

Туннельные явления в нанофизике

Содержание

1	Введение	1
2	Одноэлектронные задачи туннелирования в одномерных и плоскостойких системах	2
2.1	Задача рассеяния в стационарной квантовой механике	2
2.2	Метод матрицы распространения. Точные решения	2
2.2.1	Формализм матрицы распространения	2
2.2.2	Коэффициенты отражения и прохождения. Отражение частицы от скачка потенциала	3
2.2.3	Расчет коэффициентов отражения и прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер	4
2.2.4	Стационарные уровни энергии в прямоугольной потенциальной яме конечной высоты	5
2.2.5	Резонансное туннелирование через двухбарьерную структуру	6
2.2.6	Волновые функции и спектр состояний частицы в связанных потенциальных ямах. Представление о времени туннелирования	11
2.2.7	Туннельный эффект в периодических структурах. Зонный спектр	12
2.3	Квазиклассическое описание туннелирования	14
2.3.1	Приближение Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна. Область применимости	15
2.3.2	Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Лангера	16
2.3.3	Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Свана	17
2.3.4	Прохождение частицы через потенциальный барьер	20
2.3.5	Спектр состояний частицы, локализованной в потенциальной яме. Формула квантования Бора-Зоммерфельда	22
2.3.6	Расчет спектров состояний для частицы, локализованной в связанных потенциальных ямах	22
3	Квазистационарные состояния в квантовой механике	23
3.1	Одномерные резонансные состояния	23
3.2	Резонансные состояния в центрально-симметричном потенциале	23
3.2.1	Распад квазистационарных состояний в центрально-симметричном потенциале	25
3.2.2	Альфа-распад. Формула Гамова	26

1. Введение

Туннелирование (tunneling) есть преодоление микрочастицей потенциального барьера в случае, когда ее полная энергия E оказывается меньше высоты этого барьера. Туннельный эффект – явление исключительно квантовой природы, невозможное в классической механике. Действительно, в квантовой механике начальное состояние, приготовленное в одной классически разрешенной области

конфигурационного пространства имеет ненулевую вероятность через классически запрещенную область, в которой волновой вектор становится чисто мнимым, проникнуть в другую разрешенную часть пространства. Аналогом туннельного эффекта в волновой оптике может служить проникновение световой волны внутрь отражающей среды (на расстояния порядка длины световой волны) в условиях, когда, с точки зрения геометрической оптики, происходит полное внутреннее отражение.

2. 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 .

2.1. Задача рассеяния в стационарной квантовой механике

2.2. Метод матрицы распространения. Точные решения

2.2.1. 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 $\hat{H} = (2m)^{-1}\Delta + U(x)$ – гамильтониан системы, $U(x) = e\varphi(x)$ – потенциальная энергия частицы.

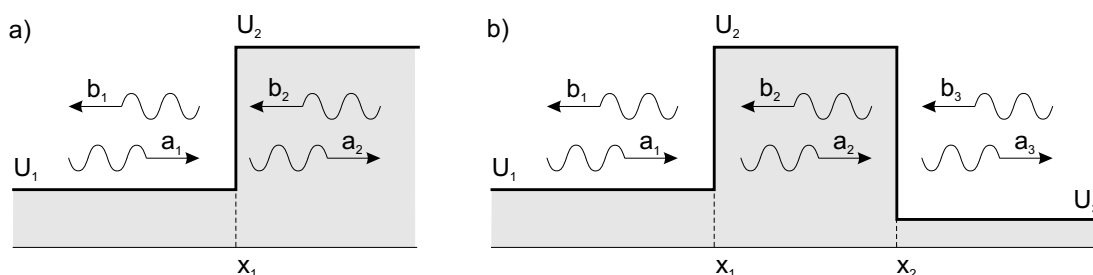


Рис. 1. Постановка задачи о рассеянии частицы на одномерном потенциале: (а) – скачок потенциала, (б) – потенциальный барьер.

Рассмотрим простейший случай нормального падения частицы на одномерный кусочно-постоянный потенциальный барьер $U(x)$: $U_s(x) = U_1$ при $x < x_1$ и $U(x) = U_2$ при $x > x_1$ (рис. 1). Одноэлектронная волновая функция $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x)$ должна удовлетворять стационарному уравнению Шрёдингера следующего вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi. \quad (2.1)$$

В каждой из областей 1 и 2, в которых потенциал $U(x)$ не зависит от координаты, уравнение (2.1) принимает вид дифференциального уравнения второго порядка с коэффициентами, независимыми от координаты

$$\text{Область 1 } (x < x_1) : \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \quad (2.2)$$

$$\text{Область 2 } (x > x_1) : \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0, \quad (2.3)$$

где $k_i = \sqrt{2m(E - U_i)/\hbar^2}$, $i = \{1, 2\}$ – волновые вектора в областях 1 и 2. Хорошо известно, что общим решением одномерного дифференциального уравнения $\psi'' + k^2\psi = 0$ является линейная комбинация экспоненциально нарастающих и убывающих решений вида $a e^{ikx} + b e^{-ikx}$. Предполагая, что общие решения уравнений (2.2) и (2.3) в областях 1 и 2 могут быть представлены в следующем виде

$$\text{Область 1 } (x < x_1) : \quad \psi_1(x) = a_1 e^{ik_1x} + b_1 e^{-ik_1x},$$

$$\text{Область 2 } (x > x_1) : \quad \psi_2(x) = a_2 e^{ik_2x} + b_1 e^{-ik_2x},$$

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:

$$a_1 e^{ik_1x_1} + b_1 e^{-ik_1x_1} = a_2 e^{ik_2x_1} + b_2 e^{-ik_2x_1},$$

$$ik_1 a_1 e^{ik_1x_1} - ik_1 b_1 e^{-ik_1x_1} = ik_2 a_2 e^{ik_2x_1} - ik_2 b_2 e^{-ik_2x_1}.$$

Соотношения (2.4) и (2.4) удобно представить в матричном виде

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} (k_1 + k_2) e^{i(-k_1+k_2)x_1}, & (k_1 - k_2) e^{i(-k_1-k_2)x_1} \\ (k_1 - k_2) e^{i(k_1+k_2)x_1}, & (k_1 + k_2) e^{i(k_1-k_2)x_1} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

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.

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

Рассмотрим процесс рассеяния частицы, движущейся из точки $x = -\infty$, на потенциальном барьере $U_s(x)$. Для описания такого процесса по принципу причинности следует положить $b_2 = 0$, что соответствует отсутствию источников на бесконечности. 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. Связь между амплитудами волн дается уравнением (2.4), которое принимает следующий вид

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

Таким образом, элементы T_{11} и T_{21} матрицы распространения определяют амплитуды отраженной и прошедшей волн: $b_1 = a_1 T_{21}/T_{11}$ и $a_2 = a_1/T_{11}$. Определим

$$r = \left| \frac{b_1}{a_1} \right|^2 = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2, \quad t = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{a_2}{a_1} \right|^2 = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{1}{T_{11}} \right|^2. \quad (2.5)$$

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

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

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

$$r = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2, \quad t = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2. \quad (2.6)$$

Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ и коэффициент прохождения t в зависимости от энергии E представлены на рис. 3. Следует отметить, что осцилляции волновой функции перед потенциальным барьером связаны с интерференцией налетающей и отраженной волн, что очевидно приводит к формированию стоячей волны, длина которой зависит от энергии падающей частицы. Обратим внимание, что даже при условии $E > U_2$ (надбарьерное прохождение) коэффициент прохождения оказывается меньшим единицы и лишь асимптотически при $E \rightarrow \infty$ выходит на предельное значение: $t \sim 1 - (U_2/E)^2$.

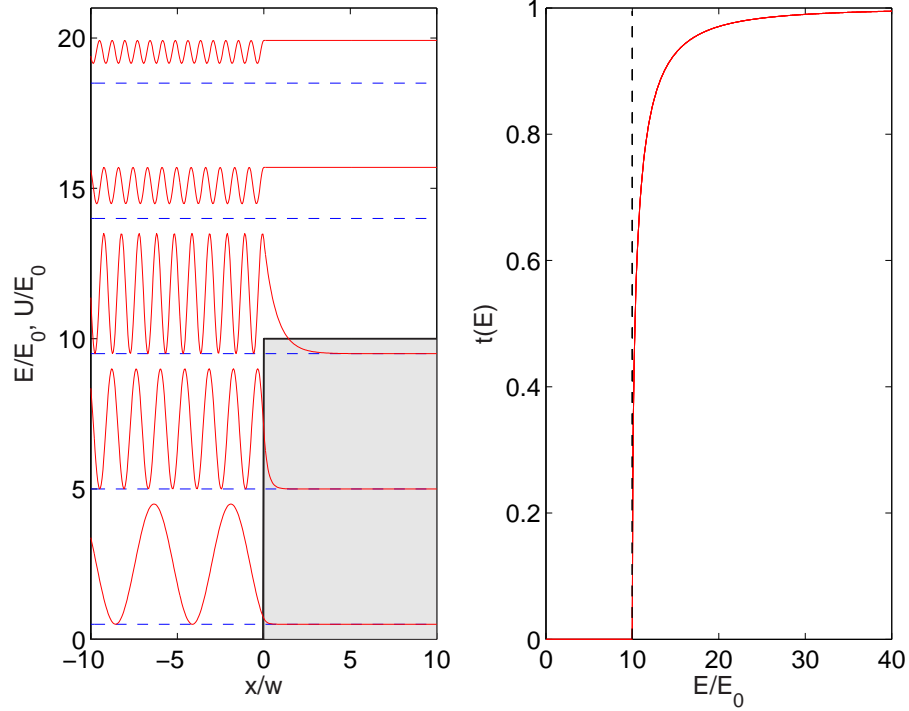


Рис. 2. Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ в зависимости от энергии E налетающей частицы (пунктирные линии). Коэффициент прохождения t как функция энергии E , $E_0 = \hbar^2/(2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2 = 10E_0$. Осцилляции плотности электрона при $x < 0$ связаны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

2.2.3. 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 (2.4), 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 определяет коэффициентом T_{11} результирующей матрицы распространения, который в данном случае равен

$$T_{11} = T_{11}^{(1)}T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{21}^{(2)} = \frac{1}{2k_1} \frac{1}{2k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2+k_3)x_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(k_2+k_3)x_2} \right\}. \quad (2.7)$$

Выражение (2.10) справедливо при любом соотношении между энергией частицы и высотой потенциала. Однако, более детально обсудим случай подбарьерного прохождения, когда $E < U_2$ и волновой вектор $k_2 = \sqrt{2m(E - U_2)}/\hbar^2$ оказывается мнимым: $k_2 = i\kappa_2$. Введем для удобства ширину барьера $w_2 = x_2 - x_1$ и фазовые множители $\varphi_1 = \arctg(\kappa_2/k_1)$ и $\varphi_3 = \arctg(\kappa_2/k_3)$. Тогда выражение (2.10) может быть переписано в более компактном виде†

$$T_{11} = \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2} \sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{ik_3x_2 - ik_1x_1} \left\{ e^{i\varphi_1 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_1 - i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2} \right\}. \quad (2.8)$$

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

$$T_{11} = \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2} \sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{ik_3x_2 - ik_1x_1} e^{i\varphi_1 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2},$$

$$t = \frac{k_3}{k_1} \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{16k_1\kappa_2^2 k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2 w_2}. \quad (2.9)$$

Из анализа формулы (3.11) 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;
- Энергетическая зависимость коэффициента прохождения в значительной мере определяется экспоненциальным множителем: $t(E) \propto \exp\left(-2w_2 \sqrt{2m(U_2 - E)}/\hbar^2\right)$;

2.2.4. 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 $x = x_2$. Поскольку локализованному состоянию соответствует такое распределение волновой функции, при котором отсутствуют волны, движущиеся по направлению к потенциальной яме (т.е. решения, нарастающие на бесконечности, $a_1 = b_2 = 0$), то 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. 4, результирующая матрица распространения \hat{T} является произведением двух матриц $\hat{T}^{(1)}\hat{T}^{(2)}$. Вычислим элемент T_{11} и найдем условия, при которых он обращается в нуль

$$T_{11} = T_{11}^{(1)}T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{21}^{(2)} = \frac{1}{2k_1} \frac{1}{2k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2+k_3)x_2} + (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(k_2+k_3)x_2} \right\}. \quad (2.10)$$

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

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

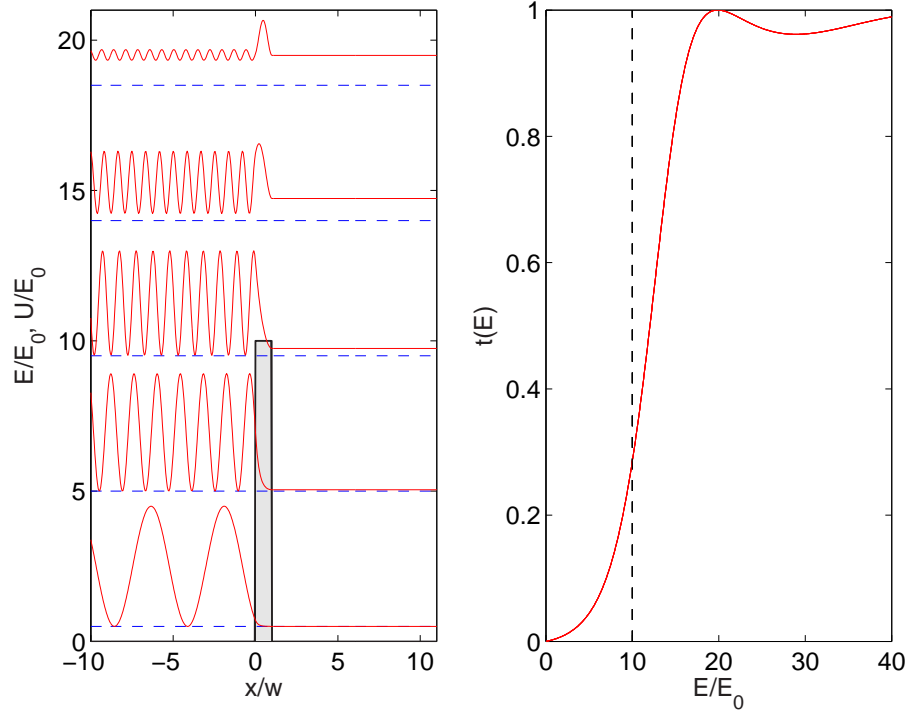


Рис. 3. Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ в зависимости от энергии E налетающей частицы (пунктирные линии). Амплитуда налетающей волны a_1 принята равной единице Коэффициент прохождения t как функция энергии E , $E_0 = \hbar^2/(2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2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

к следующему уравнению

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

$$k_2 w_2 = \varphi_1 + \varphi_3 + \pi n = \arctg(k_2/\kappa_1) + \arctg(k_2/\kappa_3) + \pi n. \quad (2.11)$$

Легко видеть, что для потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками ($U_{1,3} \rightarrow \infty$ и $\varphi_{1,3} \rightarrow 0$), мы получаем классическое выражение для энергетического спектра $k_2 w_2 = \pi n$ или $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2mw^2)$. Заметим, что условие $k_2 w_2 = \pi n$ соответствует квантованию числа полуволин на ширине ямы. Типичные распределения плотности электронов для потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты показаны на рис. 4. 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.

2.2.5. Резонансное туннелирование через двухбарьерную структуру

Рассмотрим задачу о туннелировании частицы через двухбарьерную структуру (рис. 5). 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:

$$a_1 = T_{11} a_5, \quad T_{11} = A \times B + C \times D,$$

$$A = \left\{ T_{11}^{(1)} T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)} T_{21}^{(2)} \right\}, \quad B = \left\{ T_{11}^{(3)} T_{11}^{(4)} + T_{12}^{(3)} T_{21}^{(4)} \right\},$$

$$C = \left\{ T_{11}^{(1)} T_{12}^{(2)} + T_{12}^{(1)} T_{22}^{(2)} \right\}, \quad D = \left\{ T_{21}^{(3)} T_{11}^{(4)} + T_{22}^{(3)} T_{21}^{(4)} \right\}. \quad (2.12)$$

Пусть высота барьеров превышает энергию частицы, $E < U_2, U_4$. Тогда волновые вектора в областях 2 и

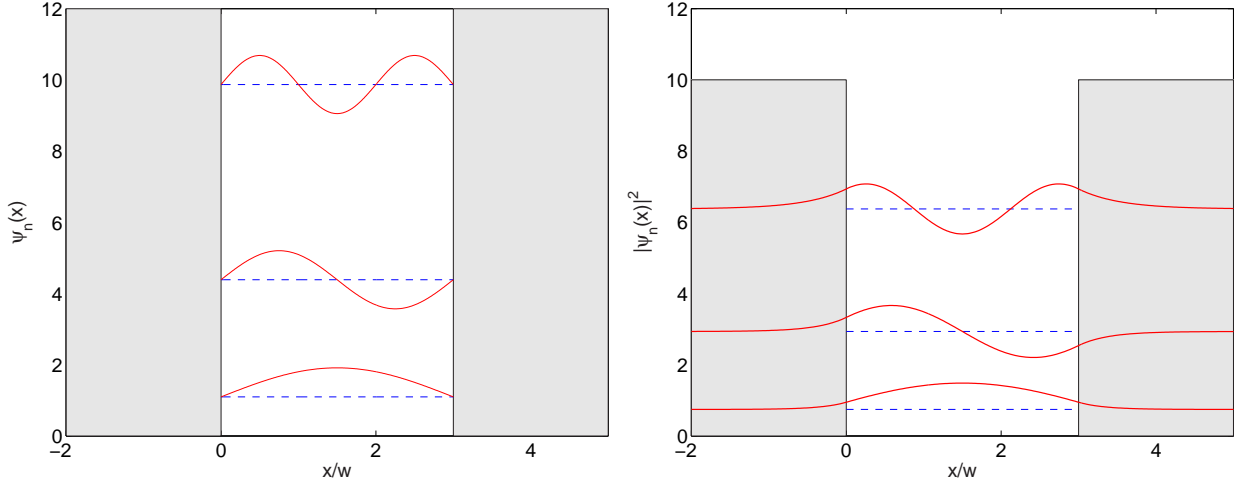


Рис. 4. Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками (слева) и с яме со стенками конечной высоты. $E_0 = \hbar^2/(2mw^2)$ – масштаб энергий, w – масштаб длины, высота барьера $U_2 = 10E_0$.

4 становятся мнимыми: $k_{2,4} = ik_{2,4}$, $\kappa_{2,4} = \sqrt{2m(U_{2,4} - E)/\hbar^2}$. 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 $\varphi_5 = \arctg(\kappa_4/k_5)$. Подробно распишем структуру каждого из слагаемых в выражении (2.12)

$$\begin{aligned}
A &= T_{11}^{(1)}T_{11}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{21}^{(2)} = \frac{(k_1 + k_2)(k_2 + k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2+k_3)x_2} + \\
&\quad + \frac{(k_1 - k_2)(k_2 - k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(k_2+k_3)x_2} = \\
&= \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}\sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{ik_3x_2 - ik_1x_1} \times \{e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\}. \tag{2.13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B &= T_{11}^{(3)}T_{11}^{(4)} + T_{12}^{(3)}T_{21}^{(4)} = \frac{(k_3 + k_4)(k_4 + k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(-k_3+k_4)x_3} e^{i(-k_4+k_5)x_4} + \\
&\quad + \frac{(k_3 - k_4)(k_4 - k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(-k_3-k_4)x_3} e^{i(k_4+k_5)x_4} = \\
&= \frac{\sqrt{k_3^2 + \kappa_4^2}\sqrt{\kappa_4^2 + k_5^2}}{4ik_3\kappa_4} e^{ik_5x_4 - ik_3x_3} \times \{e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\}. \tag{2.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C &= T_{11}^{(1)}T_{12}^{(2)} + T_{12}^{(1)}T_{22}^{(2)} = \frac{(k_1 + k_2)(k_2 - k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1+k_2)x_1} e^{i(-k_2-k_3)x_2} + \\
&\quad + \frac{(k_1 - k_2)(k_2 + k_3)}{2k_1 2k_2} e^{i(-k_1-k_2)x_1} e^{i(k_2-k_3)x_2} = \\
&= \frac{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}\sqrt{\kappa_2^2 + k_3^2}}{4ik_1\kappa_2} e^{-ik_3x_2 - ik_1x_1} \times \{-e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} + e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2}\}. \tag{2.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D &= T_{21}^{(3)}T_{11}^{(4)} + T_{22}^{(3)}T_{21}^{(4)} = \frac{(k_3 - k_4)(k_4 + k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(k_3+k_4)x_3} e^{i(-k_4+k_5)x_4} + \\
&\quad + \frac{(k_3 + k_4)(k_4 - k_5)}{2k_3 2k_4} e^{i(k_3-k_4)x_3} e^{i(k_4+k_5)x_4} = \\
&= \frac{\sqrt{k_3^2 + \kappa_4^2}\sqrt{\kappa_4^2 + k_5^2}}{4ik_3\kappa_4} e^{ik_5x_4 + ik_3x_3} \times \{e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{+i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4}\}. \tag{2.16}
\end{aligned}$$

Попарно перемножим выражения (2.13)–(2.16) и получим следующее выражение для коэффициента прохождения

$$|T_{11}|^2 = \left| A \times B + C \times D \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)(k_3^2 + \kappa_4^2)(\kappa_4^2 + k_5^2)}{256 k_1^2 \kappa_2^2 k_3^2 \kappa_4^2}, \quad \text{где } |K|^2 \quad (2.17)$$

$$K = e^{-ik_3 w_3} \left\{ e^{i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} - e^{-i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2} \right\} \left\{ e^{i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{-i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4} \right\} + \\ + e^{+ik_3 w_3} \left\{ -e^{i\varphi_2 - i\varphi_3} e^{\kappa_2 w_2} + e^{-i\varphi_2 + i\varphi_3} e^{-\kappa_2 w_2} \right\} \left\{ e^{-i\varphi_4 + i\varphi_5} e^{\kappa_4 w_4} - e^{+i\varphi_4 - i\varphi_5} e^{-\kappa_4 w_4} \right\} \quad (2.18)$$

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

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

Таким образом, получаем коэффициент прохождения двухбарьерной структуры в общем случае

$$t = \frac{k_5}{k_1} \frac{1}{|T_{11}|^2} = \frac{256 k_1 \kappa_2^2 k_3^2 \kappa_4^2 k_5}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)(k_3^2 + \kappa_4^2)(\kappa_4^2 + k_5^2)} \frac{1}{|K|^2}, \quad (2.19)$$

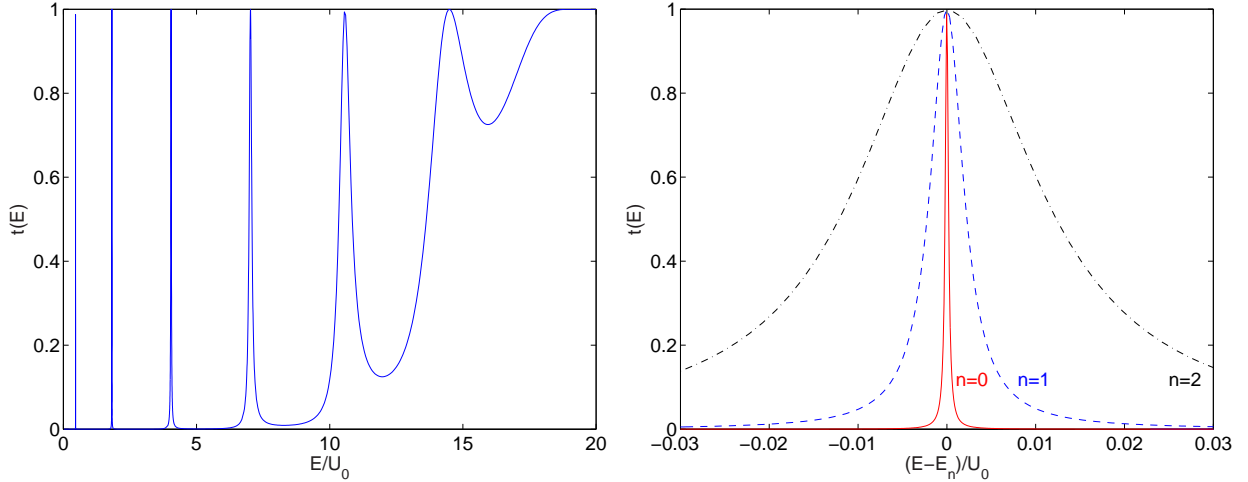


Рис. 5. (а) Коэффициент прохождения $t(E)$ через двухбарьерную структуру с идентичными барьерами ($w_2 = w_4 = w$, $U_2 = U_4 = 10U_0$); (б) Лоренцевская форма линии прохождения для трех низших квазистационарных уровней, E_n – квазистационарные уровни энергии. Для представления результатов в качестве масштабов длины и энергии выбраны w и $U_0 = \hbar^2/(2mw^2)$.

Легко видеть, что прозрачность двухбарьерной структуры в значительной мере определяется множителем $|K|^2$, который стоит в знаменателе выражения (2.19). 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

$$\varphi_{1,n} = k_3 w_3 = \varphi_3 + \varphi_4 + \pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

описывает квазистационарные состояния частицы с энергией $E_n = U_3 + \hbar^2 k_{3,n}^2/2m$ в потенциальной яме конечной высоты [сравните с выражением (2.11)]. Вблизи резонансных уровней ($E \simeq E_n$) пропускание

определяется следующими слагаемыми в выражении (2.19) и пропорциональными отношению прозрачностей отдельных барьеров: $t \propto e^{2\kappa_4 w_4}/e^{2\kappa_2 w_2}$ (если $\kappa_2 w_2 \gg \kappa_4 w_4$) 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 пропускания $t \simeq 1$ даже для барьеров с малой прозрачностью. Это явление получило название резонансного туннелирования. Типичная зависимость коэффициента пропускания от энергии представлена на рис. 5.

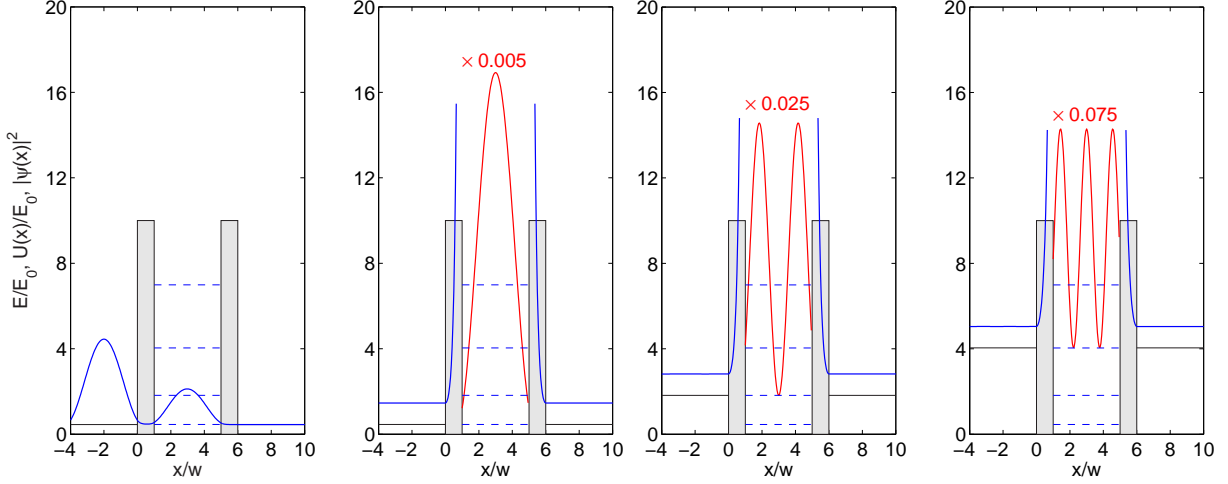


Рис. 6. Структура волновых функций $|\psi(x)|^2$ в системе с двумя идентичными прямоугольными барьерами для нескольких значений энергии E :

- (а) вблизи первого резонансного уровня, $E \simeq E_0$, осцилляции слева от барьера свидетельствуют о сильном отражении и формировании стоячей волны;
- (б) энергия частицы точно равна энергии первого резонансного уровня, $E = E_0$, амплитуда прошедшей волны равна амплитуде падающей волны;
- (с) и (д) 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. (б), (с) и (д) $|\psi(x)|^2$ в области 3 умножена на 0.005, 0.025 и 0.075, соответственно.

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

$$K = 2i \left\{ (a + ib) \beta\varepsilon + c \right\}, \quad a = e^{2\kappa w} \cos 2\varphi_2, \quad b = e^{2\kappa w} \sin 2\varphi_2, \quad c = 2 \sin \varphi_1. \quad (2.20)$$

† Мы пользуемся следующими легко проверяемыми соотношениями $\cos 2\varphi_2 = 2 \cos^2 \varphi_2 - 1 = 2[1 + \text{tg}^2 \arctg(\kappa_2/k_1)]^{-1} - 1 = (\kappa_1^2 - \kappa_2^2)/(\kappa_1^2 + \kappa_2^2)$, $\sin 2\varphi_2 = 2k_1\kappa_2/(k_1^2 + \kappa_2^2)$, $\sin \varphi_1 \simeq \sin 2\varphi_3 = 2k_3\kappa_2/(k_3^2 + \kappa_2^2)$, $a^2 + b^2 = e^{4\kappa w}$, $b/(a^2 + b^2) = e^{-2\kappa w} \sin 2\varphi_2$.

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

Вводя положение оптимальной энергии и ширину линии пропускания

$$\varepsilon_0 = -\frac{1}{\beta} \frac{ac}{(a^2 + b^2)} = -\frac{a}{b} \times \frac{\Gamma}{\beta}, \quad \Gamma = \frac{bc}{(a^2 + b^2)}, \quad |K|^2 = 4 e^{4\kappa w} \left\{ \beta (\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \right\}$$

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

$$t = \frac{256 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{1}{4} \frac{e^{-4\kappa w}}{\left\{ \beta (\varepsilon - \varepsilon_0)^2 + \Gamma^2 \right\}} \quad (2.21)$$

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

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{bc}{(a^2 + b^2)} = e^{-4\kappa w} \times e^{2\kappa w} \sin 2\varphi_2 \times 2 \sin \varphi_1 = 8 e^{-2\kappa w} \frac{k\kappa^2 k_3}{(k^2 + \kappa^2)(\kappa^2 + k_3^2)} = \\ &= 8 \frac{\sqrt{(E - U_1)(E - U_3)}(U_2 - E)}{(U_2 - U_1)(U_2 - U_3)} e^{-2\kappa w}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Отметим, что параметр Γ (ширина линии резонансного прохождения) равен половине прозрачности одиночного барьера [сравнить (3.11) и (2.22)].

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

$$\begin{aligned} t &= \frac{64 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{e^{-4\kappa w}}{\Gamma^2} = \\ &= \frac{64 k^2 \kappa^4 k_3^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2} \times \frac{e^{-4\kappa w}}{64 e^{-4\kappa w}} \times \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 (\kappa^2 + k_3^2)^2}{k^2 \kappa^4 k_3^2} = 1. \end{aligned} \quad (2.23)$$

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 $E \simeq E_n + \varepsilon_0$

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

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 как ширину линии 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. 7. 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.

Попутно отметим, что для рассматриваемой структуры уравнение $K = 0$ не имеет действительных решений, иначе коэффициент прохождения превышал бы единицу. Это означает, что в системе невозможны стационарные состояния, в которых частица локализована в области между двумя барьерами. Формально условие $K = 0$ может быть выполнено при комплексных значениях энергии $E = E' - iE''$, где $E' = E_n + \varepsilon_0$ и $E'' = \Gamma/\beta$ и $\Gamma \ll 1$, что соответствует квазистационарным состояниям.

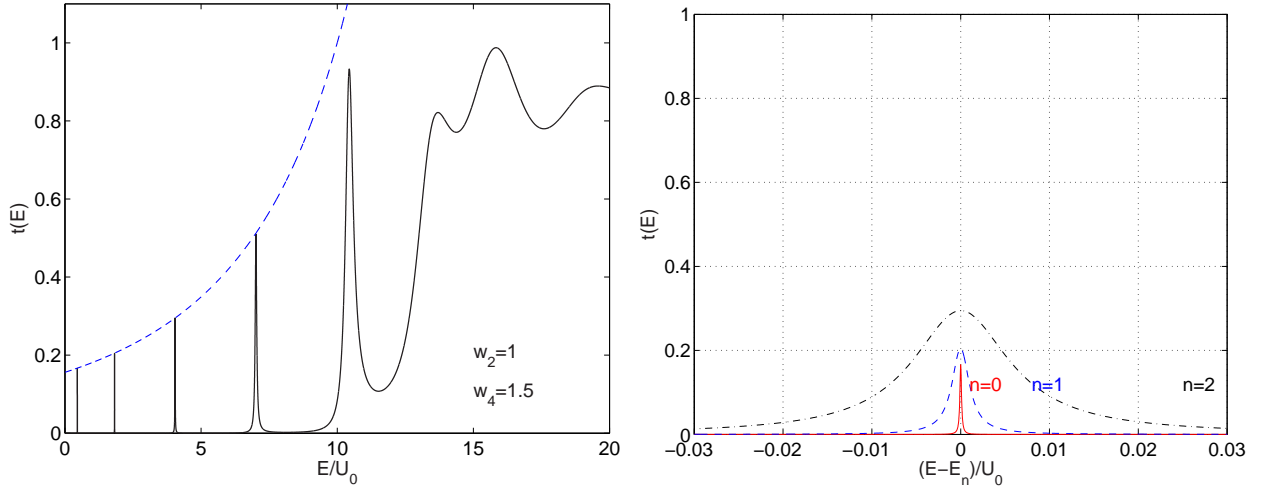


Рис. 7. (а) Коэффициент прохождения $t(E)$ через двухбарьерную структуру с двумя барьерами одинаковой высоты и разной ширины ($w_2 = w$, $w_4 = 1.5w$, $U_2 = U_4 = 10U_0$); (б) Лоренцевская форма линии прохождения для трех низших квазистационарных уровней, E_n – квазистационарные уровни энергии. Для представления результатов в качестве масштабов длины и энергии выбраны w и $U_0 = \hbar^2/(2mw^2)$.

Скорость распада таких состояний (интенсивность затухания волновой функции) определяется мнимой частью собственной энергии E''

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

Иными словами, скорость распада квазистационарных состояний пропорциональна ширине линии резонансного прохождения, которая определяется прозрачностью барьеров.

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

Используем выражения (2.13)–(2.16) для расчета спектра энергий в туннельно-связанных потенциальных ямах (рис. 9). Как было показано ранее, стационарные состояния частицы, локализованной в одномерном потенциале, соответствуют условию $T_{11} = 0$. Обсудим простейший случай двух связанных идентичных ям, причем высота барьеров в 1 и 5 областях предполагается бесконечно высокой. Пусть высота разделяющего барьера превышает энергию частицы, $E < U_3$ и волновые вектора в областях 1, 3 и 4 становятся мнимыми: $k_{1,3,5} = ik_{1,3,5}$, $\kappa_{1,5} = \sqrt{2m(U_{1,5} - E)/\hbar^2} \rightarrow \infty$, $\kappa_3 = \sqrt{2m(U_3 - E)/\hbar^2}$. 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 $\varphi_2 = \arctg(\kappa_1/k_2) \rightarrow \pi/2$, $\varphi_3 = \arctg(\kappa_3/k_2)$, $\varphi_4 = \arctg(\kappa_3/k_4)$ и $\varphi_5 = \arctg(\kappa_5/k_3) \rightarrow \pi/2$. Условие $T_{11} = 0$ может быть записано как

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

Если ямы одинаковые, то данное выражение может быть упрощено

$$\left\{ e^{i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{-i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2} \right\}^2 = e^{-2\kappa_3 w_3} \left\{ e^{-i\varphi_3} e^{-ik_2 w_2} - e^{i\varphi_3} e^{+ik_2 w_2} \right\}^2.$$

$$\sin(\varphi_3 - k_2 w_2) = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin(\varphi_3 - k_2 w_2). \quad (2.24)$$

Предположим, что потенциальные ямы разделены барьером с малой прозрачностью ($e^{-\kappa_3 w_3} \ll 1$), что позволяет применить теорию возмущения для решения уравнения (2.26). В нулевом порядке теории

возмущений получаем очевидное уравнение $\sin(\varphi_3^{(0)} - k_2^{(0)}w_2) = 0$, которое определяет спектр энергий в потенциальной яме конечной высоты: $k_2^{(0)}w_2 = \varphi_3^{(0)} + \pi n$. Поправка $\delta k_2 = k_2 - k_2^{(0)}$ может быть вычислена следующим образом

$$\sin(\varphi_3 - k_2w_2) = \sin(\varphi_3^{(0)} - k_2^{(0)}w_2 - \delta k_2 w_2) = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin 2\varphi_3^{(0)}, \quad (2.25)$$

$$\delta k_2 w_2 = \pm e^{-\kappa_3 w_3} \sin 2\varphi_3^{(0)}. \quad (2.26)$$

Таким образом, 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.

Волновые функции основного и высших возбужденных состояний представлены на рис. 9. 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:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{2} [\Psi_0(x, t) + \Psi_1(x, t)] = \\ &= \frac{1}{2} [\psi_{II}(x) + \psi_{IV}(x)] \times e^{-iE_0 t/\hbar} e^{+i\delta E_0 t/\hbar} + \frac{1}{2} [\psi_{II}(x) - \psi_{IV}(x)] \times e^{-iE_0 t/\hbar} e^{-i\delta E_0 t/\hbar} = \\ &= e^{-iE_0 t/\hbar} \times \left\{ \psi_{II}(x) \cos\left(\frac{\delta E_0 t}{\hbar}\right) + i \psi_{IV}(x) \sin\left(\frac{\delta E_0 t}{\hbar}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

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

$$\omega = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta E_0}{\hbar} \propto e^{-2\kappa_2 w_2}. \quad (2.28)$$

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.

2.2.7. 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. 9.

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 ($k_4 = k_2$)

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

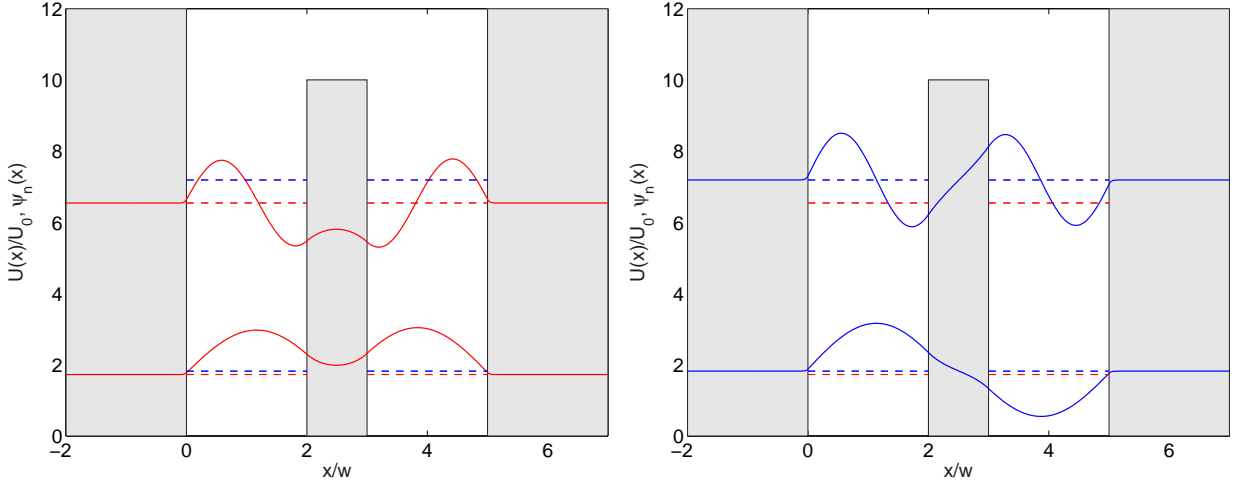


Рис. 8. Структура нормированных волновых функций $\psi_n(x)$ в системе с двумя идентичными прямоугольными ямами.

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

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = e^{-iKL} \begin{pmatrix} e^{ik_2L} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_4 \\ b_4 \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

Объединяя соотношения (2.29) и (2.30), получаем условие существования периодических решений

$$\det \begin{pmatrix} T_{11} - e^{ik_2L - iKL} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} - e^{-ik_2L - iKL} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.31)$$

или

$$T_{11} T_{22} - T_{11} e^{-ik_2L - iKL} - T_{22} e^{ik_2L - iKL} + e^{-2iKL} - T_{12} T_{21} = 0. \quad (2.32)$$

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

$$\begin{aligned}
 T_{11} T_{22} &= 1 + \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2 k_3^2} \sin^2(k_3 b), \\
 T_{11} e^{-ik_2L - iKL} &= \frac{e^{-ik_2L - iKL + ik_2b}}{4k_2^2 k_3^2} \{ (k_2 + k_3)^2 e^{-ik_3b} - (k_2 - k_3)^2 e^{+ik_3b} \} = \\
 &= \frac{e^{-ik_2a - iKL}}{4k_2 k_3} \{ 4k_2 k_3 \cos(k_3 b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3 b) \}, \\
 T_{22} e^{ik_2L - iKL} &= \frac{e^{ik_2L - iKL - ik_2b}}{4k_2 k_3} \{ (k_2 + k_3)^2 e^{ik_3b} - (k_2 - k_3)^2 e^{-ik_3b} \} =
 \end{aligned}$$

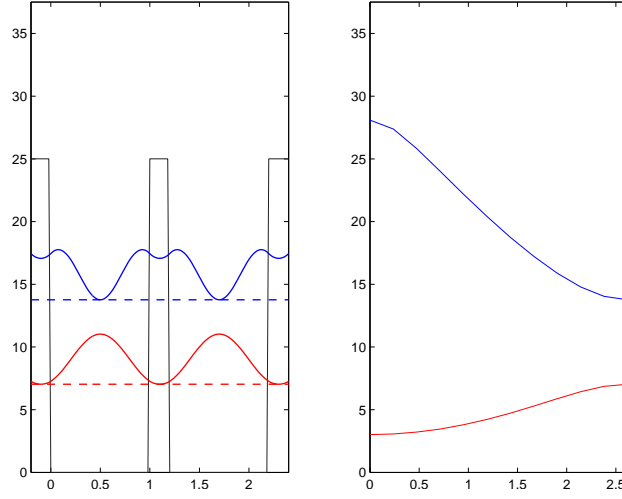


Рис. 9. Волновые функции и зонный спектр в задаче Кронига-Пенни.

$$\frac{e^{ik_2a-iKL}}{4k_2k_3} \{4k_2k_3 \cos(k_3b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3b)\},$$

$$T_{12} T_{21} = \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2k_3^2} \sin^2(k_3b).$$

В конечном итоге получаем

$$1 + \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2k_3^2} \sin^2(k_3b) - \frac{e^{-ik_2a-iKL}}{4k_2k_3} \{4k_2k_3 \cos(k_3b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3b)\},$$

$$- \frac{e^{ik_2a-iKL}}{4k_2k_3} \{4k_2k_3 \cos(k_3b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3b)\} - \frac{(k_2^2 - k_3^2)^2}{4k_2^2k_3^2} \sin^2(k_3b) + e^{-2iKL} = 0.$$

$$e^{iKL} + e^{-iKL} - \frac{e^{-ik_2a}}{4k_2k_3} \{4k_2k_3 \cos(k_3b) - 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3b)\},$$

$$- \frac{e^{ik_2a}}{4k_2k_3} \{4k_2k_3 \cos(k_3b) + 2i(k_2^2 + k_3^2) \sin(k_3b)\} = 0.$$

$$\cos KL = \cos(k_2a) \cos(k_3b) - \frac{(k_2^2 + k_3^2)}{2k_2k_3} \sin(k_2a) \sin(k_3b). \quad (2.33)$$

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. 9.

2.3. 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 .

2.3.1. Приближение Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна. Область применимости

В стационарном уравнении Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \quad (2.34)$$

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

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 - \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{d^2S}{dx^2} \right) = E - U(x). \quad (2.35)$$

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

$$S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 S_2(x) + \dots \quad (2.36)$$

В нулевом порядке теории возмущений получаем уравнение вида

$$-\frac{1}{2m} \left(\frac{dS_0}{dx} \right)^2 = E - U(x), \quad (2.37)$$

которое элементарно интегрируется

$$S_0(x) = \pm \int \sqrt{2m(E - U(x))} dx = \pm \int p(x) dx, \quad (2.38)$$

где $p(x) = \sqrt{2m(E - U(x))}$ – 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

$$S_1(x) = -\frac{1}{2} \ln p(x). \quad (2.39)$$

В конечном итоге получаем два линейно-независимых решения

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= e^{iS/\hbar} = e^{iS_0(x)/\hbar + S_1(x) + \dots} = e^{-\ln \sqrt{p(x)}} \times e^{iS_0(x)/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right), \\ \psi_-(x) &= \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Общее решение уравнения (2.34) может быть записано в виде линейной комбинации этих решений

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right). \quad (2.41)$$

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

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right). \quad (2.42)$$

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, $p(x) = 0$.

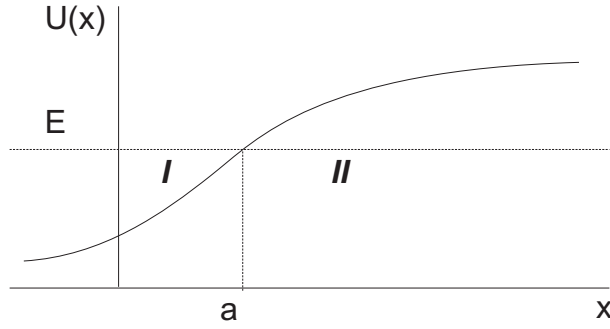


Рис. 10. Потенциальный барьер и классическая точка поворота $x = a$, разделяющая разрешенную область ($x < a$) и классически запрещенную область ($x > a$).

2.3.2. 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 (2.41)–(2.42).

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

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

и привести уравнение Шрёдингера

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

к следующему виду

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

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.). 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

$$\text{Ai}(\xi) \propto \begin{cases} (1/2) \xi^{-1/4} \times \exp \{ -(2/3) \xi^{3/2} \} & \text{при } \xi \rightarrow +\infty \\ |\xi|^{-1/4} \times \sin \{ (2/3) |\xi|^{3/2} + \pi/4 \} & \text{при } \xi \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (2.43)$$

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 (2.43) вблизи точки $x = a$ с приближенными решениями (2.41)–(2.42) в диапазоне применимости этих выражений.

Заметим, что связь осциллирующих и затухающих решений (2.41)–(2.42) в разрешенных и запрещенных областях может быть получена и без процедуры сшивки решений. Проиллюстрируем это следующим образом. Если предположить, что частица налетает на барьер слева, то справа от барьера

($x > a$) по принципу причинности будет существовать только одна экспоненциально затухающая мода вида

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right), \quad (2.44)$$

где C – произвольная постоянная. Вычисляя интеграл в показателе экспоненты от точки a до точки x , получаем

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left(-\frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \sqrt{\left(\frac{dU}{dx}\right)_a} (x-a)^{3/2}\right) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{C}{\xi^{1/4}} \exp\left(-\frac{2}{3} \xi^{3/2}\right). \quad (2.45)$$

Это выражение совпадает с асимптотическим поведением функции Эйри при $\xi \rightarrow \infty$ (2.43).

Следовательно, слева от барьера волновая функция должна иметь вид стоячей волны, что возможно при определенном выборе коэффициентов $C_1 = Ce^{+i\pi/4}/2$ и $C_2 = Ce^{-i\pi/4}/2$, что позволяет выполнить переход следующего вида

$$\frac{1}{2} \frac{1}{\xi^{1/4}} \exp\left\{-\frac{2}{3} \xi^{3/2}\right\} \rightarrow \frac{1}{|\xi|^{1/4}} \sin\left\{\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} + \pi/4\right\} \quad (2.46)$$

или

$$\begin{aligned} \frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx\right\} \rightarrow \\ \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left\{\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right\}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

2.3.3. Связь осциллирующих и затухающих решений: регуляризация Свана

Формулы связи типа (2.47) могут быть получены другим способом, позволяющим не прибегать к анализу точных решений стационарного уравнения Шредингера 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

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx\right\} \quad \text{при } x > a, \quad (2.48)$$

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

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx\right\} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx\right\} \quad \text{при } x < a. \quad (2.49)$$

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

$$\begin{aligned} |p(x)| = \sqrt{2m|dU/dx|_a} \sqrt{x-a}, \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx = \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|dU/dx|_a} (x-a)^{3/2} \quad \text{при } x > a, \\ p(x) = \sqrt{2m(dU/dx)_a} \sqrt{a-x}, \quad \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx = -\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m(dU/dx)_a} (a-x)^{3/2} \quad \text{при } x < a. \end{aligned}$$

† Пояснение о применимости подхода

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

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

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 $\theta = \pi$):

$$\begin{aligned} \theta = 0 : \quad \psi_{II}(x) &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2m|dU/dx|_a)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3\hbar} \sqrt{2m|dU/dx|_a} \times \rho^{3/2} \right\}, \\ \theta = \pi : \quad \psi_{II}(x) &= \frac{C}{2} \frac{1}{(2m|dU/dx|_a)^{1/4}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m|dU/dx|_a} \times \rho^{3/2} \right\}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

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

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{C_1}{(2m(dU/dx)_a)^{1/4} (a-x)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(dU/dx)_a} (a-x)^{3/2} \right\} + \\ &+ \frac{C_2}{(2m(dU/dx)_a)^{1/4} (a-x)^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(dU/dx)_a} (a-x)^{3/2} \right\} = \\ &= \frac{C_1}{(2m(dU/dx)_a)^{1/4} \rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(dU/dx)_a} \times \rho^{3/2} \right\} + \\ &+ \frac{C_2}{(2m(dU/dx)_a)^{1/4} \rho^{1/4}} \exp \left\{ +\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m(dU/dx)_a} \times \rho^{3/2} \right\}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Таким образом, волновая функция $\psi_{II}(x)$ в конце перехода в соответствие с выражениями (2.76) и (2.51) 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

$$\theta = -\pi : \quad \psi_{II}(x) = \frac{C}{2} \frac{1}{(2m|dU/dx|_a)^{1/4}} \frac{e^{+i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m|dU/dx|_a} \times \rho^{3/2} \right\} \quad (2.52)$$

совпадает в первом слагаемом в выражении (2.51), поэтому $C_1 = (1/2)C e^{i\pi/4}$.

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

$$\begin{aligned} &\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} \quad \text{при } x > a \rightarrow \\ &\frac{C}{2} \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\} + \frac{C}{2} \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \times \left(\frac{1}{2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i\frac{\pi}{4} \right\} + \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - i\frac{\pi}{4} \right\} \right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } x < a \end{aligned} \quad (2.53)$$

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

$$\begin{aligned} & \frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| \right\} \quad \text{при } U(x) > E \rightarrow \\ & \rightarrow \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| - \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } U(x) < E. \end{aligned} \quad (2.54)$$

2. Тот факт, что для определения амплитуд бегущих волн в выражении (2.49) для функции $\phi_I(x)$ необходимо по отдельности рассматривать переходы в верхней и нижней полуплоскостях имеет простое объяснение, связанное с аналитическими свойствами функции

$$\psi_I(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \psi^{(+)}(x) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \psi^{(-)}(x), \quad (2.55)$$

$$\psi^{(+)}(x) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\}, \quad \psi^{(-)}(x) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx \right\}. \quad (2.56)$$

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. 11), 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.

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 $F_0 = -(dU/dx)_b > 0$. Пусть справа от точки поворота квазиклассическая волновая функция имеет вид бегущей волны

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} \quad \text{при } x > b. \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}(x-b)^{1/4}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \int_b^x \sqrt{x-b} dx + i \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{e^{i\theta/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \left(-\sin \frac{3\theta}{2} + i \cos \frac{3\theta}{2} \right) + i \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

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

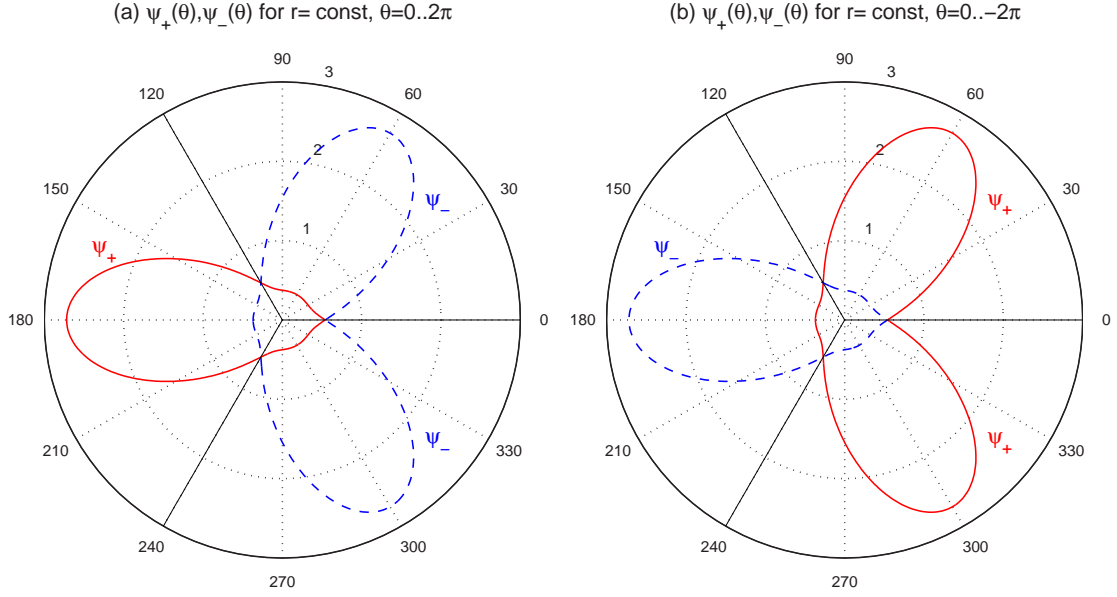


Рис. 11. Области доминирования слагаемых $\psi_+(x) = \exp((i/\hbar) \int_a^x p(x) dx)$ и $\psi_-(x) = \exp(-(i/\hbar) \int_a^x p(x) dx)$ в комплексной плоскости $x = \rho e^{i\theta}$, $\rho = \text{const}$. Рисунок (а) соответствует углам в диапазоне $0 < \theta < 2\pi$, (б) – $-2\pi < \theta < 0$.

фазы от $\theta = 0$ до $\theta = \pi$

$$\begin{aligned} \theta = 0: \quad \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3} \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right\}, \\ \theta = \pi: \quad \psi_{III}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{e^{-i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \right\} \end{aligned} \quad (2.59)$$

Сравним это выражение с выражением для экспоненциально затухающим решением $\psi_{II}(x)$ при $x < b$:

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{(b-x)^{1/4}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^b \sqrt{2mF_0} \sqrt{b-x} dx \right\} = \\ &= \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{\rho^{1/4}} \exp \left\{ \frac{2}{3\hbar} \sqrt{2mF_0} \times \rho^{3/2} \right\}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Поскольку выражение (2.59) и (2.60) в точности совпадают, находим следующее правило соответствия

$$\begin{aligned} \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} &\text{ при } x > b \quad \rightarrow \\ \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right| \right\} &\text{ при } x < b. \end{aligned} \quad (2.61)$$

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.

2.3.4. Прохождение частицы через потенциальный барьер

Рассмотрим задачу о прохождении частицы потенциального барьера в квазиклассическом приближении (рис. 14). Если частица налетает на барьер слева, то в области III за барьером будет

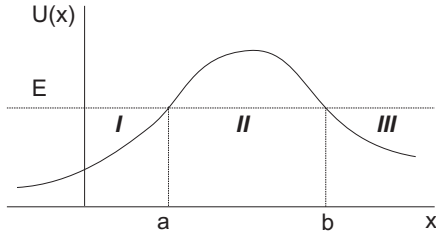


Рис. 12. Классические точки поворота $x = a$ и $x = b$, разделяющие разрешенные области ($x < a$ и $x > b$) и классически запрещенную область ($a < x < b$) под барьером.

лишь уходящая волна вида

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (2.62)$$

Согласно формуле (2.61) находим волновую функцию в области II внутри барьера

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p(x) dx \right| \right\}. \quad (2.63)$$

Заметим, что если $x < b$, то

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

и

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx - \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ - \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Согласно формулам связи (2.53) получаем решение в области I перед барьером

$$\psi_I(x) = 2 \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (2.65)$$

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

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + i \frac{\pi}{4} \right\} + \\ &+ \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\} \times \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - i \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

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

$$t = \exp \left\{ - \frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx \right\}. \quad (2.67)$$

Коэффициент отражения в ВКБ-приближении равен единице (с экспоненциальной точностью).

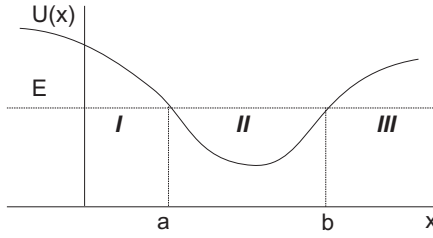


Рис. 13. Иллюстрация квантования Бора-Зоммерфельда для частицы в потенциальной яме.

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

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

Согласно правилу (2.54), затухающее решение справа от точки $x = b$ приводит к осциллирующему решению в классически разрешенной области вида

$$\psi_{II}(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (2.68)$$

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

$$\psi_{II}(x) = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (2.69)$$

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

$$\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right) - \left(\frac{1}{\hbar} \int_b^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx - \frac{\pi}{2} = \pi n, \quad (2.70)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p(x) dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{или} \quad \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = 2 \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_a^b p(x) dx = n + \frac{1}{2}. \quad (2.71)$$

Полученное условие есть правило квантования Бора-Зоммерфельда,† целочисленное значение n соответствуют номеру возбужденного состояния.

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

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 ВКБ-приближении такая функция может иметь вид (2.69)

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.72)$$

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

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 $\psi_0(-x)$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_0(x) + \psi_0(-x)\}, \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_0(x) - \psi_0(-x)\}. \quad (2.73)$$

Запишем уравнения Шрёдингера для функций $\psi_0(x)$ и $\psi_1(x)$

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

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 $+\infty$. Учитывая, что

$$\int_0^{\infty} \psi_0(x) \psi_1(x) dx \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} \psi_0(x)^2 dx = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

находим

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

Поскольку волновая функция внутри барьера затухает как

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi p_0}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p(x) dx \right| \right\}, \quad (2.74)$$

$$\psi_0(0) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi p_0}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\}, \quad (2.75)$$

$$\psi_0'(0) = \frac{p_0}{\hbar} \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi p_0}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\} = \frac{p_0}{\hbar} \psi_0(0), \quad (2.76)$$

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

$$E_1 = E_0 - \frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0) = E_0 - \frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \times \frac{p_0}{\hbar} \psi_0(0) = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx \right\}.$$

$$E_1 = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx \right\}, \quad E_2 = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p(x)| dx \right\}. \quad (2.77)$$

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

3. Квазистационарные состояния в квантовой механике

3.1. Одномерные резонансные состояния

3.2. Резонансные состояния в центрально-симметричном потенциале

Рассмотрим сферически-симметричную потенциальную яму

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

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

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_r(r)) \psi = 0$$

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 типы решений и условия их согласования

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

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

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

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 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 $\varphi = \arctan \kappa/k$.

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{4k_1 k_2} \left\{ (k_1 + k_2)(k_2 + k_3) e^{i(-k_1+k_2)r_1} e^{i(-k_2+k_3)r_2} + \right. \\ &+ \left. (k_1 - k_2)(k_2 - k_3) e^{i(-k_1-k_2)r_1} e^{i(+k_2-k_3)r_2} \right\} = \\ &= \frac{e^{-ikr_1 + ik_2 r_1}}{4ik\kappa} \times \left\{ (k + i\kappa)^2 e^{\kappa w} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa w} \right\} \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} T_{21} &= \frac{1}{4k_1 k_2} \left\{ (k_1 - k_2)(k_2 + k_3) e^{i(+k_1+k_2)r_1} e^{i(-k_2+k_3)r_2} + \right. \\ &+ \left. (k_1 + k_2)(k_2 - k_3) e^{i(+k_1-k_2)r_1} e^{i(+k_2-k_3)r_2} \right\} = \\ &= \frac{e^{+ikr_1 + ik_2 r_1}}{4ik\kappa} \times \left\{ (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{\kappa w} - (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{-\kappa w} \right\}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$e^{-ikr_1} \times \left\{ (k + i\kappa)^2 e^{\kappa w} - (k - i\kappa)^2 e^{-\kappa w} \right\} = \quad (3.3)$$

$$= -e^{+ikr_1} \times \left\{ (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{\kappa w} - (k + i\kappa)(k - i\kappa) e^{-\kappa w} \right\}, \quad (3.4)$$

[†] 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

$$\begin{aligned} T_{11} &= \frac{1}{2k_1} (k_1 + k_2) e^{i(-k_1+k_2)r_1}, & T_{21} &= \frac{1}{2k_1} (k_1 - k_2) e^{i(+k_1+k_2)r_1}, \\ e^{+i\varphi_1} e^{-ik_1 r_1} e^{-\kappa_2 r_1} + e^{-i\varphi_1} e^{ik_1 r_1} e^{-\kappa_2 r_1} &= 0 & \text{или} & \quad \frac{\kappa_2}{k_1} \tan k_1 r_1 + 1 = 0. \end{aligned}$$

Группируя слагаемые при $e^{\kappa w}$ и $e^{-\kappa w}$, получаем окончательное выражение для спектра локализованных состояний

$$\left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right) = -e^{-2\kappa w} \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right) \times \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 - 1\right). \quad (3.5)$$

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

$$\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 + 1 = 0 \quad (3.6)$$

3.2.1. Распад квазистационарных состояний в центрально-симметричном потенциале mbx

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 (3.4) по теории возмущений по параметру $\Delta k = k - k_0$, где k_0 – волновой вектор стационарного состояния. Поскольку правая часть уравнения (3.4) – это малая величина, то в нее можно подставлять невозмущенное значение:

$$\begin{aligned} & -e^{-2\kappa w} \left(\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}\right) \times \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 - 1\right) \rightarrow \\ & \rightarrow -e^{-2\kappa_0 w} \left(\frac{k_0 - i\kappa_0}{k_0 + i\kappa_0}\right) \times \left(\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 - 1\right) = 2 e^{-2\kappa_0 w} \frac{(k_0 - i\kappa_0)^2}{k_0^2 + \kappa_0^2} \end{aligned} \quad (3.7)$$

В левой части уравнения делаем разложение по Δk

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right) \simeq \left(\frac{\kappa_0}{k_0} \tan k_0 r_1 + 1\right) + \frac{d}{dk} \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right)_0 (k - k_0) = \\ & = \frac{d}{dk} \left(\frac{\kappa}{k}\right)_0 \tan k_0 r_1 \Delta k + \frac{d}{dk} \tan kr_1 \Big|_0 \left(\frac{\kappa_0}{k_0}\right) \Delta k \end{aligned} \quad (3.8)$$

Учтем, что

$$\frac{d\kappa}{dk} = -\frac{k}{\kappa}, \quad \left(\frac{d\kappa}{dk}\right)_0 = -\frac{k_0}{\kappa_0}, \quad \tan k_0 r_1 = -\frac{k_0}{\kappa_0}, \quad \cos^{-2} k_0 r_1 = \frac{k_0^2 + \kappa_0^2}{\kappa_0^2}. \quad (3.9)$$

и получим

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\kappa}{k} \tan kr_1 + 1\right) \simeq -\left(\frac{k_0(d\kappa/dk)_0 - \kappa_0}{k_0^2}\right) \left(\frac{k_0}{\kappa_0}\right) \Delta k + \left(\frac{r_1}{\cos^2 k_0 r_1}\right) \left(\frac{\kappa_0}{k_0}\right) \Delta k = \\ & = \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0^2} \Delta k + r_1 \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0} \Delta k = \frac{(k_0^2 + \kappa_0^2)}{k_0 \kappa_0^2} (1 + \kappa_0 r_1) \Delta k \end{aligned} \quad (3.10)$$

Приравнивая левую и правую части уравнения, получаем

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

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

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

Наличие мнимой компоненты волнового вектора приводит к мнимой добавке к энергии основного состояния (для простоты пренебрегаем малой поправкой к действительной части волнового вектора и соответственно энергии состояний)

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m} (k_0 - i\Delta k'')^2 \simeq \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 - 2i \frac{\hbar^2}{2m} k_0 \Delta k''.$$

Здесь мы пренебрегли малой поправкой порядка $(\Delta k'')^2$ к действительной части энергии.

Как и ранее, скорость распада квазистационарного состояния определяется мнимой частью энергии, которая может быть представлена в виде

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

Сравним это выражение с выражением для проницаемости прямоугольного барьера

$$t \simeq \frac{16k_1 \kappa_2^2 k_3}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)} e^{-2\kappa_2 w_2}, \quad (3.11)$$

которое применимо описания прохождения низкоэнергетичных частиц сквозь барьеры с низкой проницаемостью. Полагая, что $k_1 = k_3 = k_0$, $\kappa_2 = \kappa_0$, получаем

$$E'' = \frac{1}{4} \hbar \frac{\hbar k_0}{m} \frac{\kappa_0}{(1 + \kappa_0 r_1)} \times \frac{16k_0 \kappa_0^2 k_0}{(k_0^2 + \kappa_0^2)^2} e^{-2\kappa_0 w} = \frac{1}{4} \hbar \frac{\hbar k_0}{m} \frac{\kappa_0}{(1 + \kappa_0 r_1)} \times T_0.$$

Здесь мы ввели T_0 – проницаемость барьера на резонансном уровне. Комбинацию $\hbar k_0/m$ можно интерпретировать как среднюю скорость частицы в яме, v_0 . В рассматриваемом нами предельном случае высокого барьера ($\kappa \rightarrow \infty$) можно считать $1 + \kappa_0 r_1 \simeq \kappa_0 r_1$. С учетом этого получаем

$$E'' = \frac{1}{4} \hbar \frac{\hbar k_0}{m} \frac{\kappa_0}{\kappa_0 r_1} \times T_0 \simeq \frac{1}{4} \hbar \frac{v_0}{r_1} T_0.$$

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

$$E'' \simeq \frac{1}{2} \frac{\hbar}{\tau_0} T_0, \quad |\Psi(r, t)| = |\psi(r, t)| e^{-2iE't/\hbar} e^{-2E''t/\hbar} \propto e^{-t/\tau_0} e^{-T_0 t} \quad (3.12)$$

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.

3.2.2. Альфа-распад. Формула Гамова

Альфа-распадом называется вид радиоактивного распада ядра, при котором происходит испускание ионизованного 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, дальнодействующим, 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

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

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

$$t = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx\right) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{A/E} \sqrt{2m(A/r - E)} dr\right), \quad (3.13)$$

† Примеры альфа-распада: ${}^{238}_{92}\text{U} \rightarrow {}^{234}_{90}\text{Th} + \alpha$ (${}^4_2\text{He}$), ${}^{241}_{95}\text{Am} \rightarrow {}^{237}_{93}\text{Np} + \alpha$, ${}^{226}_{88}\text{Ra} \rightarrow {}^{222}_{86}\text{Rn} + \alpha$

$a = r_0$, $b = A/E$ – классические точки поворота. Вычисляя интеграл, окончательно получаем

$$t = \exp \left(-\frac{2A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \left\{ \arccos \sqrt{\frac{Er_0}{A}} - \sqrt{\frac{Er_0}{A} \left(1 - \frac{Er_0}{A} \right)} \right\} \right) \quad (3.14)$$

Время жизни квазистационарного состояния пропорционально прозрачности барьера, поэтому вероятность альфа-распада можно оценить как

$$w \propto t(r_0 \rightarrow 0) = \exp \left(-\frac{\pi A}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right), \quad \ln w = -\frac{2e^2 \pi Z}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} + \frac{2e^2 \pi}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \quad (3.15)$$

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 λ от атомного номера

$$\ln \lambda = -\text{const}_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} + \text{const}_2, \quad (3.16)$$

установленную в 1911 Гейгером и Натталом (Hans Geiger, John Mitchel Nuttal) .

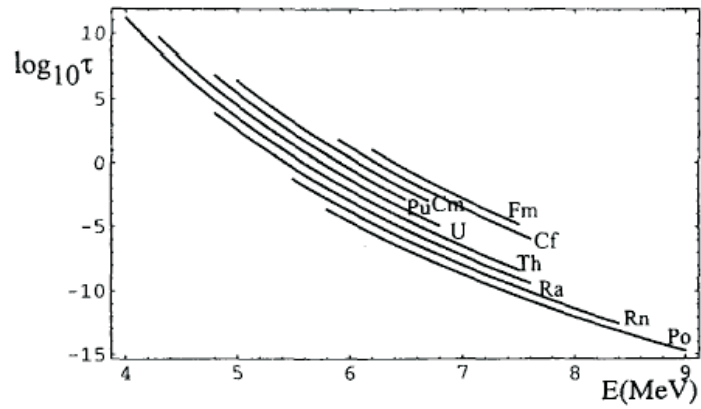
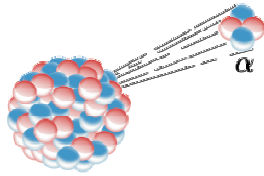


Рис. 14. (а) Схематическое представление радиоактивного альфа-распада; (б) Зависимость времени жизни ядер τ от энергии вылетающих частиц E .

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.