

ЭФФЕКТ ТУННЕЛЬНОГО ЗАХВАТА

Е.В. Выборный, М.В. Карасев

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

evgeniy.bora@gmail.com, karasev.mikhail@gmail.com

Поступила 05.08.2014

Рассматривается одномерный оператор Шредингера с двукратным потенциалом, который задается суммой «физически заданной» финитной ямы произвольного вида и «пробной» прямоугольной ямы. Физическая яма фиксирована, а параметры прямоугольной пробной ямы (глубина, ширина и положение) являются варьируемыми. В квазиклассическом приближении рассматривается динамика состояния, локализованного в начальный момент в физической яме. Показано, что если пробный потенциал расположен не слишком близко к физической яме и если его параметры настроены специальным образом, то возникает туннельный захват: начальное состояние начинает совершать осцилляции (резонансные туннельные переходы) между физической и пробной потенциальной ямой. Получена асимптотическая формула для вероятности обнаружить состояние в пробной яме в зависимости от настройки варьируемых параметров. Кроме того, вычислен главный член асимптотики величины туннельного расщепления спектра для двукратного потенциала рассматриваемого типа.

УДК 517.927.25:530.145

1. Введение

Туннелирование в двукратном потенциале является одним из фундаментальных квантовых эффектов [1, 2]. Первые результаты, содержащие качественное описание спектра соответствующего оператора Шредингера, содержались еще в работе Ф. Хунда [3]. Аналитическое описание туннельных эффектов может быть получено в квазиклассическом приближении, то есть асимптотически при стремлении эффективной постоянной Планка \hbar к нулю. Хорошо известно, что в случае зеркальной симметрии двукрат-

ного потенциала спектр состоит из пар экспоненциально близких (при $\hbar \rightarrow 0$) точек, а соответствующие собственные функции (стационарные состояния) симметричны и антисимметричны [4]. Если при этом какое-то состояние в начальный момент времени локализовано только в одной из пары симметричных потенциальных ям, то оно заведомо не является стационарным, но может быть представлено в виде линейной комбинации симметричного и антисимметричного стационарных состояний со слегка отличающимися энергиями. Это приводит к туннельной транспортиции, когда состояние, изначально локализованное только в одной яме, начинает совершать туннельные переходы между ямами с определенным периодом. Период определяется величиной туннельного расщепления соответствующего энергетического уровня.

Аналогичный эффект может возникнуть и в несимметричном потенциале, если априори известно, что стационарные состояния локализованы сразу в обеих потенциальных ямах [5]. Общий критерий существования бислокализованных стационарных состояний в несимметричном двоямном потенциале был найден в работе [6].

В настоящей работе мы рассматриваем специальный вид двоямного потенциала, который является суммой «физически заданной» и прямоугольной «пробной» ямы. Предположим, что потенциал физической ямы является финитной гладкой функцией, а параметры прямоугольной пробной ямы, такие как глубина, ширина и положение, являются внешними варьируемыми параметрами. Для определенности будем считать, что пробная яма расположена справа от физической ямы (см. рис. 1).

Отметим, что если заданный физический потенциал не является финитным, но быстро стремится к нулю при удалении от ямы, то его можно аппроксимировать финитной функцией, а влияние отбрасываемых нефинитных частей учесть при помощи теории возмущений.

Рассматривается динамика состояния, локализованного в начальный момент времени в левой потенциальной яме. Если параметры правой ямы выбраны случайно, то состояние останется все время локализованным в левой яме с экспоненциальной точностью по \hbar , но для ряда специальных (резонансных) значений параметров ситуация меняется: состояние туннелирует из физической ямы в пробную потенциальную яму (создавая там некое состояние величины порядка 1 при $\hbar \rightarrow 0$), затем туннелирует обратно в физическую яму, и так далее. Этот эффект может быть назван *туннельным захватом* состояния. Основываясь на результатах работы [6], мы ниже выводим достаточные аналитические условия появления туннельного захвата (см. формулы (9) и (11)). Эти условия означают, что пробная яма не должна слишком близко приближаться к физической яме и варьируемые параметры пробной ямы должны быть специально подобраны. Более того, по «резонансным» значениям параметров можно восстановить энергию исходного состояния в физической яме.

Заметим, что общая задача об определении условий возникновения туннельного захвата представляет интерес с физической точки зрения [7]; для конкретного потенциала эта задача была рассмотрена в работе [8] при помощи численных методов.

В данной работе мы также получаем асимптотическую формулу для вероятности обнаружить состояние в пробной потенциальной яме (см. формулу (13)) и находим асимптотику туннельного расщепления энергетических уровней в двоямном потенциале рассматриваемого вида (см. формулу (12)).

2. Постановка задачи

Рассмотрим одномерное уравнение Шредингера

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \\ \Psi|_{t=0} = \Psi_0, \end{cases} \quad (1)$$

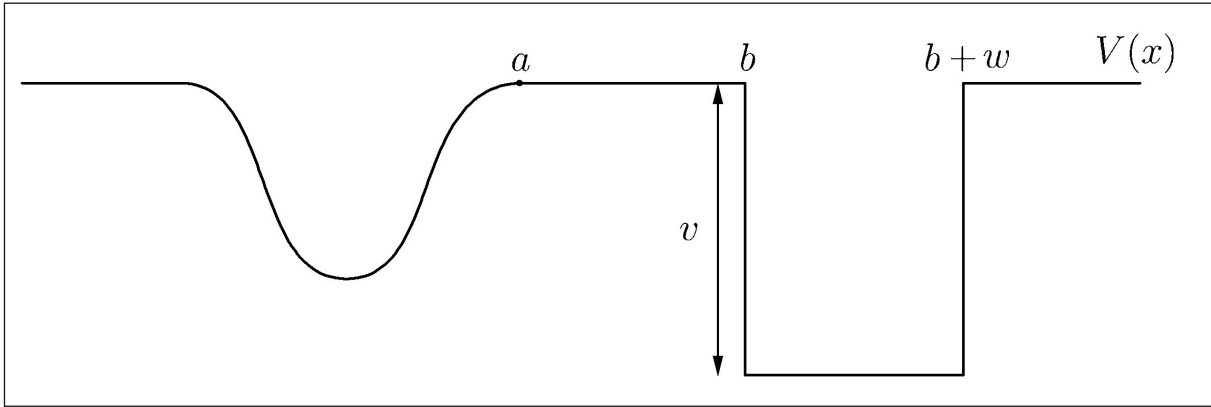


Рис. 1

где $\hbar > 0$ – малый параметр квазиклассического приближения, а оператор Шредингера имеет вид:

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Потенциал $V(x)$ является суммой двух отрицательных финитных функций с непесекающимися носителями:

$$V(x) = V_l(x) + V_r(x),$$

$$V_i(x) \leq 0, \quad i = l, r.$$

Физическая (левая) потенциальная яма является гладкой (см. рис. 1),

$$V_l(x) = 0, \quad x \geq a,$$

а пробная (правая) потенциальная яма является прямоугольной:

$$V_r(x) = \begin{cases} 0 & x \leq b, \quad x \geq b + w, \\ -v & b < x < b + w, \end{cases}$$

ширина w пробной потенциальной ямы является варьируемым параметром.

Предположим, что начальное состояние Ψ_0 локализовано в физической потенциальной яме и имеет энергию, близкую к отрицательному значению $E > -v$. Для определенности, пусть Ψ_0 совпадает со стационарным состоянием ψ_l , которое соответствует энергии $E = E_l$ оператора Шредингера с потенциалом $V_l(x)$, то есть Ψ_0 является стационарным состоянием при «выключенном» пробном потенциале. Следовательно, «физическое» начальное состояние $\Psi_0 = \psi_l$ полностью определяется физической потенциальной ямой $V_l(x)$ и значением энергии E , то есть не зависит от конфигурации пробного потенциала $V_r(x)$.

Вероятности $P_l(t)$ и $P_r(t)$ обнаружить состояние Ψ в левой и правой потенциальной яме в момент времени t могут быть использованы для определения локализации состояния. Они определяются как интегралы от $|\Psi(x, t)|^2$ по x из окрестности левой или правой потенциальной ямы соответственно. Максимальная вероятность обнаружить состояние в пробной потенциальной яме имеет вид:

$$P_r^{\max} = \max_t P_r(t).$$

Будем говорить, что имеет место туннельный захват, если вероятность P_r^{\max} не стремится к нулю при $\hbar \rightarrow 0$. Ниже показано, что P_r^{\max} может быть близка к единице для определенного дискретного множества значений ширины пробной ямы w . Следо-

вательно, если пробная яма настроена специальным образом, то происходит полный туннельный захват состояния.

3. Двухуровневое приближение

Рассмотрим двумный потенциал общего вида, являющийся суммой двух финитных потенциальных ям. Соответствующий оператор Шредингера имеет вид:

$$\hat{H} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

где

$$V(x) = V_l(x) + V_r(x).$$

Хорошо известно, что спектр оператора Шредингера с двумным потенциалом может содержать пары экспоненциально близких (при $\hbar \rightarrow 0$) точек, а соответствующие стационарные состояния могут быть локализованы в обеих потенциальных ямах [4, 9, 10]. Используя результаты работы [6], получим асимптотические формулы для точек спектра \hat{H} и для соответствующих стационарных состояний.

Сначала определим два оператора Шредингера:

$$\hat{H}_l = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_l(x),$$

$$\hat{H}_r = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + V_r(x).$$

Операторы $\hat{H}_{l,r}$ описывают левую и правую потенциальную яму в отдельности. Пусть x_l и x_r – точки поворота, ограничивающие потенциальный барьер слева и справа соответственно (см. рис. 2).

Определим точку c так, что

$$\int_{x_l}^c |p(x)| dx = \int_c^{x_r} |p(x)| dx,$$

где $p(x) = \sqrt{E - V(x)}$ – классический импульс. Точка c – это центр потенциального барьера с точки зрения инстантоны метрики. Основополагающая роль инстантонной метрики при оценке туннельных эффектов в двумном потенциале изучалась в работах [11-13] и в серии работ [14-16].

В работе [6] было показано, что асимптотика спектра \hat{H} может быть получена в терминах спектров операторов \hat{H}_l и \hat{H}_r , если справедливо неравенство

$$a < c < b. \quad (2)$$

Это неравенство означает, что точка c не принадлежит носителю потенциала $V(x)$. Следовательно, неравенство (2) можно переписать в эквивалентной форме:

$$|S_r - S_l| < (b - a)\sqrt{-E}, \quad (2a)$$

где $S_{l,r}$ – туннельное действие по левой или правой стороне барьера:

$$S_l = \int_{x_l}^a \sqrt{V_l(x) - E} dx, \quad S_r = \int_b^{x_r} \sqrt{V_l(x) - E} dx.$$

Пусть E_i принадлежит спектру оператора \hat{H}_i , а ψ_i – соответствующая собственная функция, $i = l, r$. Тогда спектр оператора \hat{H} в окрестности энергии E состоит из точек E_l и E_r с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$ [6]. Собственные функции оператора \hat{H} близки к ψ_l или ψ_r , если расстояние между E_l и E_r не является экспоненциально малым. С другой стороны, если оно является экспоненциально малым, то в спектре оператора \hat{H} присутствует пара экспоненциально близких точек, а соответствующие собственные функции близки к некоторым линейным комбинациям состояний ψ_l и ψ_r .

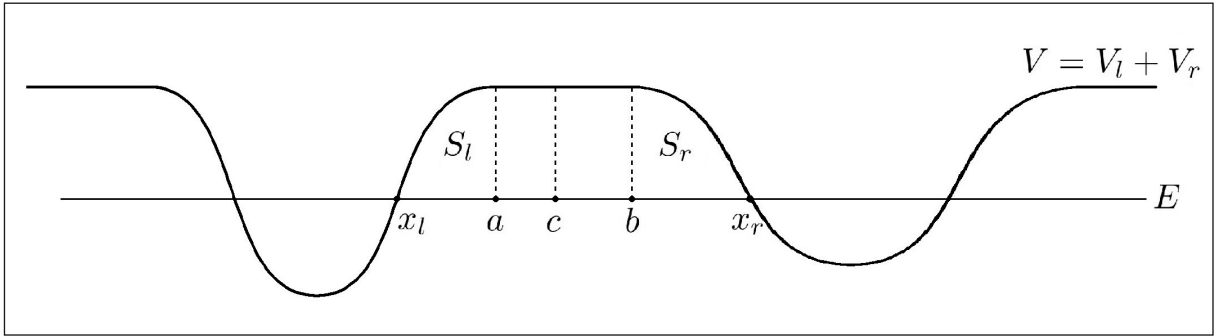


Рис. 2

Лемма. Пусть выполнено условие (2а) и энергии E_l и E_r совпадают:

$$E = E_l = E_r.$$

Тогда существует две точки спектра оператора \hat{H} , расположенные экспоненциально близко к E при $\hbar \rightarrow 0$. Соответствующие собственные функции локализованы в обеих потенциальных ямах и с экспоненциальной точностью имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_1 &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_l + \psi_r), \\ \psi_2 &\approx \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_l - \psi_r).\end{aligned}\tag{3}$$

Более того, если $E_l \neq E_r$, но расстояние между ними экспоненциально мало, то точки $E_{1,2}$ спектра оператора \hat{H} удовлетворяют следующим приближенным формулам:

$$E_{1,2} \approx \frac{E_l + E_r}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\delta^2 + (E_l - E_r)^2},\tag{4}$$

где

$$\delta = 2\hbar^2 \left[\psi_l \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_l}{dx} \right]_{x=c}.\tag{5}$$

Следовательно, для величины расщепления $\Delta = E_2 - E_1$ справедлива формула

$$\Delta \approx \sqrt{\delta^2 + (E_r - E_l)^2}.\tag{6}$$

Соответствующие собственные функции оператора \hat{H} имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_1 &\approx \psi_l \cos \alpha + \psi_r \sin \alpha, \\ \psi_2 &\approx \psi_l \sin \alpha - \psi_r \cos \alpha,\end{aligned}\tag{7}$$

где

$$\tan \alpha = \frac{E_l + E_r}{\delta} + \sqrt{1 + \frac{(E_r - E_l)^2}{\delta^2}}.\tag{8}$$

Из формулы (8) следует, что состояния $\psi_{1,2}$ локализованы в обеих потенциальных ямах, только если $|E_r - E_l| = O(\delta)$. С другой стороны, состояния $\psi_{1,2}$ экспоненциально близки к состояниям $\psi_{l,r}$, если $|E_r - E_l|$ много больше величины $\delta(\hbar)$ при $\hbar \rightarrow 0$.

Утверждения леммы и формулы (4)-(8) следуют из результатов работы [6].

Замечание. Для краткости мы не формулируем здесь точные условия на класс гладкости функций, задающих потенциальные ямы. Но он заведомо включает в себя случай кусочно-непрерывных функций, который рассматривается в следующем разделе.

4. Прямоугольная пробная яма

Пусть пробная яма имеет прямоугольную форму, как в разделе 2. Тогда условие (2а) принимает вид:

$$b - a > \int \sqrt{1 - V_l(x)/E} dx. \quad (9)$$

Интеграл в (9) берется по интервалу $[x_l, a]$, где потенциал $V_l(x)$ изменяется от значения $-E$ до нуля. Предположим, что условие (9) справедливо, то есть пробная яма расположена достаточно далеко от физической ямы.

Отрицательные энергетические уровни E_r в прямоугольной потенциальной яме удовлетворяют следующему уравнению:

$$\frac{w\sqrt{v+E}}{\hbar} = \pi(k+1/2) + \arctg\left(\frac{v+2E}{2\sqrt{(-E)(v+E)}}\right), \quad (10)$$

где k – номер энергетического уровня $E = E_r^{(k)}$ такого, что $-v < E < 0$. Следовательно, расстояние между соседними энергетическими уровнями спектра оператора \hat{H}_r имеет порядок \hbar^2 вблизи дна потенциальной ямы и порядок \hbar для высоких энергетических уровней при $k \sim 1/\hbar$.

Подставляя ВКБ приближение для ψ_l и точную формулу для ψ_r в формулу (5), получаем

$$\delta = 2\hbar(-E)^{1/4} \sqrt{\frac{2(v+E)\omega_l}{\pi v w}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_l}^{x_r} \sqrt{V(x)-E} dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad (11)$$

где ω_l – классическая частота колебаний в физической потенциальной яме $V_l(x)$ для энергии E .

Пусть ширина пробной прямоугольной ямы $w = w_k^*$ настроена так, что энергетический уровень E_l начального состояния $\Psi_0 = \psi_l$ совпадает с энергетическим уровнем пробной ямы (см. рис. 3):

$$E_l = E_r^{(k)} \Big|_{w=w_k^*}.$$

Учитывая уравнение (10), получаем

$$w_k^* = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{v+E_l}} \left[k + \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg\left(\frac{v+2E_l}{2\sqrt{(-E_l)(v+E_l)}}\right) \right]. \quad (12)$$

Теорема. Пусть ширина пробной потенциальной ямы w совпадает с одним из резонансных значений w_k^* (12). Тогда состояние, локализованное в начальный момент в физической яме, совершает туннельные переходы между ямами, и максимальная вероятность обнаружить состояние в пробной яме экспоненциально близка к 1 при $\hbar \rightarrow 0$.

Доказательство. Применяя лемму из раздела 3, разложим начальное состояние $\Psi_0 = \psi_l$ по собственным функциям оператора \hat{H} :

$$\psi_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2).$$

Тогда решение задачи Коши (1) с экспоненциальной точностью имеет вид:

$$\Psi(x, t) = e^{\frac{t(E_1+E_2)}{2i\hbar}} \left(\cos\left(t \frac{E_2-E_1}{2\hbar}\right) \psi_l + i \sin\left(t \frac{E_2-E_1}{2\hbar}\right) \psi_r \right),$$

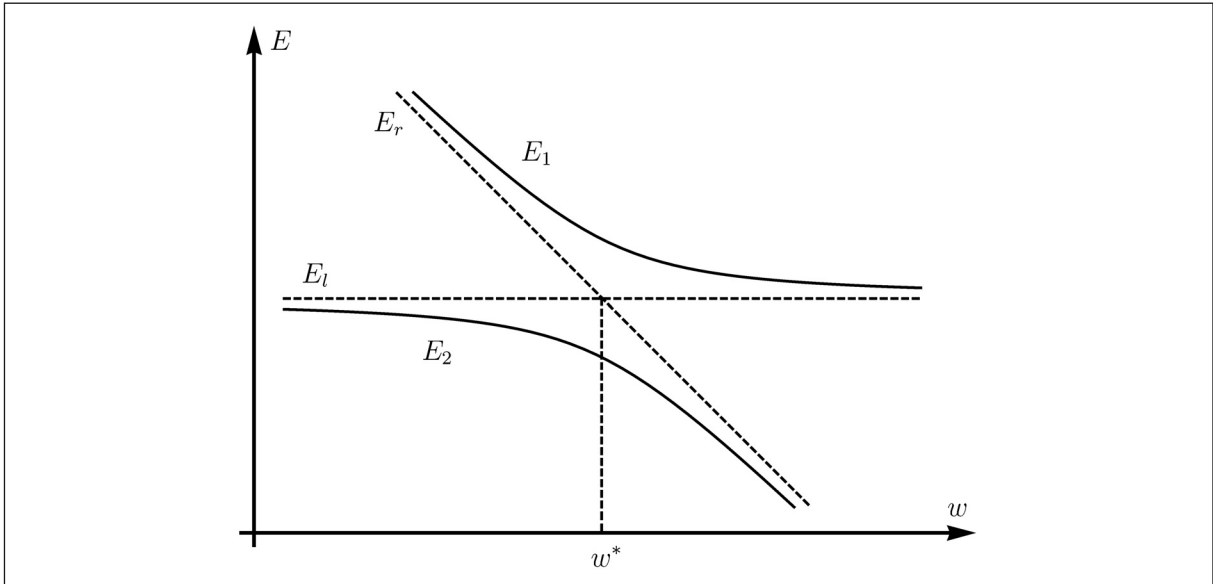


Рис. 3

где $E_2 - E_1 \approx \delta$. Очевидно, состояние Ψ совершает переходы между физической ямой (состояние ψ_l) и пробной потенциальной ямой (состояние ψ_r). При $t = \frac{\pi \hbar}{E_2 - E_1}$ состояние Ψ локализовано только в пробной яме, с экспоненциальной точностью при $\hbar \rightarrow 0$. Что и требовалось доказать.

Таким образом, мы получили серию значений $w = w_k^*$ таких, что фиксированный энергетический уровень E_l физической ямы пересекается с различными энергетическими уровнями $E_r^{(k)}$ из пробной потенциальной ямы. Для этих значений ширины пробной ямы w максимальная вероятность обнаружить состояние в пробной яме P_r^{\max} приближается к 1 (см. рис. 4).

Следовательно, если пробная яма настроена специальным образом, а именно, если ее ширина совпадает с w_k^* при некотором k , то пробная яма «захватывает» состояние с энергией E_l из исходной ямы.

В дополнение рассмотрим изменение величины P_r^{\max} , когда ширина пробной ямы w близка к критическому значению w_k^* (см. рис. 3 и 4). Используя формулу (7), получаем

$$\Psi_0 = \psi_l \cos \alpha + \psi_r \sin \alpha.$$

Следовательно, решение задачи Коши (1) имеет вид:

$$\Psi = \left(e^{\frac{iE_1}{\hbar} t} \cos^2 \alpha + e^{\frac{iE_2}{\hbar} t} \sin^2 \alpha \right) \psi_l + \cos \alpha \sin \alpha \left(e^{\frac{iE_2}{\hbar} t} - e^{\frac{iE_1}{\hbar} t} \right) \psi_r.$$

Вероятности $P_l(t)$ и $P_r(t)$ обнаружить состояние Ψ в левой и правой потенциальной яме в момент времени t определяются как:

$$P_l(t) = \int_{-\infty}^c |\Psi(x, t)|^2 dx,$$

$$P_r(t) = \int_c^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

Следовательно,

$$P_l(t) = \cos^4 \alpha + \sin^4 \alpha + 2 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \cos \left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right),$$

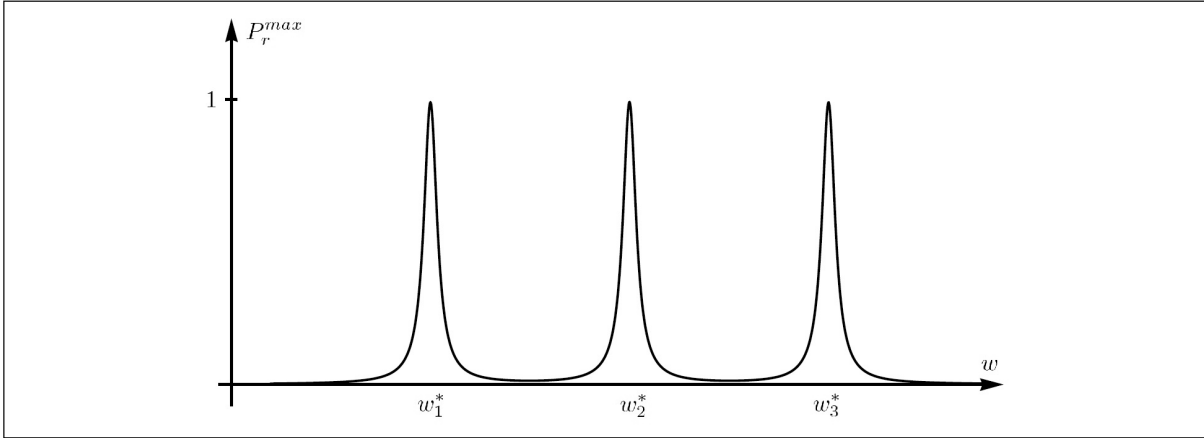


Рис. 4

$$P_r(t) = 2 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \left(1 - \cos \left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right) \right),$$

$$P_r^{\max} = \max_t P_r(t) = 4 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha.$$

Применяя формулу (8), получаем

$$P_r^{\max} = \frac{\delta^2}{\delta^2 + (E_r - E_l)^2} = \left(\frac{\delta}{\Delta} \right)^2. \quad (13)$$

Таким образом, состояние существенно проявляется в пробной яме, только если $|E_r - E_l| = O(\delta)$. Следовательно, ширина резонансных пиков (см. рис. 4) экспоненциально мала и имеет порядок $O(\delta)$ при $\hbar \rightarrow 0$.

5. Заключение

Для рассматриваемого двумного потенциала (рис.1) получены явные формулы для резонансных значений внешнего параметра (12) и для ширины соответствующих резонансных пиков (13). Данные результаты можно использовать для определения значения энергии начального состояния Ψ_0 , локализованного в физической (левой на рис.1) потенциальной яме. Для этого необходимо адиабатически увеличивать ширину w пробной (правой) ямы, начиная с такого маленького значения, когда в пробной яме еще отсутствуют связанные состояния. Таким образом, можно найти значение первого туннельного резонанса (первого резонансного пика на рис. 4) и определить соответствующее значение энергии из формулы (10). Дальнейшее увеличение ширины пробной ямы приведет сначала к исчезновению эффекта захвата, а затем опять к его появлению при следующем резонансном значении ширины w .

Эффект туннельного захвата состояния, локализованного в начальный момент только в одной яме, при специальной настройке внешнего параметра носит общий характер. Например, аналогичный эффект возникает, если изменять не ширину, а глубину пробной ямы или если рассматривать пробные ямы другой конфигурации, меняя их параметры. Данный эффект связан с квазипересечением (отталкиванием) энергетических уровней в двумном одномерном потенциале и возникает в общем случае двумного потенциала, зависящего от внешнего параметра.

Благодарности

Данная работа выполнена на кафедре прикладной математики при поддержке Научного фонда Национального исследовательского университета Высшая школа экономики.

Литература

1. *Razavy M.* Quantum theory of tunneling // World Scientific, 2003.
2. *Ankerhold J.* Quantum Tunneling in Complex Systems: The Semiclassical Approach // Springer Springer Tracts Mod. Phys., Vol. 224), Berlin, 2007.
3. *Hund F.* On the interpretation of molecular spectra. I // *Z. Phys.* **40**, 1927, 742-764.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Курс теоретической физики в 10 томах, Т.3 Квантовая механика (нерелятивистская теория) // М.: Наука 1974.
5. *Nieto M.M., Gutschick V.P., Bender C.M., Cooper F., Strottman D.* Resonances in quantum mechanical tunneling // *Phys. Lett. B* **163**, 1985, 336-342.
6. *Выборный Е.В.* Туннельное расщепление спектра и бислокализация собственных функций в несимметричной двойной яме // *ТМФ*, **178**(1), 2014, 107–130.
7. *Тавгер Б.А., Демиховский В.Я.* Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках // *УФН* **96**, 1968, 61–86.
8. *Демиховский В.Я., Савинский С.С.* Моделирование резонансных туннельных процессов в гетероструктуре, состоящей из двух квантовых ям // *ФТТ* **34**(8), 1992, 2382-2385.
9. *Harrell E.M.* On the rate of asymptotic eigenvalue degeneracy // *Commun. Math. Phys.* **60**, 1978, 73-95.
10. *Harrell E.M.* Double wells // *Commun. Math. Phys.* **75**, 1980, 239-261
11. *Simon B.* Instantons, double wells and large deviations // *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **8**, 1983, 323-326.
12. *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. IV. The ea on the elephant // *J. Funct. Anal.* **63**, 1985, 123-136.
13. *Agmon S.* Lectures on exponential decay of solutions of second-order elliptic equations: Bounds on eigenfunctions of N-body Schrödinger operators // Princeton Univ. Press (Mathematical Notes, Vol. 29), Princeton, N. J., 1982.
14. *Helfffer B., Sjostrand J.* Multiple wells in the semi-classical limit I // *Commun. Partial Differential Equations* **9**, 1984, 337-408.
15. *Helfffer B., Sjostrand J.* Puits multiples en limite semi-classique. II. Interaction moléculaire. Symétries. Perturbation // *Ann. Inst. H. Poincaré A* **42**(2), 1985, 127-212.
16. *Helfffer B., Sjostrand J.* Multiple Wells in the Semi-Classical Limit III. Interaction Through Non-Resonant Wells // *Math. Nachr.* **124**, 1985, 263-313.

ON THE TUNNEL CATCH EFFECT

E.V. Vybornyi, M.V. Karasev

National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia

evgeniy.bora@gmail.com, karasev.mikhail@gmail.com

Received 05.08.2014

We consider the one-dimensional Schrodinger operator in the semiclassical regime assuming that its double-well potential is the sum of a finite “physically given” well and a square shape probing well whose width or depth can be varied (tuned). We study the dynamics of initial state localized in the physical well. It is shown that if the probing well is not too close to the physical one and if its parameters are specially tuned, then the tunnel catch effect appears, i.e. the initial state starts tunneling oscillations between the physical and probing wells. The asymptotic formula for the probability of finding the state in the probing well is obtained. We also calculate the leading term of the tunneling splitting of energy levels in this double well potential.