потребовать, например, $C_1 = -Ce^{-i\pi/4}/(2i)$ и $C_2 = Ce^{+i\pi/4}/(2i)$. В этом случае формула (1.70) принимает следующий вид

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{C}{|\xi|^{1/4}} \frac{1}{2i} \left\{ -\exp \left(-\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2} - i \frac{\pi}{4} \right) + \exp \left(\frac{2}{3} i |\xi|^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right) \right\} = \\ &= \frac{C}{|\xi|^{1/4}} \sin \left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{C}{|\xi|^{1/4}} \sin \left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right) \end{aligned} \quad (1.71)$$

† Здесь мы имеем в виду, что $U(x) \simeq E + U'_a(x-a)$, поэтому

$$\begin{aligned} p(x) &= \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{1/2}; & \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx &= -\frac{2}{3} \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{3/2} & \text{для } x < a; \\ |p(x)| &= \sqrt{2mU'_a} (x-a)^{1/2}; & \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx &= \frac{2}{3} \sqrt{2mU'_a} (x-a)^{3/2} & \text{для } x > a; \end{aligned}$$

Таким образом, мы установили, что экспоненциально затухающее решение вида

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\}$$

переходит в осциллирующее решение вида

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{или} \quad \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.72)$$

Полученное правило соответствия можно переписать в виде, не зависящем от того, с какой стороны от точки поворота располагается классически запрещенная области

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| \right\} \Rightarrow \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.73)$$

1.3.3. Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Свана

Формулы связи типа (1.73) могут быть получены другим способом, позволяющим не прибегать к анализу точных решений стационарного уравнения Шрёдингера в окрестности классических точек поворота.

1. Пусть $x = a$ есть простая точка поворота, в которой $U(a) = E$ и потому $p = 0$. Пусть как и раньше область справа от точки поворота ($x > a$) будет классически недоступной областью, в которой $U(x) > E$. Если частица налетает на барьер слева, то в забарьерной области волновая функция должна иметь вид экспоненциально затухающего решения

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} \quad \text{при } x > a, \quad (1.74)$$

где амплитуда функции принята равной $C/2$ из соображений удобства. Слева от точки поворота волновая функция является суперпозицией двух квазиклассических решений уравнения Шрёдингера

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\} \quad \text{при } x < a. \quad (1.75)$$

Рассмотрим такой диапазон изменения x , в котором справедлива линейная аппроксимация вида $U(x) \simeq E + U'_a(x - a)$, и в то же время применимо ВКБ-приближение.† Тогда

$$|p(x)| = \sqrt{2m|U'_a|} \sqrt{x - a}, \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx = \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|U'_a|} (x - a)^{3/2} \quad \text{при } x > a, \quad (1.76)$$

$$p(x) = \sqrt{2mU'_a} \sqrt{a - x}, \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx = -\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} (a - x)^{3/2} \quad \text{при } x < a. \quad (1.77)$$

Следуя Свану (A. Zwaan), будем рассматривать формально $\psi_I(x)$ и $\psi_{II}(x)$ как функции комплексной переменной x

$$x = a + \rho e^{i\theta}.$$

Рассмотрим такой путь перехода из области II в область I в верхней полуплоскости в виде полуокружности радиуса ρ , на котором сохраняется приближение квазиклассичности (good path). На

† Пояснение о применимости подхода

этом контуре волновая функция $\psi_{II}(x)$ принимает следующий вид

$$\begin{aligned}\psi_{II}(x) &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} = \\ &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{1}{(x-a)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} (x-a)^{3/2} \right\} = \\ &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{e^{-i\theta/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mU'_a} \times \rho^{3/2} \left(\cos \frac{3\theta}{2} + i \sin \frac{3\theta}{2} \right) \right\}.\end{aligned}$$

Используя соотношения (1.76) – (1.77), проследим за изменением волновой функций $\psi_{II}(x)$ на этом контуре при переходе от точки $x = a + \rho$ к точке $x = a - \rho$ (т.е. от $\theta = 0$ к $\theta = \pi$, рис. 12):

$$\begin{aligned}\theta = 0 : \quad \psi_{II}(x) &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} \times \rho^{3/2} \right\}, \\ \theta = \pi : \quad \psi_{II}(x) &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} \times \rho^{3/2} \right\},\end{aligned}\tag{1.78}$$

Сравним это выражение с выражением для $\psi_I(x)$, учитывая, что $x = a - \rho$ и $\rho > 0$:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= \frac{C_1}{(2mU'_a)^{1/4}(a-x)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{3/2} \right\} + \\ &+ \frac{C_2}{(2mU'_a)^{1/4}(a-x)^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} (a-x)^{3/2} \right\} = \\ &= \frac{C_1}{(2mU'_a)^{1/4}\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} \rho^{3/2} \right\} + \frac{C_2}{(2mU'_a)^{1/4}\rho^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} \rho^{3/2} \right\}.\end{aligned}\tag{1.79}$$

Таким образом, волновая функция $\psi_{II}(x)$ в конце перехода в соответствие с выражениями (1.78) и (1.79) переходит во второй член волновой функции $\psi_I(x)$, и поэтому $C_2 = (1/2)C e^{-i\pi/4}$.

Для определения коэффициента C_1 необходимо произвести переход от точки $x = a + \rho$ к точке $x = a - \rho$ по полуокружности в нижней полуплоскости. Легко видеть, что в конце такого перехода

$$\theta = -\pi : \quad \psi_{II}(x) = \frac{C}{2} \frac{1}{(2mU'_a)^{1/4}} \frac{e^{+i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mU'_a} \times \rho^{3/2} \right\}\tag{1.80}$$

совпадает в первом слагаемом в выражении (1.79), поэтому $C_1 = (1/2)C e^{i\pi/4}$.

Таким образом, для рассматриваемого профиля $U(x)$ получаем формулы связи

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} \quad \text{при } x > a \Rightarrow\tag{1.81}$$

$$\begin{aligned}&= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \times \left(\frac{1}{2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i\frac{\pi}{4} \right\} + \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - i\frac{\pi}{4} \right\} \right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } x < a\end{aligned}\tag{1.82}$$

Полученное правило соответствия можно записать в виде, не зависящем от того, с какой стороны от точки поворота находится потенциальный барьер

$$\begin{aligned}\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| \right\} \quad \text{при } U(x) > E \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| - \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } U(x) < E.\end{aligned}\tag{1.83}$$

2. Тот факт, что для определения амплитуд бегущих волн в выражении (1.75) для функции $\phi_I(x)$ необходимо по отдельности рассматривать переходы в верхней и нижней полуплоскостях имеет простое объяснение, связанное с аналитическими свойствами функции

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \psi^{(+)}(x) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \psi^{(-)}(x), \quad (1.84)$$

$$\psi^{(+)}(x) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\}, \quad \psi^{(-)}(x) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\}. \quad (1.85)$$

Во-первых заметим, что множители $1/\sqrt{p(x)}$ на рассматриваемых путях обходов в виде полуокружностей не меняют относительных амплитуд первого и второго слагаемых, поэтому относительная важность этих слагаемых определяется экспоненциальными множителями $\psi^{(+)}(x)$ и $\psi^{(-)}(x)$. Во-вторых, функции $\psi^{(+)}(x)$ и $\psi^{(-)}(x)$ являются $4\pi/3$ -периодичными функциями и наименьший период функции $\psi_I(x)$, кратный 2π (полному обороту), есть $3 \times 4\pi/3 = 4\pi$. Это означает, что $\psi_I(x)$ – многозначная функция. Это значит, что на различных листах функции $\psi^{(+)}(x)$ и $\psi^{(-)}(x)$ будут иметь различные значения. Легко видеть (рис. 13), что при переходе от $\theta = 0$ к $\theta = \pi$ сначала доминирует слагаемое $\psi^{(-)}(x)$ (в области углов $0 < \theta < 2\pi/3$), а затем оно становится экспоненциально малым по сравнению с $\psi^{(+)}(x)$. Верно и обратное утверждение – при переходе по верхней полуплоскости в обратном направлении слагаемое $\psi^{(+)}(x)$ постепенно уменьшается по модулю и в классически запрещенной области становится экспоненциально малым по сравнению с $\psi^{(-)}(x)$. Но квазиклассическое приближение не дает возможности заметить экспоненциально малые слагаемые на фоне большого члена, что является причиной потери первого слагаемого и коэффициента C_1 при обходе по верхней полуокружности и второго слагаемого – при обходе по нижней полуокружности.

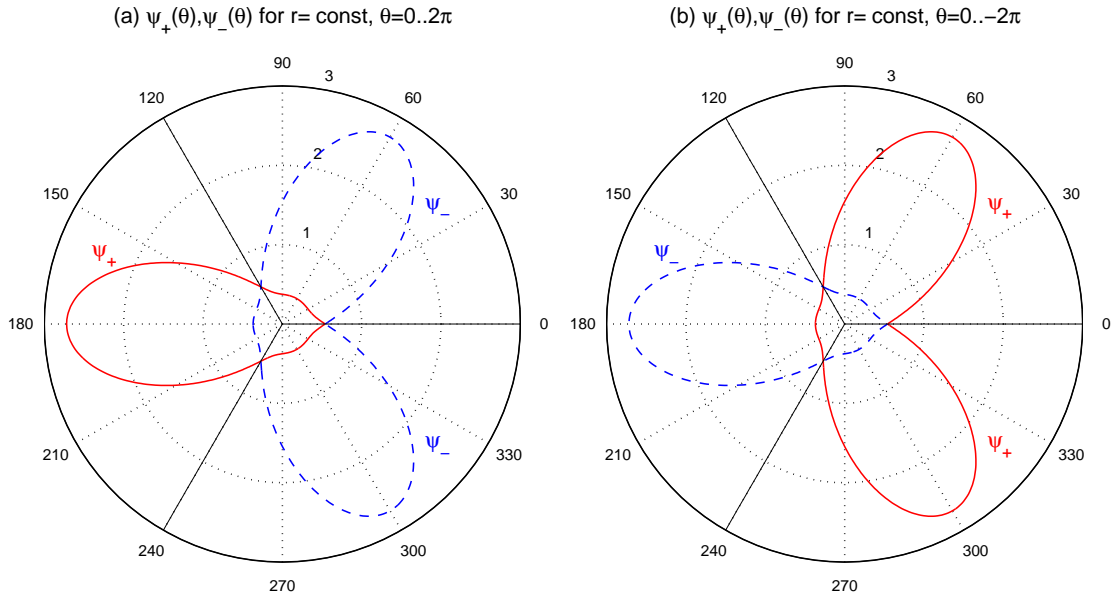


Рис. 13. Области доминирования слагаемых $\bar{A}_+(x) = \exp(i \int_a^x \sqrt{x-a} dx)$ и $\bar{A}_-(x) = \exp(-i \int_a^x \sqrt{x-a} dx)$ в комплексной плоскости $x = \frac{1}{2}e^{i\theta}$, $\frac{1}{2} = \text{const}$. Рисунок (а) соответствует углам в диапазоне $0 < \mu < 2\pi$, (б) – $-2\pi < \mu < 0$.

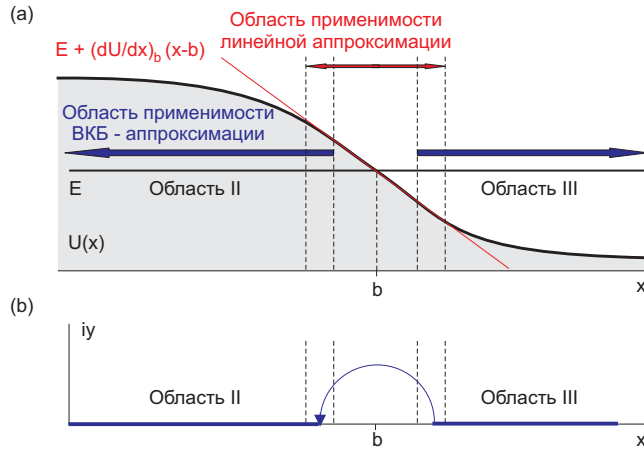


Рис. 14. Задача о сшивке затухающих и осциллирующих решений.

3. Рассмотрим такой потенциальный профиль $U(x)$, что запрещенная область лежит слева от точки поворота $x = b$: $U(x) = E + (dU/dx)_b(x-b)$ и $F_0 = -(dU/dx)_b > 0$ (рис. 14). Пусть справа от точки поворота квазиклассическая волновая функция имеет вид бегущей волны и фаза $\pi/4$ выбрана из соображений удобства

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } x > b. \quad (1.86)$$

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}(x-b)^{1/4}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \int_b^x \sqrt{x-b} dx + i \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{e^{-i\theta/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} i \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \left(\cos \frac{3\theta}{2} + i \sin \frac{3\theta}{2} \right) + i \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (1.87)$$

Определим вид волновой функции в классически запрещенной области при $x < b$ тем же способом, перейдя от разрешенной области к запрещенной по верхней полуокружности постоянного радиуса с изменением фазы от $\theta = 0$ до $\theta = \pi$

$$\begin{aligned} \theta = 0: \quad \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right\}, \\ \theta = \pi: \quad \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \right\} \end{aligned} \quad (1.88)$$

Сравним полученное выражение (1.88) с экспоненциально затухающим решением $\psi_{II}(x)$ в классически запрещенной области при $x < b$:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{(b-x)^{1/4}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^b \sqrt{2mF_0} \sqrt{b-x} dx \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \right\}. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Поскольку выражение (1.88) и (1.89) в точности совпадают, находим следующее правило соответствия

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } x > b \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right| \right\} \quad \text{при } x < b. \quad (1.90)$$

Подчеркнем еще раз, что такое правило предполагает определенный вид волновой функции (бегущая направо волна) в классически разрешенной области и поэтому должно применяться только для перехода от последней к классически запрещенной области.

1.3.4. Прохождение частицы через потенциальный барьер

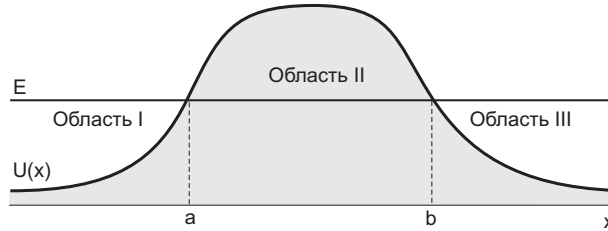


Рис. 15. Барьер

Рассмотрим задачу о прохождении частицы потенциального барьера в квазиклассическом приближении (рис. 19). Если частица налетает на барьер слева, то в области *III* за барьером будет лишь уходящая волна вида

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.91)$$

Согласно формуле (1.90) находим волновую функцию в области *II* внутри барьера

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right| \right\}. \quad (1.92)$$

Заметим, что если $x < b$, то

$$\left| \int_b^x p(x) dx \right| = \int_x^b |p(x)| dx = \int_x^b |p(x)| dx = \int_a^b |p(x)| dx - \int_a^x |p(x)| dx$$

и

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx - \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\}. \end{aligned} \quad (1.93)$$

Согласно формулам связи (1.82) получаем решение в области *I* перед барьером ($x < a$)

$$\psi_I(x) = 2 \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.94)$$

Учитывая, что $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$, получаем решение в виде двух бегущих волн

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} + \\ &+ \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_x^a p(x) dx - i \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (1.95)$$

По определению, коэффициент прохождения t есть отношение потоков частиц в налетающей и прошедшей волнах:

$$t = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\}. \quad (1.96)$$

Заметим, что коэффициент отражения в квазиклассическом приближении равен единице (с экспоненциальной точностью).

1.3.5. Спектр состояний частицы, локализованной в потенциальной яме. Формула квантования Бора-Зоммерфельда

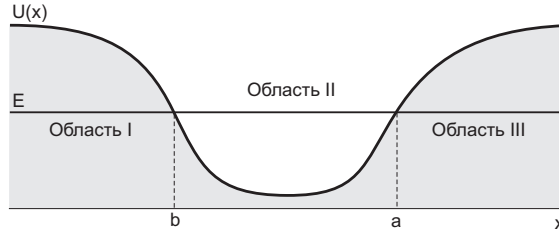


Рис. 16. Барьер

Выведем условия, определяющие дискретные уровни энергии в квазиклассическом приближении и соответствующие финитному движению при $b \leq x \leq a$, где a и b – классические точки поворота.

Согласно правилу (1.83), затухающее решение справа от точки $x = b$ приводит к осциллирующему решению в классически разрешенной области вида

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.97)$$

Применим это же правило к точке $x = a$ и получим другое выражение для волновой функции

$$\psi_{II}(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\} = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.98)$$

Для того, чтобы эти два выражения совпадали во всей области, разность их фаз должна быть кратна π (при условии $C = (-1)^n C'$, n – целое)

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) - \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{1}{\hbar} \int_b^a p(x) dx - \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad (1.99)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{или} \quad \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = 2 \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_a^b p(x) dx = n + \frac{1}{2}. \quad (1.100)$$

Полученное условие есть правило квантования Бора-Зоммерфельда,[†] целочисленное значение n соответствуют номеру возбужденного состояния. Для применимости квазиклассического описания $n \gg 1$.

Для нормировки волновой функции достаточно проинтегрировать $|\psi(x)|$ лишь в интервале $b \leq x \leq a$, так как вне этого интервала волновая функция экспоненциально затухает. Поскольку аргумент косинуса

[†] Данное условие квантования адиабатического инварианта $(2\pi\hbar)^{-1} \oint p(x) dx$, необходимого для объяснения существования дискретных уровней энергии, было получено Бором (Niels Bohr) и Зоммерфельдом (Arnold Sommerfeld) еще до разработки современной квантовой механики.

в выражении (1.97) является быстро осциллирующей функцией, поэтому с достаточной точностью можно заменить квадрат косинуса его средним значением $1/2$. Тогда получим

$$\int_b^a |\psi_{II}(x)|^2 dx \approx \frac{C^2}{2} \int_b^a \frac{dx}{p(x)}. \quad (1.101)$$

Учитывая, что период движения $T = 2\pi/\omega$ равен

$$T = 2 \int_b^a \frac{dx}{v(x)} = 2m \int_b^a \frac{dx}{p(x)} \quad (1.102)$$

получаем $\pi C^2/(2m\omega) = 1$. В результате нормированная волновая функция принимает следующий вид

$$\psi_{II}(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (1.103)$$

1.3.6. Расчет спектров состояний для частицы, локализованной в связанных потенциальных ямах

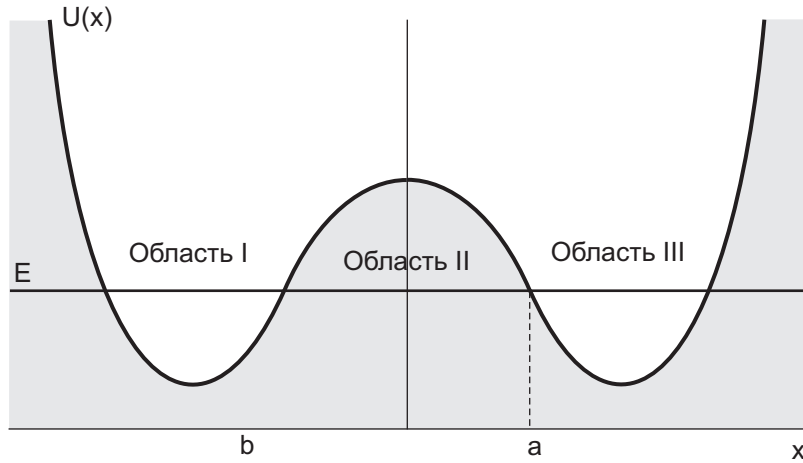


Рис. 17. Барьер

Обсудим вопрос о расщеплении энергетических уровней в связанных симметричных потенциальных ямах, которые могут быть описаны квазиклассическим потенциалом $U(x)$.

Пусть $\psi_0(x)$ – нормированная волновая функция частицы (с энергией E_0), локализованная в одной потенциальной яме и экспоненциально затухающая в обе стороны от границ этой ямы. В квазиклассическом приближении такая нормированная функция, соответствующая энергии E_0 , может иметь вид (1.103)

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (1.104)$$

Как мы показали ранее, при учете малой вероятности туннелирования между ямами уровень E_0 расщепляется на два подуровня $E_{1,2} = E_0 \mp \Delta E$. Правильные волновые функции нулевого приближения представляют собой симметричную и антисимметричную комбинацию функций $\psi_0(x)$ и $\psi_0(-x)$.

Рассмотрим основное состояние системы с энергией $E_1 = E_0 - \Delta E$, соответствующее симметричной комбинации невозмущенных решений

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_0(x) + \psi_0(-x) \}. \quad (1.105)$$

В области ямы I (правая часть) функция $\psi_0(-x)$ исчезающе мала по сравнению с $\psi_0(x)$, а в яме II – наоборот. Поэтому произведение $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ исчезающе мало везде, и волновая функция (1.105) также оказывается нормированной. Запишем уравнения Шрёдингера для функций $\psi_0(x)$ и $\psi_1(x)$

$$\begin{aligned}\psi_0''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - U)\psi_0(x) &= 0, \\ \psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - U)\psi_1(x) &= 0.\end{aligned}$$

Умножим первое уравнение на $\psi_1(x)$, второе уравнение – на $\psi_0(x)$, почленно вычтем и проинтегрируем по переменной x в пределах от 0 до $+\infty$:

$$\int_0^{\infty} \psi_0''(x)\psi_1(x) dx - \int_0^{\infty} \psi_1''(x)\psi_0(x) dx + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - E_1) \int_0^{\infty} \psi_0(x)\psi_1(x) dx = 0. \quad (1.106)$$

Распишем подробно каждый интеграл и учтем, что $\psi_1(0) = \sqrt{2}\psi_0(0)$, $\psi_1'(0) = 0$ и все решения экспоненциально спадают на бесконечности ($\psi_0(x) \rightarrow 0$ и $\psi_1(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$),

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} \psi_0''(x)\psi_1(x) dx &= \psi_0'(x)\psi_1(x) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \psi_0'(x)\psi_1'(x) dx = -\psi_0'(0)\psi_1(0) - \int_0^{\infty} \psi_0'(x)\psi_1'(x) dx, \\ \int_0^{\infty} \psi_1''(x)\psi_0(x) dx &= \psi_1'(x)\psi_0(x) \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \psi_1'(x)\psi_0'(x) dx = -\int_0^{\infty} \psi_1'(x)\psi_0'(x) dx \\ \int_0^{\infty} \psi_0(x)\psi_1(x) dx &\simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} \psi_0^2(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

Сдвиг уровня основного состояния вниз, обусловленный туннельным взаимодействием потенциальных ям, равен

$$E_1 = E_0 - \frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0).$$

Теперь рассмотрим возбужденное состояние системы с энергией $E_2 = E_0 + \Delta E$ и антисимметричной комбинацией невозмущенных решений

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_0(x) - \psi_0(-x)\}. \quad (1.107)$$

Рассуждая аналогичным образом, получаем

$$\int_0^{\infty} \psi_0''(x)\psi_2(x) dx - \int_0^{\infty} \psi_2''(x)\psi_0(x) dx + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - E_2) \int_0^{\infty} \psi_0(x)\psi_2(x) dx = 0. \quad (1.108)$$

$$-\psi_0'(0)\psi_2(0) + \psi_2'(0)\psi_0(0) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2}}(E_0 - E_2) = 0. \quad (1.109)$$

Теперь учтем, что $\psi_2(0) = 0$ и $\psi_2'(0) = \sqrt{2}\psi_0'(0)$ и получим, такое же выражение для сдвига энергии, но с обратным знаком

$$E_2 = E_0 + \frac{\hbar^2}{m}\psi_0(0)\psi_0'(0).$$

Поскольку величина расщепления определяется волновой функцией при $x = 0$, необходимо продлить решение (1.104) в классически запрещенную область при $x < a$. По формулам связи (1.73) получаем экспоненциально затухающее решение внутри барьера

$$\psi_0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p(x)}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| \right\}, \quad \psi_0(0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi p_0}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\}.$$

При вычислении производной $\psi_0(x)$ будем учитывать, что предэкспоненциальный множитель, пропорциональный $p^{-1}(x)$, описывает лишь медленное изменение амплитуды решения по сравнению с быстрым пространственным изменением экспоненциального множителя

$$\psi_0'(x) = \frac{p_0}{\hbar} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi p(x)}} \frac{p(x)}{\hbar} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\}, \quad \psi_0'(0) = \frac{p_0}{\hbar} \psi_0(0),$$

где величина $p_0 = \sqrt{2m(U_0 - E_0)}$ характеризует дефицит кинетической энергии внутри барьера, $U_0 = U(x)|_{x=0}$. Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0) &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{p_0}{\hbar} \psi_0^2(0) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{p_0}{\hbar} \frac{m\omega}{2\pi p_0} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\}. \\ E_1 = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx \right\}, \quad E_2 = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx \right\}. \end{aligned} \quad (1.110)$$

Как и следовало ожидать, расщепление уровней определяется туннельной прозрачностью барьера.

1.4. Метод туннельного гамильтониана

Приближение туннельного гамильтониана было впервые введено Опенгеймером в 1928 г. и затем обобщено Бардином в 1961 г. на твердотельные структуры. Такое приближение объясняется тем фактом, что в обычной туннельной структуре с низкой прозрачностью барьеров ($\kappa w \ll 1$) возникает близкая к единице вероятность отражения от барьера. Это означает, что слева от барьера электронные волны являются скорее стоячими типа $\cos kx$, чем бегущими e^{ikx} , тоже самое происходит и справа от барьера. Можно считать, что энергетический барьер разделяет систему на две почти независимые части и слабое взаимодействие между ними может трактоваться как возмущение. Однако возникает естественный вопрос о способе введения такого слагаемого в гамильтониан, чтобы он обеспечивал существование туннельного тока.

Интерес к приближению туннельного гамильтониана связан с тем, что такое приближение дает правильный рецепт учета плотности состояний в результирующий туннельный ток. Действительно, если бы был известен матричный элемент перехода M , тогда вероятность переходов в единицу времени определялась бы по золотому правилу Ферми

$$w_{1 \rightarrow 2} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E_2) \delta(E_1 - E_2). \quad (1.111)$$

1.4.1. Вывод туннельного гамильтониана для одномерного потенциального барьера

Следуя классической работе Бардина [22] рассмотрим одномерный прямоугольный барьер: пусть x_1 и x_2 – положения левой и правой стенок барьера. Рассмотрим две электронных подсистемы (R , right) и левом (L , left) электродах. Будем полагать, что прозрачность барьера крайне низка, что позволит нам построить простые приближенные решения для точного гамильтониана \hat{H} . Например, в квазиклассическом приближении для одноэлектронной волновой функции левого металла можно записать

$$\psi_L = \begin{cases} A p_x^{-1/2} e^{i(k_y y + k_z z)} \cos(k_x x + \gamma_L), & x_1 < x \\ A |p_x|^{-1/2} e^{i(k_y y + k_z z)} \exp(-\kappa x), & x_1 < x < x_2, \end{cases} \quad (1.112)$$

где $A = (2k_x/L)^{1/2}$ – нормировочная константа. В забарьерной области $x > x_2$ будем считать, что наше приближенное решение стремится к нулю как $\exp(-k_x x)$ вместо того, чтобы в этой области удовлетворять

уравнению Шрёдингера. Аналогичные предположения мы делаем и в отношении волновых функций правого электрода ψ_R

$$\psi_R = \begin{cases} B p_x^{-1/2} e^{i(k_y y + k_z z)} \cos(k_x x + \gamma_R), & x < x_2 \\ B |p_x|^{-1/2} e^{i(k_y y + k_z z)} \exp(+\kappa x), & x_1 < x < x_2, \end{cases} \quad (1.113)$$

Таким образом, построенное нами решение ψ_L является точным решением в энергии E_L во области $x \leq x_2$, а решение ψ_R – точным решением задачи в энергии E_R в том же гамильтонианом при $x \leq x_1$. Такие решения удовлетворяют граничным условиям на волновую функцию.

Заметим, что точный вид решений не принципиален, важна лишь пространственная локализация решений (т.е. экспоненциальное затухание) в соответствующих областях.

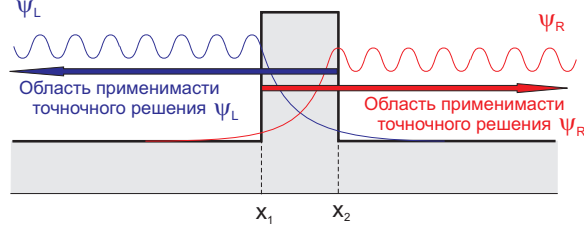


Рис. 18. Рассмотрение Бардина

Теперь предположим, что электрон сначала находится в левом электроде в основном состоянии, описываемой состоянием ψ_L . Вычислим вероятность перехода электрона в другое состояние, описываемое функцией ψ_R . Для простоты будем считать, что эти два состояния – единственные в правом и левом электродах. Запишем

$$\psi(t) = c(t) \psi_L e^{-iE_L t/\hbar} + d(t) \psi_R e^{-iE_R t/\hbar} \quad (1.114)$$

и подставим это выражение в уравнение Шрёдингера $i\hbar \partial\psi/\partial t = \hat{H}\psi$

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{c} \psi_L e^{-iE_L t/\hbar} + c \psi_L E_L e^{-iE_L t/\hbar} + i\hbar \dot{d} \psi_R e^{-iE_R t/\hbar} + d \psi_R E_R e^{-iE_R t/\hbar} = \\ = c e^{-iE_L t/\hbar} \hat{H} \psi_L + d e^{-iE_R t/\hbar} \hat{H} \psi_R. \end{aligned} \quad (1.115)$$

Рассмотрим распад состояния, для которого в момент $t = 0$ электрон был локализован в левом электроде, тогда следует положить $c(0) = 1$ и $d(0) = 0$. Из условия нормировки† полной волновой функции $d(|c|^2 + |d|^2)/dt = 0$ следует $\dot{c} \approx 0$, тогда

$$i\hbar \dot{d} \psi_R e^{-iE_R t/\hbar} = (\hat{H} - E_L) \psi_L e^{-iE_L t/\hbar}. \quad (1.116)$$

Считая функции ψ_L и ψ_R нормированными, домножим обе части уравнения на ψ_R^* и проинтегрируем

$$i\hbar \dot{d} = \int \psi_R^* (\hat{H} - E_L) \psi_L e^{i(E_R - E_L)t/\hbar} dx. \quad (1.117)$$

Как и в обычной квантовой механике, временная производная коэффициентов разложения должна определяться матричным элементом оператора возмущения \hat{H}_T

$$\int \psi_R^* (\hat{H} - E_L) \psi_L e^{i(E_R - E_L)t/\hbar} dx = e^{i(E_R - E_L)t/\hbar} \int \psi_R^* \hat{H}_T \psi_L dx, \quad (1.118)$$

поэтому мы можем считать величину

$$T_{L \rightarrow R} = \int \psi_R^* (\hat{H} - E_L) \psi_L dx \quad (1.119)$$

эффективным матричным элементом туннельного перехода.

† Например, если $d(t) = at$, тогда для обеспечения нормировки $c(t) = 1 - at^2/2$ и $\dot{c}(0) = 0$.

Интеграл в выражении (1.119) отличен от нуля $x > x_2$ и равен нулю для $x \leq x_2$, поскольку $H\psi_L = E_L\psi_L$ тождественно в левом электроде. Это позволяет нам ограничить пределы интегрирования значением x_B внутри барьера ($x_1 \leq x_B \leq x_2$)

$$T_{L \rightarrow R} = \int_{x_B}^{\infty} \psi_R^* (\hat{H} - E_L) \psi_L dx \quad (1.120)$$

Добавим к этому выражению величину, равную нулю при $x > x_B$, например

$$\int_{x_B}^{\infty} \psi_L^* (\hat{H} - E_R) \psi_R dx = 0 \quad \text{при} \quad x_B \geq x_1. \quad (1.121)$$

Это позволяет нам симметризовать выражение

$$T_{L \rightarrow R} = \int_{x_B}^{\infty} \left\{ \psi_R^* (\hat{H} - E_L) \psi_L - \psi_L^* (\hat{H} - E_R) \psi_R \right\} dx, \quad x_1 \leq x_B \leq x_2. \quad (1.122)$$

В качестве нижнего предела интегрирования x_B можно выбрать любое значение внутри барьера.

$$T_{L \rightarrow R} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_B}^{\infty} \left\{ -\psi_R^* \frac{d^2}{dx^2} \psi_L + \psi_L^* \frac{d^2}{dx^2} \psi_R \right\} dx + \int_{x_B}^{\infty} \left\{ \psi_R^* (U - E_L) \psi_L - \psi_L^* (U - E_R) \psi_R \right\} dx. \quad (1.123)$$

Теперь учтем, что стоячие электронные волны согласно (1.112)–(1.113) могут быть представлены как произведение действительной функции x -переменной и комплексозначные функции от y - и z -переменных. Кроме того, если предположить $E_L \approx E_R$ (закон сохранения энергии), тогда второе слагаемое в (1.136) становится крайне малым и мы им пренебрегаем. После интегрирования первого слагаемого в выражении (1.136) по частям получаем

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi_R^* \frac{d}{dx} \psi_L - \psi_L^* \frac{d}{dx} \psi_R \right\}_{x=x_B}. \quad (1.124)$$

Таким образом, мы установили, что подходящий матричный элемент по существу соответствует квантовомеханическому оператору плотности потока вероятности

$$T_{L \rightarrow R} = -i\hbar j_{L \rightarrow R}, \quad (1.125)$$

определяемому парциальными волновыми функциями внутри барьера.

1.4.2. Туннельный ток через одиночный барьер в приближении туннельного гамильтониана

Пусть прямоугольный потенциальный барьер высоты U_2 занимает область от x_1 до x_2 .

Рассмотрим вспомогательную задачу о волновых функциях в левом электроде и примем зависимость потенциальной энергии:

$$U_L = \begin{cases} U_1, & x < x_1 \\ U_2, & x > x_1, \end{cases} \quad (1.126)$$

Очевидно, что внутри потенциального барьера волновая функция затухает экспоненциально $\psi_{2L} = a_{2L} e^{-\kappa_2 x}$, $\kappa_2^2 = (2m/\hbar^2)(U_2 - E)$ и ее амплитуду a_{2L} можно определить используя аппарат трансфер-матрицы получаем

$$\begin{pmatrix} a_{1L} \\ b_{1L} \end{pmatrix} = \hat{T}^{(1)} \begin{pmatrix} a_{2L} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Получаем, что $a_{1L} = T_{11}^{(1)} a_{2L}$, $T_{11}^{(1)} = (2k_1)^{-1} (k_1 + \kappa_2) \exp(-ik_1 x_1 - \kappa_2 x_1)$ или

$$a_{2L} = \frac{a_{1L}}{T_{11}^{(1)}} = a_{1L} \frac{2k_1}{(k_1 + \kappa_2)} e^{+ik_1 x_1 + \kappa_2 x_1}, \quad |a_{2L}|^2 = |a_{1L}|^2 \frac{4k_1^2}{(k_1^2 + \kappa_2^2)} e^{2\kappa_2 x_1}, \quad (1.127)$$

где $k_1^2 = (2m/\hbar^2)(E - U_1)$ – волновой вектор в области 1.

Аналогичным образом рассмотрим задачу о локализованных решениях в правом электроде в присутствии потенциала

$$U_R = \begin{cases} U_2, & x < x_2 \\ U_3, & x > x_2, \end{cases} \quad (1.128)$$

Выражаем амплитуду экспоненциально затухающего решения через параметры задачи

$$\begin{pmatrix} 0 \\ b_{2R} \end{pmatrix} = \hat{T}^{(2)} \begin{pmatrix} a_{3R} \\ b_{3R} \end{pmatrix}.$$

и получаем

$$b_{2R} = a_{3R} \left(T_{21}^{(2)} - \frac{T_{11}^{(2)} T_{22}^{(2)}}{T_{12}^{(2)}} \right) = -a_{3R} \frac{k_3}{\kappa_2} \frac{2i\kappa_2}{(\kappa_2 + k_3)} e^{+ik_3 x_2 - \kappa_2 x_2},$$

$$|b_{2R}|^2 = |a_{3R}|^2 \frac{4k_3^2}{(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2 x_2} \quad (1.129)$$

Как было показано ранее, матричный элемент туннельного перехода может быть выражен следующим образом

$$T_{L \rightarrow R} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \psi_R^* \frac{d}{dx} \psi_L - \psi_L^* \frac{d}{dx} \psi_R \right\}_{x=x_B} = \frac{\hbar^2 \kappa_2}{m} b_{2R}^* a_{2L}. \quad (1.130)$$

Вычислим квадрат модуля матричного элемента перехода

$$|T_{L \rightarrow R}|^2 = \frac{\hbar^4 \kappa_2^2}{m^2} |b_{2R}|^2 |a_{2L}|^2 = \frac{\hbar^4}{m^2} \frac{16 k_1^2 \kappa_2^2 k_3^2 e^{-2\kappa_2(x_2 - x_1)}}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} |a_{1L}|^2 |a_{3R}|^2. \quad (1.131)$$

Согласно золотому правилу Ферми, интенсивность переходов w_{12} из данного состояния 1 в ряд состояний 2 с плотностью $\rho(E)$, может быть вычислен как

$$w_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{12}|^2 \rho(E_2) \delta(E_2 - E_1). \quad (1.132)$$

Для рассматриваемого случая туннелирования нормальных электронов через барьер мы можем записать

$$w_{L \rightarrow R} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{L \rightarrow R}|^2 \rho(E_R) \delta(E_R - E_L). \quad (1.133)$$

Оценим плотность состояний $\rho(E) = (dN/dE)$ – число состояний в единичном интервале энергий. Предположим, что туннелирование происходит одномерный кристалл размера L , поскольку параллельные компоненты импульса нам сохраняются и в туннелировании не участвуют. Число разрешенных состояний в одномерном случае без учета спина

$$N = \frac{2k_{max}}{2\pi/L} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} 2\sqrt{E - U_3} L, \quad \rho(E) = \frac{dN}{dE} = L \frac{\sqrt{m}}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E - U_3}} = \frac{2m}{2\pi\hbar} \frac{1}{\hbar k_3}. \quad (1.134)$$

Учтем, что в туннелировании участвуют электроны, для которых $k_x > 0$, а таких частиц вдвое меньше, чем полное число частиц с заданной энергией. Так как скорость переходов в единицу времени это есть поток вероятности, получаем выражение для туннельного тока

$$j = L \frac{2\pi}{\hbar} \times \frac{\hbar^4}{m^2} \frac{16 k_1^2 \kappa_2^2 k_3^2 e^{-2\kappa_2 w_2}}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} |a_{1L}|^2 |a_{3R}|^2 \times \frac{1}{2} \times \frac{m}{\pi\hbar^2 k_3} =$$

$$= L \left(\frac{\hbar k_1}{m} |a_{1L}|^2 \right) \times \frac{16 k_1 \kappa_2^2 k_3 e^{-2\kappa_2 w_2}}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} |a_{3R}|^2. \quad (1.135)$$

Выражение, стоящее в скобках, представляет собой поток налетающих частиц. Нормировка на конечный объем дает $|a|^2 = 1/L$. В конечном счете получаем правильный коэффициент пропускания

$$t = \frac{j_t}{j_i} = \frac{16 k_1 \kappa_2^2 k_3 e^{-2\kappa_2 w_2}}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} |a_{3R}|^2.$$

сравнить это с точным выражением!

Если аппроксимировать волновые функции внутри барьера экспоненциальными зависимостями вида (1.114), то можно получить $T_{RL} = (\hbar^2 \kappa / m) b_R^* a_L$. Полный туннельный ток включает в себя также и переходы из правого электрода в левый, поэтому нужно добавить еще одно слагаемое

$$T = \frac{\hbar^2 \kappa}{m} \{ b_R^* a_L + a_L^* b_R \}. \quad (1.136)$$

Согласно золотому правилу Ферми, интенсивность переходов w_{12} из данного состояния 1 в ряд состояний 2 с плотностью $\rho(E)$, может быть вычислен как

$$w_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{12}|^2 \rho(E_2) \delta(E_2 - E - 1). \quad (1.137)$$

Обобщая рассмотренную задачу на систему многих частиц, можно записать гамильтониан полной задачи через операторы рождения и уничтожения

$$\hat{H} = \sum_k E_k a_k^+ a_k + W_R + \sum_k E_k b_k^+ b_k + W_L - \sum_k T_{kk} (a_k^+ b_k + b_k^+ a_k) + W_T. \quad (1.138)$$

2. Квазистационарные состояния в квантовой механике

2.1. Квазистационарные состояния в двухбарьерном потенциале

Рассматривая особенности прохождения волны через двухбарьерную структуру в разделе 1.2.5, мы показали, что $T_{11} \propto K$, где множитель K для идентичных барьеров может быть записан в виде

$$K = 2i \{ (a + ib) \beta \varepsilon + c \}, \quad |K|^2 = 4 e^{4\kappa w} \{ \beta^2 (E - E_n - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \},$$

где фактор β определен как

$$\sin(-\varphi_1 + \varphi_3 + \varphi_4) \approx \beta(E - E_n), \quad \beta = \left(\frac{d}{dE} \sin(-\varphi_1 + \varphi_3 + \varphi_4) \right)_0.$$

Возможны ли в такой системе (рис. 6) стационарные локализованные состояния, отвечающие условию $T_{11} = 0$ и локализации частицы в области между двумя барьерами? Очевидно, что для рассматриваемой структуры уравнение $T_{11} = 0$ не имеет действительных решений и такие состояния невозможны.

Тем не менее, формально условие $T_{11} = 0$ может быть выполнено при комплексных значениях энергии $E = E' - iE''$, где $E' = E_n + \varepsilon_0$ и $E'' = \Gamma/|\beta| \ll 1$. Характерной особенностью состояний с малой мнимой частью является явная зависимость волновой функции от времени

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-iE't/\hbar} e^{-E''t/\hbar}, \\ |\Psi(x, t)|^2 &= |\psi(x)|^2 e^{-2E''t/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Скорость распада таких состояний (интенсивность затухания волновой функции) определяется мнимой частью собственной энергии E'' . Однако, если $E'' \ll 1$, то распад может быть очень медленным и такие квазистационарные состояния могут быть долгоживущими. Если положить $E'' = \hbar\lambda/2$, то легко видеть

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 e^{-\lambda t}, \quad (2.2)$$

где λ – константа распада.

Вычислим скорость распада для двухбарьерной структуры в случае высоких симметричных барьеров, так что $\kappa_2 = \kappa_4 \rightarrow \infty$ и $\kappa_2 \rightarrow \infty$. Тогда

$$\beta \approx \left(\frac{d\varphi_1}{dE} \right)_0 = w_3 \left(\frac{dk_3}{dE} \right)_0 = w_3 \times \frac{m}{\hbar^2 k_3^{(0)}} \quad \text{или} \quad |\beta| = \frac{w_3}{\hbar v_0},$$

где $v_0 = \hbar k_3^{(0)}/m$ – средняя скорость частицы в пространстве между барьерами, и

$$\lambda = \frac{2}{\hbar} \frac{\Gamma}{|\beta|}$$

Как было показано ранее, ширина линии резонансного прохождения Γ равна половине прозрачности барьера t_0 на данном резонансном уровне, поэтому

$$\lambda = t_0 \times \frac{\hbar v_0}{\hbar w_3} = t_0 \times \frac{1}{\tau_0},$$

τ_0 – время движения между двумя соударениями со стенками, τ_0^{-1} – частота попыток. В конечном итоге получаем

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\psi(x)|^2 e^{-t_0 \times t / \tau_0}. \quad (2.3)$$

2.2. Квазистационарные состояния в центрально-симметричном потенциале

2.2.1. Стационарные состояния в прямоугольной сферической яме

Рассмотрим сферически-симметричную потенциальную яму

$$U_r(r) = \begin{cases} U_1 & \text{при } r < r_1 \\ U_2 & \text{при } r_1 < r < r_2 \\ U_3 & \text{при } r > r_2 \end{cases}$$

Будем рассматривать только сферически-симметричные решения (s -состояния) и рассчитаем спектр состояний частицы в трехмерном барьере $U_r(r)$. В этом случае стационарное уравнение Шрёдингера

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_r(r)) \psi = 0$$

для функций $\psi = \psi(r)$ принимает более простой вид

$$\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_r(r)) \psi = 0$$

Введем вспомогательную функцию $\psi(r) = \chi(r)/r$ и приведем это уравнение к одномерному виду

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_r(r)) \chi = 0$$

В кусочно-постоянном потенциале имеем

$$\frac{d^2 \chi_i}{dr^2} + k_i^2 \chi = 0$$

и для функции χ получаем те же самые решений следующего вида

$$\text{Область 1 } (r < r_1) : \quad \chi_1(x) = a_1 e^{ik_1 r} + b_1 e^{-ik_1 r},$$

$$\text{Область 2 } (r_1 < r < r_2) : \quad \chi_2(x) = a_2 e^{ik_2 r} + b_2 e^{-ik_2 r},$$

$$\text{Область 3 } (r > r_2) : \quad \chi_3(x) = a_3 e^{ik_3 r} + b_3 e^{-ik_3 r}.$$

Как обычно, постоянные должны обеспечивать непрерывность функций и первых производных при $r = r_1$ и $r = r_2$. Основное отличие между одномерными (x) и радиальными (r) задачами состоит в том, что существование дополнительной границы при $r = 0$ должно заменяться условием ограниченности решения ψ в начале координат или, другими словами, условием $\chi = 0$ при $r = 0$. Объединяя это условие ($a_1 = b_1$)

с условием излучения на бесконечности, получаем критерий существования локализованных состояний[†]

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ -a_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_3 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad T_{11} = -T_{21}.$$

Для простоты положим $U_1=U_3$ и $E < U_2$, тогда $k_1 = k_3 = k$, $k_2 = i\kappa$ и $\varphi = \arctan(\kappa/k)$.

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{4k_1k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1+k_2)r_1} e^{i(-k_2+k_3)r_2} + \right. \\ &+ \left. (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1-k_2)r_1} e^{i(+k_2-k_3)r_2} \right\} = \\ &= \frac{e^{-ikr_1+ik_2r_1}}{4ik\kappa} \times \left\{ (k + i\kappa)^2 e^{\kappa w} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa w} \right\} \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} T_{21} &= \frac{1}{4k_1k_2} \left\{ (k_1 - k_2)(k_2 + k_3) e^{i(+k_1+k_2)r_1} e^{i(-k_2+k_3)r_2} + \right. \\ &+ \left. (k_1 + k_2)(k_2 - k_3) e^{i(+k_1-k_2)r_1} e^{i(+k_2-k_3)r_2} \right\} = \\ &= \frac{e^{+ikr_1+ik_2r_1}}{4ik\kappa} \times \left\{ (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{\kappa w} - (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{-\kappa w} \right\}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Получаем условие существования локализованных состояний в следующем виде

$$\begin{aligned} e^{-ikr_1} \times \left\{ (k + i\kappa)^2 e^{\kappa w} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa w} \right\} = \\ = -e^{+ikr_1} \times \left\{ (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{\kappa w} - (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{-\kappa w} \right\}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

После деления обеих частей уравнения на $(k + i\kappa)$ и группировки слагаемых при $e^{\kappa w}$ и $e^{-\kappa w}$, получаем окончательное выражение для спектра локализованных состояний

$$\left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1 \right) = -e^{-2\kappa w} \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right) \times \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 - 1 \right). \quad (2.8)$$

При $\kappa w \gg 1$ и $e^{\kappa w} = 0$ с очевидностью получаем спектр стационарных состояний в сферической яме конечной высоты

$$\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 + 1 = 0 \quad (2.9)$$

2.2.2. Распад квазистационарных состояний в центрально-симметричном потенциале

Обсудим скорость распада квазистационарных состояний, обусловленных туннелированием частицы из центральной области в забарьерную область. При малой прозрачности барьера $e^{\kappa w} \ll 1$ можно приближенно решить уравнение (2.7) по теории возмущений по параметру $\Delta k = k - k_0$, где k_0 – волновой вектор стационарного состояния. Поскольку правая часть уравнения (2.7) – это малая величина, то в нее можно подставлять невозмущенное значение:

$$\begin{aligned} -e^{-2\kappa w} \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right) \times \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 - 1 \right) \rightarrow \\ \rightarrow -e^{-2\kappa_0 w} \left(\frac{k_0 - i\kappa_0}{k_0 + i\kappa_0} \right) \times \left(\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 - 1 \right) = 2e^{-2\kappa_0 w} \frac{(k_0 - i\kappa_0)^2}{k_0^2 + \kappa_0^2} \end{aligned} \quad (2.10)$$

[†] Например, для прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямы ($U(r) = U_1$ при $r < r_1$ и $U(r) = U_2$ при $r > r_1$) спектр собственных значений определяется может быть определен следующим образом

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{2k_1} (k_1 + k_2) e^{i(-k_1+k_2)r_1}; \quad T_{21} = \frac{1}{2k_1} (k_1 - k_2) e^{i(+k_1+k_2)r_1}; \\ k_1 (e^{ik_1 r_1} + e^{-ik_1 r_1}) - k_2 (e^{ik_1 r_1} - e^{-ik_1 r_1}) &= 0; \quad \text{или} \quad \frac{2}{k_1} \tan k_1 r_1 + 1 = 0; \end{aligned} \quad (2.4)$$

В левой части уравнения делаем разложение по Δk

$$\begin{aligned} \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right) &\simeq \left(\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 + 1\right)_0 + \frac{d}{dk} \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right)_0 (k - k_0) = \\ &= \frac{d}{dk} \left(\frac{\kappa}{k}\right)_0 \tan k_0 r_1 \Delta k + \frac{d}{dk} \left(\tan kr_1\right)_0 \left(\frac{\kappa_0}{k_0}\right) \Delta k \end{aligned} \quad (2.11)$$

Учтем, что

$$\frac{d\kappa}{dk} = -\frac{k}{\kappa}, \quad \left(\frac{d\kappa}{dk}\right)_0 = -\frac{k_0}{\kappa_0}, \quad \tan k_0 r_1 = -\frac{k_0}{\kappa_0}, \quad \frac{1}{\cos^2 k_0 r_1} = \frac{k_0^2 + \kappa_0^2}{\kappa_0^2}. \quad (2.12)$$

и получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right) &\simeq -\left(\frac{k_0(d\kappa/dk)_0 - \kappa_0}{k_0^2}\right) \left(\frac{k_0}{\kappa_0}\right) \Delta k + \left(\frac{r_1}{\cos^2 k_0 r_1}\right) \left(\frac{\kappa_0}{k_0}\right) \Delta k = \\ &= \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0^2} \Delta k + r_1 \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0} \Delta k = \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0^2} (1 + \kappa_0 r_1) \Delta k \end{aligned} \quad (2.13)$$

Приравнивая левую и правую части уравнения, получаем

$$\frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0^2} (1 + \kappa_0 r_1) \Delta k = 2 e^{-2\kappa_0 w} \frac{(k_0 - i\kappa_0)^2}{k_0^2 + \kappa_0^2}$$

$$\Delta k = \frac{2k_0 \kappa_0^2}{(1 + \kappa_0 r_1)} \frac{(k_0 - i\kappa_0)^2}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} e^{-2\kappa_0 w}$$

Полагая, что Δk имеет действительную, и мнимую части ($\Delta k = \Delta k' - i\Delta k''$), оценим мнимую компоненту

$$\Delta k'' = 4 e^{-2\kappa_0 w} \frac{k_0^2 \kappa_0^3}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} \frac{1}{(1 + \kappa_0 r_1)}.$$

Наличие мнимой компоненты волнового вектора приводит к мнимой добавке к энергии основного состояния (для простоты пренебрегаем малой поправкой порядка $(\Delta k'')^2$ к действительной части волнового вектора и соответственно энергии состояний)

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m} (k_0 - i\Delta k'')^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 - 2i \frac{\hbar^2}{2m} k_0 \Delta k'', \\ E'' &= \frac{\hbar^2}{m} k_0 \Delta k'' = \frac{4\hbar^2}{m} \frac{k_0^3 \kappa_0^3}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} \frac{e^{-2\kappa_0 w}}{(1 + \kappa_0 r_1)}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Как и ранее, введем константу распада λ согласно соотношению $E'' = \hbar\lambda/2$

$$\lambda = \frac{8\hbar k_0}{m} \frac{k_0^2 \kappa_0^3}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} \frac{e^{-2\kappa_0 w}}{(1 + \kappa_0 r_1)}.$$

Если барьер высокий ($\kappa_0 r_1 \gg 1$), то

$$\lambda \simeq \frac{8\hbar k_0}{m r_1} \frac{k_0^2 \kappa_0^2}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} e^{-2\kappa_0 w}. \quad (2.15)$$

Сравним это выражение (2.15) с выражением для проницаемости прямоугольного барьера в пределе барьера с малой прозрачностью (1.18)

$$t \simeq \frac{16k_1 \kappa_2^2 k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2 w_2}, \quad (2.16)$$

которое в нашем случае ($k_1 = k_3 = k_0$, $\kappa_2 = \kappa_0$) переходит

$$t_0 \simeq \frac{16k_0^2 \kappa_0^2}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} e^{-2\kappa_0 w}. \quad (2.17)$$

Отсюда следует, что константа распада определяется скоростью частицы $v_0 = \hbar k_0/m$ на резонансном уровне и проницаемостью барьера t_0 на этом уровне

$$\lambda = \frac{v_0}{2r_1} \times t_0.$$

Наконец заметим, что отношение $2r_1/v_0$ дает представление о типичном времени τ_0 , проводимой частицей в яме между двумя последовательными столкновениями со стенками:

$$\lambda = \frac{1}{\tau} \times t_0 \quad |\Psi(r, t)|^2 = |\psi(r)|^2 \exp(-t_0 \times t/\tau_0). \quad (2.18)$$

Эти формулы имеет очень простое и наглядное толкование. Скорость распада квазистационарного состояния оказывается пропорциональной частоте ударов частицы о стенки (частота попыток, attempt frequency), помноженной на функцию от прозрачности барьера.

2.2.3. Альфа-распад. Формула Гамова

Альфа-распадом называется вид радиоактивного распада ядра, при котором происходит испускание ионизированного ядра атома гелия (α -частицы, ${}^4_2\text{He}$). Альфа-распад обычно происходит в тяжелых ядрах, где велико электростатическое отталкивание между протонами.[†] Действительно, на малых расстояниях нуклоны удерживаются в ядре за счет сильного взаимодействия, которое быстро спадает при увеличении расстояния между протонами. В то же время кулоновское взаимодействие является, как известно, дальнедействующим, и потому способствует распаду тяжелого ядра. Таким образом, альфа-распад есть туннельный переход частицы через кулоновский барьер.

Для расчета скорости альфа-распада воспользуемся результатом, полученным в предыдущем разделе, где было показано, что скорость распада квазистационарных состояний в основном определяется прозрачностью барьера в одномерном случае. Вычислим коэффициент прохождения через потенциальный барьер

$$U(x) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } x < r_0 \\ A/x & \text{при } x > r_0 \end{cases}$$

где $A = (Z - 2)2e^2$, Z – заряд ядра. Согласно ВКБ-приближению, коэффициент прохождения равен

$$t = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx\right), \quad (2.19)$$

где $a = r_0$ и $b = A/E$ – классические точки поворота, $|p(x)| = \sqrt{2m}\sqrt{U(x) - E}$. Тогда

$$t = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \int_{r_0}^{A/E} \sqrt{\frac{A}{x} - E} dx\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \int_{r_0}^b \sqrt{\frac{b}{x} - 1} dx\right). \quad (2.20)$$

Вычисляя интеграл [†], получаем

$$\int_{r_0}^b \sqrt{\left(\frac{b}{x} - 1\right)} dx = b \arccos \sqrt{\frac{r_0}{b}} - b \sqrt{\frac{r_0}{b} - \frac{r_0^2}{b^2}}. \quad (2.21)$$

$$t = \exp\left(-\frac{2A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \left\{ \arccos \sqrt{\frac{Er_0}{A}} - \sqrt{\frac{Er_0}{A} \left(1 - \frac{Er_0}{A}\right)} \right\}\right). \quad (2.22)$$

Оценим время жизни квазистационарных состояний для частного случая $Er_0/A \ll 1$, соответствующего вылету низкоэнергетичных альфа-частиц в тяжелых ядрах. Поскольку время жизни квазистационарного состояния обратно пропорционально прозрачности барьера

$$t \simeq \exp\left(-\frac{2A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \times \frac{\pi}{2}\right), \quad (2.23)$$

[†] Примеры альфа-распада: ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th} + \alpha$, ${}^{241}_{95}\text{Am} \rightarrow {}^{237}_{93}\text{Np} + \alpha$, ${}^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + \alpha$.

[†] Следующий неопределенный интеграл легко может быть вычислен с помощью замены $x = b \cos^2 u$

$$\int \sqrt{\left(\frac{b}{x} - 1\right)} dx = -b \arccos \sqrt{\frac{r}{b}} + b \sqrt{\frac{r}{b} - \frac{r^2}{b^2}}.$$

для константы распада λ и для периода полураспада радиоактивного ядра $T_{1/2} = \ln 2/\lambda$ получаем

$$\lambda = \text{Const} \cdot \exp\left(-\frac{\pi A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right), \quad T_{1/2}^{-1} = \text{Const} \cdot \exp\left(-\frac{\pi A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}}\right), \quad (2.24)$$

$$\ln T_{1/2} = -\ln \text{Const} + \frac{\pi(Z-2)2e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \quad (2.25)$$

Полученная формула, выведенная Г. Гамовым в 1928 г., является одним из первых примеров использования квантовой механики для задач ядерной физики. Она качественно и количественно объясняет ранее эмпирическую зависимость времени полураспада от атомного номера

$$\ln T_{1/2} = -\text{const}_1 + \text{const}_2 \frac{Z}{\sqrt{E}}, \quad (2.26)$$

установленную в 1911 Гейгером и Натталом (Hans Geiger, John Mitchel Nuttal) для константы распада

$$\ln \lambda = -a_1 Z E^{-1/2} + a_2, \quad (2.27)$$

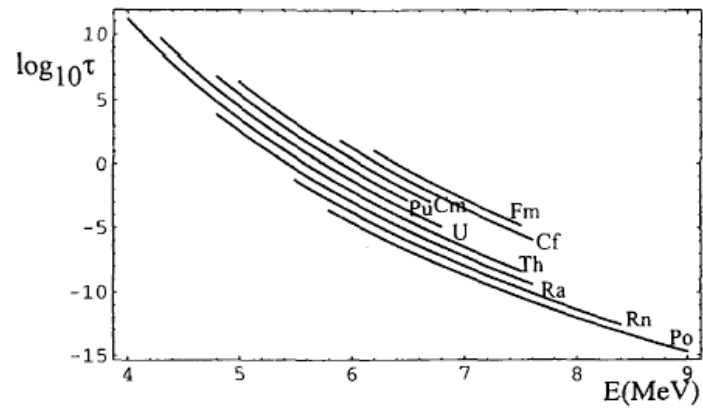
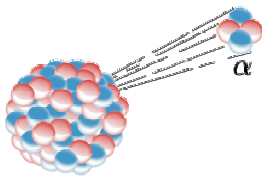


Рис. 19. Альфа-распад

Задачи

Коэффициенты отражения и прохождения

Задача 1 Показать, что амплитуды линейно-независимых решений стационарного уравнения Шрёдингера $\psi(x) = a e^{ikx} + b e^{-ikx}$ с энергией E в присутствии одномерного кусочно-постоянного потенциала вида

$$U_s(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x > x_1 \end{cases}$$

связаны следующим матричным соотношением

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{T} = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_2) e^{i(-k_1+k_2)x_1} & (k_1 - k_2) e^{i(-k_1-k_2)x_1} \\ (k_1 - k_2) e^{i(k_1+k_2)x_1} & (k_1 + k_2) e^{i(k_1-k_2)x_1} \end{pmatrix},$$

где $k_1 = \sqrt{2m(E - U_1)}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E - U_2)}/\hbar$. Задача рассмотрена в [1].

Задача 2 Показать, что амплитуды линейно-независимых решений стационарного уравнения Шрёдингера $\psi(x) = a e^{ikx} + b e^{-ikx}$ с энергией E в присутствии одномерного δ -образного потенциала вида

$$U_\delta(x) = S\delta(x_1) + \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_3 & \text{при } x > x_1 \end{cases}$$

связаны следующим матричным соотношением

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{T} = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_3 + is) e^{i(-k_1+k_3)x_1} & (k_1 - k_3 + is) e^{i(-k_1-k_3)x_1} \\ (k_1 - k_3 - is) e^{i(k_1+k_3)x_1} & (k_1 + k_3 - is) e^{i(k_1-k_3)x_1} \end{pmatrix},$$

где $k_1 = \sqrt{2m(E - U_1)}/\hbar$, $k_3 = \sqrt{2m(E - U_2)}/\hbar$, $s = 2mS/\hbar^2$.

Задача 3 С помощью формализма трансфер-матрицы получить выражение для трансфер-матрицы для случая наклонного падения частицы на потенциале $U_s(x)$ (см. задачу 1).

Задача 4 С помощью формализма трансфер-матрицы исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии частицы на потенциале $U_s(x)$ (см. задачу 1) от энергии налетающей волны E для случая нормального падения частицы на барьер. Исследовать асимптотические зависимости при $E \rightarrow U_2$ и $E \gg U_2$. Задача рассмотрена в [17].

Задача 5 * С помощью формализма трансфер-матрицы исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии частицы на потенциале $U_s(x)$ (см. задачу 1) от энергии налетающей волны E и угла падения θ для случая наклонного падения частицы на барьер.

Задача 6 С помощью формализма трансфер–матрицы исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии частицы на потенциальном барьере $U_b(x)$ следующего вида

$$U_b(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x_1 < x < x_2 \\ U_3 & \text{при } x > x_2 \end{cases}$$

от энергии налетающей волны E . Рассмотреть случай нормального падения частицы на барьер. Исследовать асимптотические зависимости при $E \ll U_2$, $E \rightarrow U_2$ и $E \gg U_2$ ($U_1 < U_2$). Задача частично рассмотрена в [1, 17].

Задача 7 * С помощью формализма трансфер–матрицы исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии частицы на потенциальном барьере $U_b(x)$ (см. задачу 6) от энергии налетающей волны E и угла падения θ для случая наклонного падения частицы на барьер.

Задача 8 Для потенциального барьера $U_\delta(x)$ (см. задачу 2) получить матрицу распространения из соответствующих выражений для трансфер–матрицы прямоугольного барьера U_b предельным переходом $U_2 \rightarrow \infty$, $w = x_2 - x_1 \rightarrow 0$, $S = U_2 \times w = \text{const}$.

Задача 9 Исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при рассеянии частицы на потенциальном барьере $U_\delta(x)$ (см. задачу 2) от энергии налетающей волны E для нормального падения частицы.

Задача 10 С помощью формализма трансфер–матрицы для потенциального барьера $U_{2\delta}(x)$ следующего вида

$$U_{2\delta}(x) = S_1\delta(x_1) + S_2\delta(x_1 - a)$$

исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при от энергии налетающей волны E (нормальное падение). Обсудить эффективность резонансного прохождения от отношения S_1/S_2 . Задача рассмотрена в [17].

Задача 11 Для двухбарьерной структуры $U_{2b}(x)$ следующего вида

$$U_{2b}(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x_1 < x < x_2 \\ U_3 & \text{при } x_2 < x < x_3 \\ U_4 & \text{при } x_3 < x < x_4 \\ U_5 & \text{при } x > x_4 \end{cases}$$

исследовать зависимость коэффициентов отражения и прохождения при от энергии налетающей волны E (нормальное падение). Качественно обсудить эффективность резонансного прохождения от отношения U_2/U_4 . Задача рассмотрена в [1].

Задача 12 Показать, что коэффициент прохождения для двухбарьерной структуры $U_{2-b}(x)$ (см. задачу 11) при $E \simeq E_n$ имеет лоренцевский вид

$$t(E) = \frac{\Gamma^2}{\beta^2(E - E_n)^2 + \Gamma^2},$$

где E_n – уровни квазистационарных состояний. Обсудить зависимость ширины линии резонансного прохождения Γ от параметров двухбарьерной структуры.

Задача 13 В квазиклассическом приближении рассчитать вероятность отражения и прохождения частицы от потенциального барьера $U(x)$. Задача рассмотрена в [18].

Задача 14 В квазиклассическом приближении рассчитать вероятность отражения и прохождения частицы от треугольного потенциального барьера $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $U(x) = U_0 - Fx$ при $x > 0$. Задача рассмотрена в [18, 17].

Спектр стационарных локализованных состояний

Задача 15 С помощью формализма матрицы распространения исследовать энергетический спектр E_n частицы, локализованной в асимметричной одномерной потенциальной яме конечной высоты

$$U_w(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x_1 < x < x_2 \\ U_3 & \text{при } x_2 < x < x_3 \end{cases}$$

Для случая симметричной потенциальной ямы $U_1 = U_3$ исследовать асимптотики $U_1 \gg U_2$ (яма с бесконечно высокими стенками) и $U_1 \rightarrow U_2$ (мелкая яма). Задача частично рассмотрена в [18, 17].

Задача 16 С помощью формализма матрицы распространения исследовать энергетический спектр E_n частицы, локализованной в одномерном потенциале вида $U_\delta = S\delta(x)$, $S < 0$. Задача частично рассмотрена в [17].

Задача 17 С помощью формализма матрицы распространения исследовать энергетический спектр E_n частицы в сферически-симметричном s -состоянии, локализованной в сферической потенциальной яме

$$U_r(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } r < r_1 \\ U_2 & \text{при } r > r_1 \end{cases}$$

Задача рассмотрена в [2].

Задача 18 С помощью формализма матрицы распространения исследовать энергетический спектр E_n частицы, локализованной в туннельно-связанных потенциальных ямах

$$U_{2w}(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < x_1 \\ U_2 & \text{при } x_1 < x < x_2 \\ U_3 & \text{при } x_2 < x < x_3 \\ U_4 & \text{при } x_3 < x < x_4 \\ \infty & \text{при } x > x_4 \end{cases}$$

Обсудить вопрос зависимости расщепления уровней от высоты (U_3) и ширины ($w_3 = x_3 - x_2$) разделяющего барьера.

Задача 19 В квазиклассическом приближении рассчитать уровни энергии частицы, локализованной в потенциальной яме $U(x)$. Задача рассмотрена в [18].

Задача 20 В квазиклассическом приближении рассчитать уровни энергии частицы в двух туннельно-связанных потенциальных ямах. Задача рассмотрена в [18].

Задача 21 Оценить период осцилляций электронной плотности в туннельно-связанных потенциальных ямах. Задача рассмотрена в [1].

Распад квазистационарных состояний

Задача 22 Показать, что для квантово-механической систем с условиям излучения ($\psi \propto e^{ikr}/r$ при $r \rightarrow \infty$, $k > 0$) невозможны стационарные состояния. Задача рассмотрена в [2].

Задача 23 Для двухбарьерной структуры $U_{2b}(x)$ (см. задачу 11) определить спектр существования квазистационарных состояний и скорость распада таких состояний.

Задача 24 С помощью формализма матрицы распространения исследовать энергетический спектр E_n частицы в сферически-симметричном s -состоянии, локализованной внутри сферического потенциального барьера

$$U_r(x) = \begin{cases} U_1 & \text{при } r < r_1 \\ U_2 & \text{при } r_1 < r < r_2 \\ U_3 & \text{при } r > r_2 \end{cases}$$

Вычислить скорость распада такого квазистационарного состояния. Задача рассмотрена в [2].

Задача 25 В квазиклассическом приближении вычислить проникаемость кулоновского барьера $U(x) = -U_0$ при $x < x_1$ и $U(x) = \alpha/x$ при $x > x_1$. Используя это решение оценить вероятность альфа-распада атома в основном s -состоянии. Задача рассмотрена в [18].

Список литературы

- [1] *Туннельные явления в твердых телах*, под ред. Э. Бурштейна и С. Лундквиста, М.: "Мир", 1973 г.
- [2] Д.И. Блохинцев, *Основы квантовой механики*, М.: Наука, 1976 г.
- [3] Е.Л. Вольф, *Принципы электронной туннельной спектроскопии*, Киев: Наукова Думка, 1990.
- [4] *Задачи по физике твердого тела*, под ред. Г.Дж. Голдсмида, М.: Наука, 1976 г.
- [5] Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, М.: Мир, 1966.
- [6] Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, М.: Мир, 1979 г.
- [7] Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, М., 1978 г.
- [8] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. V, М.: Физматлит, 2001.
- [9] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. III, М.: Физматлит, 2001.
- [10] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. IX, М.: Физматлит, 2001.
- [11] А.А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, М.: Наука, 1987.
- [12] В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин, *Курс теоретической физики*, т. 2, М.: Наука, 1971.

- [13] П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов, *Физика твердого тела*, Нижний Новгород, 1993 г.
- [14] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур*, Нижний Новгород, 2000 г.
- [15] А.И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, Физматлит, 1962 г.
- [16] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников, *Физика полупроводников*, М.
- [17] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков и В.И. Коган, *Задачи по квантовой механике*, М.: Наука, 1981.
- [18] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. III*, М.: Физматлит, 2001.
- [19] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. IX*, М.: Физматлит, 2001.
- [20] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Курс теоретической физики, т. X*, М.: Физматлит, 2001.
- [21] Дж. Слэтер, *Диэлектрики, полупроводники, металлы*, М.: Мир, 1969.
- [22] J. Bardeen, *Tunneling from a many-particle point of view*, Phys. Rev. Lett. vol. 6, pp. 57–59 (1961).