

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-94-448

Л.Г.Заставенко, Б.Н.Захарьев

ТУННЕЛИРОВАНИЕ МЕЖДУ
ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ ЯМАМИ

Направлено в «American Journal of Physics»

1994

Туннелирование между потенциальными ямами

Дается поучительный анализ задачи о движении пакета, построенного из двух связанных состояний в двух различных потенциальных ямах. В отличие от случая одинаковых ям пакеты не перемещаются периодически полностью из одной ямы в другую, как часто ошибочно утверждается (например, в «Am. J. Phys», 1992, 60, 88), а в таком движении принимает участие лишь доля пакетов, и тем меньшая, чем дальше ямы друг от друга и чем больше разница между ямами. Открыто явление туннелирования («перепрыгивания») волновых пакетов через потенциальные ямы.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1994

Перевод авторов

Zakhariev B.N., Zastavenko L.G.

P4-94-448

Tunneling between Two Inequivalent Wells

An instructive analysis of the motion of the wave packet constructed of two bound states in two different potential wells is given. In contrast with the case of equivalent wells the packets don't go completely from one well to another (as is often erroneously stated, e.g. in «Am. J. Phys.», 1992, 60, 88). Only a fraction of packets takes part in this inter-well tunneling and this fraction is the less the far from one another are the wells and the more is the difference between wells. The phenomenon of the wave packet tunneling («jumps») through the potential wells is discovered.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1994

1 ВСТУПЛЕНИЕ

Для лучшего понимания структуры некоторых квантовых систем (молекул и др.) важно ясно представлять себе основные особенности поведения частиц во внешнем поле с различными потенциальными ямами. Широко известен случай одинаковых ям [1], разделенных потенциальным барьером, когда волновой пакет, построенный из двух близких по энергии состояний, периодически туннелирует из одной ямы в другую (то практически исчезая, то полностью сосредотачиваясь в одной из ям).

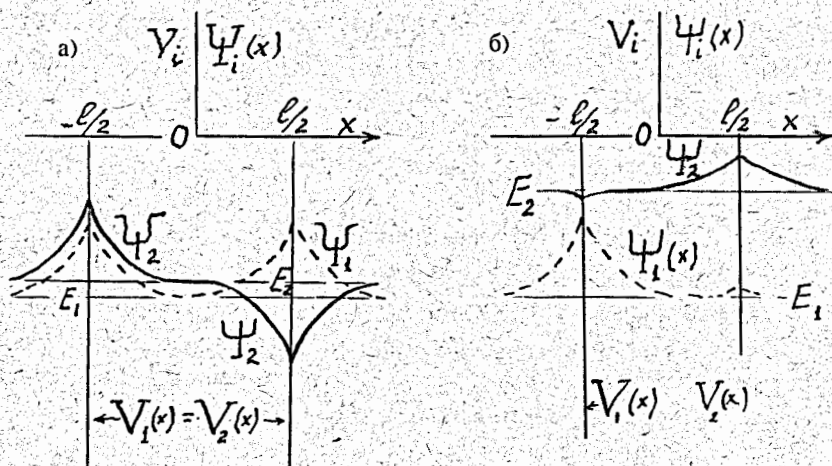
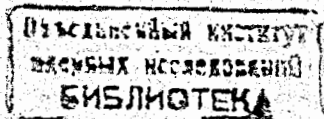


Рис.1 Сравнение симметричной (а) и несимметричной (б) двумных систем с δ -потенциалами. В одинаковых ямах (а) возникает дублет близких по энергии и по волновым функциям связанных состояний. Так, в левой яме функции в определенный момент могут быть почти равны и по модулю и по знаку, а в правой близки по модулю, но противоположны по знаку. Тогда пакет, составленный из их суммы, будет большим в левой яме и почти равным нулю в правой. Через некоторое время из-за разности временных фазовых множителей $\exp(-iE_n t)$ функции дублета поменяют знаки, и пакет переместится в правую яму и так будет осциллировать между ямами со временем. В разных ямах (б) с далекими уровнями E_1, E_2 функции отдельных состояний всегда сосредоточены в одной и той же яме. И пакет из таких волновых функций будет мало меняться по модулю во времени, оставаясь приблизительно равным в каждой главной компоненте. Так что значительных перемещений пакета из одной ямы в другую не будет.

Часто приходится встречаться с представлением, что подобное явление происходит и в случае несимметричных ям. Такая ошибка была, например, допущена в статье [2], опубликованной в хорошем американском журнале Am.J.Phys., предназначенном для распро-



странения физических знаний среди преподавателей физики и др.

Суть дела можно понять и без формул, которые мы приведем в основном тексте. Поясним ее сначала здесь "на пальцах". Если из двух ям с разными уровнями (будем считать, что в каждой изолированной яме по одному уровню) создать систему двух ям, разделенных слабопроницаемым барьером, уровни исходных (изолированных) ям мало изменятся и станут уровнями двукратного потенциала. Волновые функции тоже останутся похожими на функции в изолированных ямах. Они будут продолжать "жить" в основном в исходных ямах, как показано на рис.16, слабо проникая в соседние (из "своей" ямы в "чужую"), где при соответствующих энергиях (вдали от уровня данной изолированной ямы) нет благоприятных условий существования стоячих волн. В чужой яме волны сами себя гасят при осцилляциях. Для одинаковых же ям волновым функциям одинаково хорошо "живется" в обеих ямах. В симметричной двукратной системе образуется дублет близких по энергии состояний с близкими по модулю функциями ψ_n . Сравните на рис.1 вид волновых функций в случаях одинаковых и разных исходных ям. Для одинаковых ям функции в одной из них почти совпадают, а в другой одинаковы по модулю, но противоположны по знаку. Зависимость стационарных состояний от времени описывается фазовым множителем, не меняющим абсолютной величины волновой функции, а лишь вращающим функцию в комплексной плоскости значений ψ , только с разной скоростью для разных уровней энергии. Построим волновой пакет в виде суммы двух функций связанных состояний. Для одинаковых ям в одной из них функции будут то удваиваться (когда вместе с фазовыми множителями они оказываются равными, в это же время в другой яме они взаимно сокращаются, так что волновой пакет оказывается сосредоточенным в одной из ям), то исчезают (когда они отличаются знаком, тогда пакет собирается в другой яме). Для несимметричного случая в каждой из ям будут складываться большая и малая по модулю функции (как уже говорилось выше, при энергии одного из состояний функция "живет" в основном в одной из ям, а для другого - в другой, а со временем они будут лишь немного трансформироваться по модулю).

Меняющиеся со временем фазовые множители состояний способны лишь привести к легким осцилляциям модуля величины пакета (малая компонента ни при каком фазовом множителе не способна сильно изменить размер пакета, который в основном определяется большой компонентой).

2 ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим предложенную Риверосом [2] простую и хорошую модель с двумя дельта-образными потенциальными ямами с разными множителями V_λ ; $\lambda = 1, 2$, расположенными в точках $x_1 = -l/2$ и $x_2 = l/2$ на расстоянии l друг от друга¹. Связанные состояния в каждой отдельной такой яме (или при $l = \infty$) имеют энергии²: $E_i^\infty = -V_i^2/2$. Соответствующее уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - V_1 \delta(x + l/2) - V_2 \delta(x - l/2) - E \right\} \psi(x) = 0; V_1, V_2 > 0; i = 1, 2. \quad (1)$$

Хотя это уравнение решается точно, Риверос допустил ошибку, используя приближения, которые принципиально изменили поведение пакетов. У него, как и в симметричном случае, пакеты полностью переходили периодически из одной ямы в другую.

Точное решение $\psi(x)$ уравнения (1) имеет различные аналитические представления в трех областях:

$$Ae^{\kappa x} \quad \text{при} \quad x \leq -l/2; \quad (2)$$

$$Be^{\kappa x} + Ce^{-\kappa x} \quad \text{при} \quad -l/2 \leq x \leq l/2; \quad (3)$$

$$De^{-\kappa x} \quad \text{при} \quad x \geq l/2. \quad (4)$$

Константы A, B, C, D могут быть найдены из условий непрерывного сшивания решений $\psi(x)$ в точках $x = x_1$ и $x = x_2$:

$$A = Ce^{\kappa l} + B. \quad (5)$$

$$D = C + Be^{\kappa l} \quad (6)$$

¹ О точно решаемых моделях с дельта-образными потенциалами см. книги [3-5]

² О. Риверос [2] использовал эти значения уровней отдельных ям как приближенные уровни двукратной системы. Мы будем использовать более точные значения E_1, E_2 .

и условий скачков³ $\Delta\psi'(x_i) = -2V_i\psi(x_i)$ в тех же точках для производных $\psi'(x)$:

$$A\kappa e^{-\kappa l/2} = -C\kappa e^{\kappa l/2} + B\kappa e^{-\kappa l/2} + 2V_1 A e^{-\kappa l/2}; \quad (7)$$

$$\kappa D e^{-\kappa l/2} = -C\kappa e^{-\kappa l/2} + B e^{\kappa l/2} - 2V_2 D e^{-\kappa l/2}. \quad (8)$$

Подставляя А и D из уравнений (5,6) в уравнения (7,8), получаем

$$C(\kappa - V_1) - B V_1 e^{\kappa l} = 0, \quad (9)$$

$$C V_2 e^{\kappa l} - B(V_2 - \kappa) = 0. \quad (10)$$

Нули детерминанта матрицы коэффициентов этой системы дают два значения параметра κ : κ_1 и κ_2 и соответствующие значения уровней энергии E_1 и E_2 :

$$(\kappa - V_1)(\kappa - V_2) = V_1 V_2 e^{-2\kappa l}. \quad (11)$$

Перепишем (11) в виде

$$\kappa = \frac{V_1 + V_2}{2} \pm \sqrt{(V_1 - V_2)^2/4 + V_1 V_2 e^{2\kappa l}}. \quad (12)$$

Это уравнение легко решить численно. Для больших l мы можем с хорошей точностью сделать замену $\kappa_1 = V_1$ и $\kappa_2 = V_2$ в малом слагаемом под корнем в правой части уравнения (12):

$$\begin{aligned} \kappa_\lambda(l) - \kappa_\lambda(\infty) &= \\ &= (-1)^{\lambda-1} \{V_1 V_2 \exp(-2V_\lambda l)\} / \{\sqrt{(V_1 - V_2)^2/4 + V_1 V_2 \exp(-2V_\lambda l)}\} + \dots; \\ &\quad \lambda = 1, 2 \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь мы полагаем $V_1 > V_2$. Если

$$l > \frac{V_1 + V_2}{2V_1 V_2}, \quad (14)$$

уравнение (11) имеет два положительных корня, отвечающих двум связанным состояниям. Для меньших значений l имеется только одно связанное состояние в системе двух дельта-ям. Это ясно и интуитивно: для $l=0$ две дельта-ямы сливаются в одну дельта-яму

³Эти скачки просто получаются при интегрировании уравнения (1) в пределе исчезающе малого интервала интегрирования в окрестности точек $x = x_1$ и $x = x_2$, см. также [3,4].

с множителем $V_1 + V_2$ (суммарной силой) и одним связанным состоянием (в изолированной дельта-яме может быть только одно связанное состояние). В пределе больших расстояний l между ямами энергии связанных состояний приближаются к значениям в отдельных ямах с экспоненциально малыми поправками:

$$\kappa_i = V_i/2 + 4V_1 V_2 \exp[-lV_i].$$

Для отношения коэффициентов D_i/A_i , которые служат мерой относительной вероятности найти частицу вблизи ям 2 и 1, мы получаем:

$$\begin{aligned} \frac{D_i}{A_i} &= e^{\kappa_i l} \frac{V_1(e^{-2\kappa_i l} - 1) + 2\kappa_i}{2\kappa_i} = \\ &= \begin{cases} \left(\frac{V_1 - V_2}{V_1}\right)^2 e^{\kappa_1 l} & \text{для основного состояния,} \\ \left(\frac{V_2}{V_1 - V_2}\right)^2 e^{-\kappa_2 l} & \text{для возбужденного состояния.} \end{cases} \end{aligned} \quad (15)$$

Риверос [2] строил волновой пакет из невозмущенных функций в изолированных ямах:

$$\Psi(x, t) = c_0(t)\phi_0(x) + c_1(t)\phi_1(x), \quad (16)$$

а коэффициенты $c_0(t)$ и $c_1(t)$ находятся подстановкой (16) в уравнение Шредингера с временной зависимостью

$$i\dot{\Psi} = H\Psi. \quad (17)$$

Из-за неортогональности использованных Риверосом базисных функций полученная система дифференциальных уравнений для $c_0(t)$ и $c_1(t)$ оказалась связанной. И хотя интеграл перекрытия невозмущенных базисных функций, определяющий эту связь, мал при больших l , за большое время пакет мог перемещаться из одной ямы в другую. В случае же точных двумерных решений такая связь равна строго нулю. Уравнения для $c_0(t)$ и $c_1(t)$ расцепляются:

$$\begin{aligned} i\dot{c}_0 &= E_0 c_0, \\ i\dot{c}_1 &= E_1 c_1. \end{aligned} \quad (18)$$

Так что временная зависимость c_1 , c_0 точно описывается фазовыми множителями $\exp(-iE_0 t)$, $\exp(-iE_1 t)$, не меняющими абсолютных значений этих волновых функций, в отличие от Ривероса

[2], у которого эти коэффициенты осциллируют по модулю от нуля до некоторой максимальной величины по закону:

$$|c_i(t)|^2 \sim [1 - \cos(st)], \quad (19)$$

где s — некоторая константа.

В нашем случае (в точном решении) в линейной комбинации (16), образующей пакет, один член в любой из дельта-ям при больших l и разнице в уровнях всегда относительно мал и не может сильно изменить всю $\Psi(x, t)$. Последняя состоит из главной части (стоячей волны в соответствующей яме при благоприятной энергии) с малой примесью "самопогашенного" хвоста двукратной волновой функции в другой яме, где при неподходящей энергии существование стоячей волны подавлено. Из-за несоответствия фазовых временных факторов $\exp(-iE_n t)$ в двух членах линейной комбинации при их резкой несоизмерности происходит лишь слабые колебания величины пакета в каждой из ям.

Ошибка работы [2] состоит в том, что связанные состояния отдельных дельта-ям являются недостаточно полным набором для правильного описания явления туннелирования из одной ямы в другую. Следуя подходу Ривероса, нужно было бы расширить базис состояниями непрерывного спектра, но это сделало бы его расчеты трудно выполнимыми.

3 "ПРЫЖКИ" ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ ЧЕРЕЗ ЯМЫ

Если посередине между двумя одинаковыми дельта-ямами поместить третью, уровень которой расположен далеко от дублета первых двух, то волновые функции дублета будут "жить" в крайних ямах, а в средней окажутся пренебрежимо малыми (см. рис.2).

Пакет, построенный из функций дублета с одинаковым весом, будет, как и в отсутствие третьей ямы, "осциллировать" между крайними ямами, локализуясь последовательно то в одной, то в другой, "минуя" среднюю яму. В действительности волновые потоки будут проходить (просачиваться) через нее, но незаметно, ввиду малости в средней области функций, составляющих пакет.

Аналогичное явление будет и в более общем случае. Недавно было выяснено [6], что при сближении двух уровней связанных со-

стояний происходит разделение их волновых функций на две части, которые локализируются во вспомогательных ямках по обе стороны от исходной потенциальной ямы (которая при этом несколько деформируется). Функции вырожденных состояний (дублета) должны быть везде по модулю близкими друг к другу как решения одного и того же уравнения Шредингера с почти одной и той же энергией.

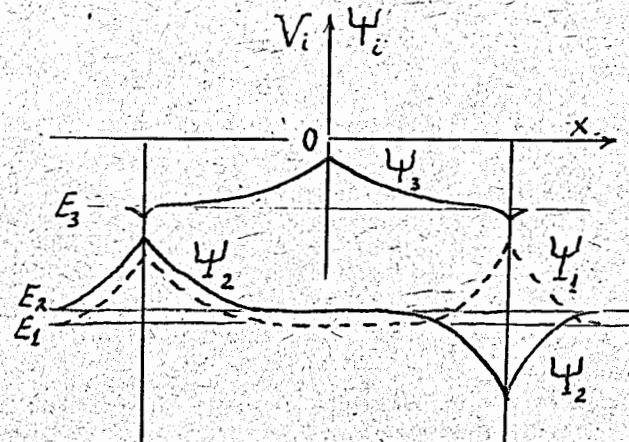


Рис.2 Трёхямная система с двумя одинаковыми δ -ямами по краям (с дублетом уровней E_1, E_2) и одной отличной ямой посередине с более мелким уровнем E_3 . Волновые функции дублета очень малы в средней яме. Если из них сделать волновой пакет, то он будет, как и в случае рис.1а, периодически перемещаться из одной крайней ямы в другую, минуя среднюю (!) — сравни со случаем ям конечной ширины на рис 6. из работы [8].

Но у этих функций число узлов различается на единицу. Чтобы функции дублета, тем не менее, были близкими, они в центральной области (в исходной яме) оказываются очень малыми (в пределе нулевой амплитуды сравниваются даже совсем непохожие функции).

4 РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ НА ДВУХ ДЕЛЬТА-ЯМАХ ИЛИ БАРЬЕРАХ

Сравним явление резонансов для точно решаемых моделей на полуоси r (с одной дельта-перегородкой $V\delta(r-a)$ и на всей оси x с двумя дельта-перегородками. На полуоси (с нулевым краевым условием в нуле) имеется лишь одно фундаментальное решение при любой энергии. Все остальные физические решения отлича-

ются от него лишь тривиальным постоянным множителем. Нижний резонанс в этом случае отвечает энергии, когда синусоидальное решение внутри мишени достигает дельта-стенки прежде, чем обращается в нуль, где это решение ломается (скачок производной до нуля) в сторону от оси r и с фазой $\pi/2$ выходит во внешнюю область. При этом получается максимум амплитуды волны внутри мишени [7] (см. рис.3).

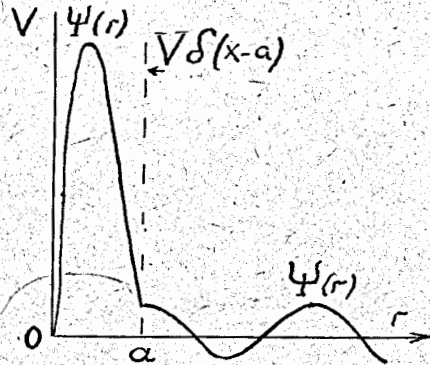


Рис.3. Волновая функция резонансного рассеяния на δ -барьере. Максимум амплитуды функции внутри мишени получается при нулевой производной справа от барьера: внутренняя функция претерпевает излом на потенциальной перегородке, переходя в горизонтальное положение справа от нее.

На всей оси имеется два фундаментальных решения типа \sin и \cos . Для одного из них, симметричного относительно центра мишени (двух одинаковых дельта-барьеров) максимум амплитуды внутри мишени будет при энергии, когда функция выходит за барьеры в обе стороны горизонтально, как это было на полуоси справа. Но при той же энергии второе независимое решение обратится на одной из стенок в нуль. При этом оно не сломается и войдет в мишень с той же амплитудой, что и во внешней области. Значит резонанс на всей оси не может соответствовать максимуму амплитуды обоих фундаментальных решений в области мишени.

5 НЕТОЧЕЧНЫЕ ЯМЫ

Рассмотрим две возможно и неравные потенциальные ямы, в одной из которых один уровень совпадает с каким-либо уровнем другой ямы, когда эти ямы изолированы. Если создать двумяную систему (см. рис.4), то при большом расстоянии между ямами будет периодическое во времени перетекание волнового пакета из одной ямы в другую.

Можно было бы предположить, что в случае трех ям с трижды вырожденным уровнем пакет будет последовательно переходить из одной ямы в соседнюю. Однако это не так, в чем можно убедиться с помощью рис.5 из [8]. Можно создать волновой пакет из трех функций, близкий к нулю в одной из ям, но он будет сильно отличаться от нуля в двух других.

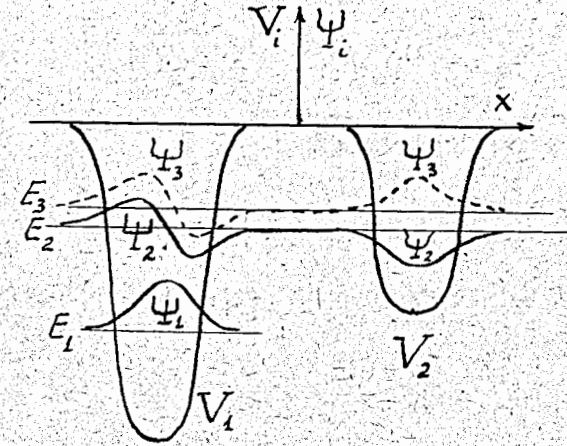


Рис.4. Двумяная система с почти вырожденными уровнями второго и третьего состояний. Пакет из ψ_2 и ψ_3 должен осциллировать между двумя ямами (пропадая в одной из ям и появляясь в другой).

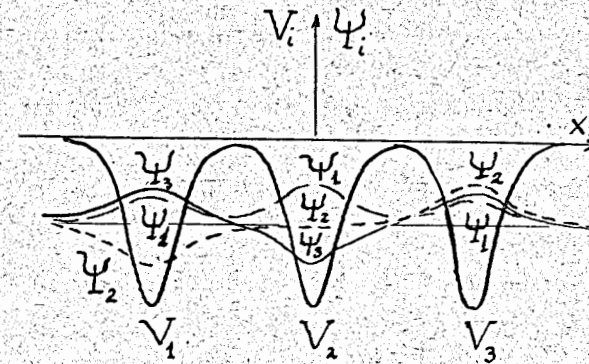


Рис.5. Трехямная система с почти вырожденными тремя уровнями из работы [8]. Какие бы комбинации функций мы не выбрали, не удастся загрузить волновой пакет в двух ямах, сконцентрировав его в одной из ям.

На рис.6 из работы [8] представлен случай сближения второго и третьего уровней в трехямной системе. Видно, что из второй и третьей функций можно построить пакет, который будет переходить из одной крайней ямы в другую, "миная" среднюю, ср. с рис.2.

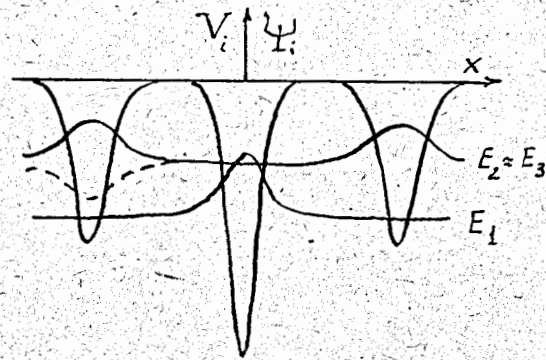


Рис.6 Трехямная система с двумя почти вырожденными возбужденными состояниями.

Обратите внимание на то, что волновая функция второго состояния практически исчезает в средней яме, где у нее узел и где она с точностью до постоянного множителя должна была быть, как решение уравнения Шредингера в том же внешнем поле при той же почти энергии, похожей на третью функцию, не имеющую узла в центре (в данном случае такой множитель почти равен нулю). Для сильно разделенных ям эти множители могут быть разными в разных ямах. Поскольку вырождение не точное, все эти соотношения выполняются приближенно.

Авторы благодарны В.М.Чабанову за полезные дискуссии, а также РФФИ за частичную финансовую поддержку (проект N 94-02-04788).

6 ПРИЛОЖЕНИЕ

(Преобразование уравнения Шредингера с δ -потенциалом в уравнение с несингулярным потенциалом)

Для произвольной функции $U(s)$, удовлетворяющей соотноше-

нию

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U(s) ds = 1, \quad (20)$$

верна формула для любой функции $f(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x)}{\epsilon} U\left(\frac{x}{\epsilon}\right) dx \rightarrow f(0) \text{ при } \epsilon \rightarrow 0. \quad (21)$$

То есть

$$\frac{1}{\epsilon} U\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \rightarrow \delta(x) \text{ при } \epsilon \rightarrow 0. \quad (22)$$

Поэтому должны быть эквивалентны два уравнения Шредингера (при $\epsilon \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} & \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V\delta(x) - E \right\} \psi(\hat{x}) = 0; \\ & \left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{V}{\epsilon} U\left(\frac{x}{\epsilon}\right) - E \right\} \psi(x) = 0 \text{ при } \epsilon \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (23)$$

7 ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989, с.224.
2. O.J.Riveros. "Tunneling between two inequivalent wells". Am.J.Phys. 88 - 89, (1992).
3. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике М., Мир, 1974
- С.Альбеверио, Ф.Гестези, Р.Хезг-Крон, Х.Хольден. Решаемые модели в квантовой механике. М. Мир, 1991.
5. Ю.Н.Демков, В.Н.Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., издат. ЛГУ, 1975г.
6. Б.Н.Захарьев, В.М.Чабанов. Препринт ОИЯИ P4-94-461, Дубна, 1994.
7. Б.Н.Захарьев, ЭЧАЯ, 23, N5, 1385, 1992.
8. J.F.Schonefeld et al, Ann.Phys.NY, 128,1 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 ноября 1994 года.