

Уровни энергии в двойной яме при слабой связи ям друг с другом.

Задача 1: Найти уровни энергии в двойной яме с потенциалом

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| > D \\ -U_0, & d < |x| < D \quad (U_0 > 0) \\ 0, & |x| < d \end{cases}$$

(рис. 1) если барьер, разделяющий ямы широкий и ямы

можно считать слабо связанными. Считать, что в одиночной яме глубины U_0 и ширины $(D-d)$ уместятся много уровней, $D \gg d$, под барьером $\kappa d \gg 1$.

Задача 2: Рассмотреть, как будет меняться вероятность обнаружить частицу в каждой из ям, если в исходном состоянии частица была локализована в одной из них. Ямы считать слабо связанными.

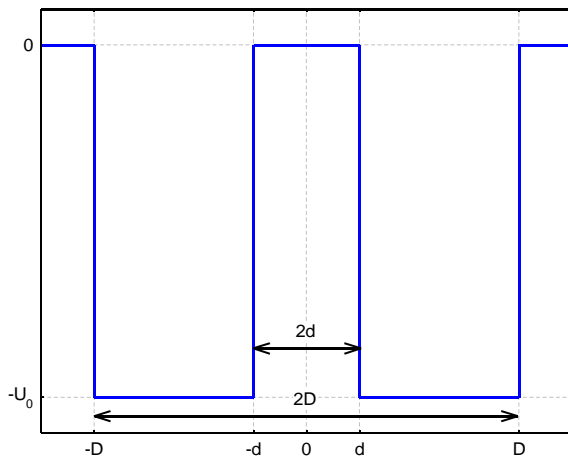


Рисунок 1: График $U(x)$.

Необходимые утверждения из теории:

1. Волновая функция стационарного состояния подчиняется стационарному уравнению

Шредингера $\hat{H} \psi = E \psi$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right) \psi = E \psi, \quad \text{временная эволюция описывается}$$

нестационарным уравнением Шредингера $i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$

2. Решение задачи для одиночной ямы считаем известным.
3. Формализм теории возмущения (см. Ландау и Лифшиц, т.3) считаем известным (формально не используется, но необходим для обоснования некоторых утверждений).

Решение:

В принципе, задача разрешима в общем виде: необходимо гладко «сшить» затухающие и осциллирующие решения на 4-х границах, что сведётся к системе из 8 линейных уравнений. Однако в интересующем нас пределе слабой связи ям можно получить компактное приближенное решение.

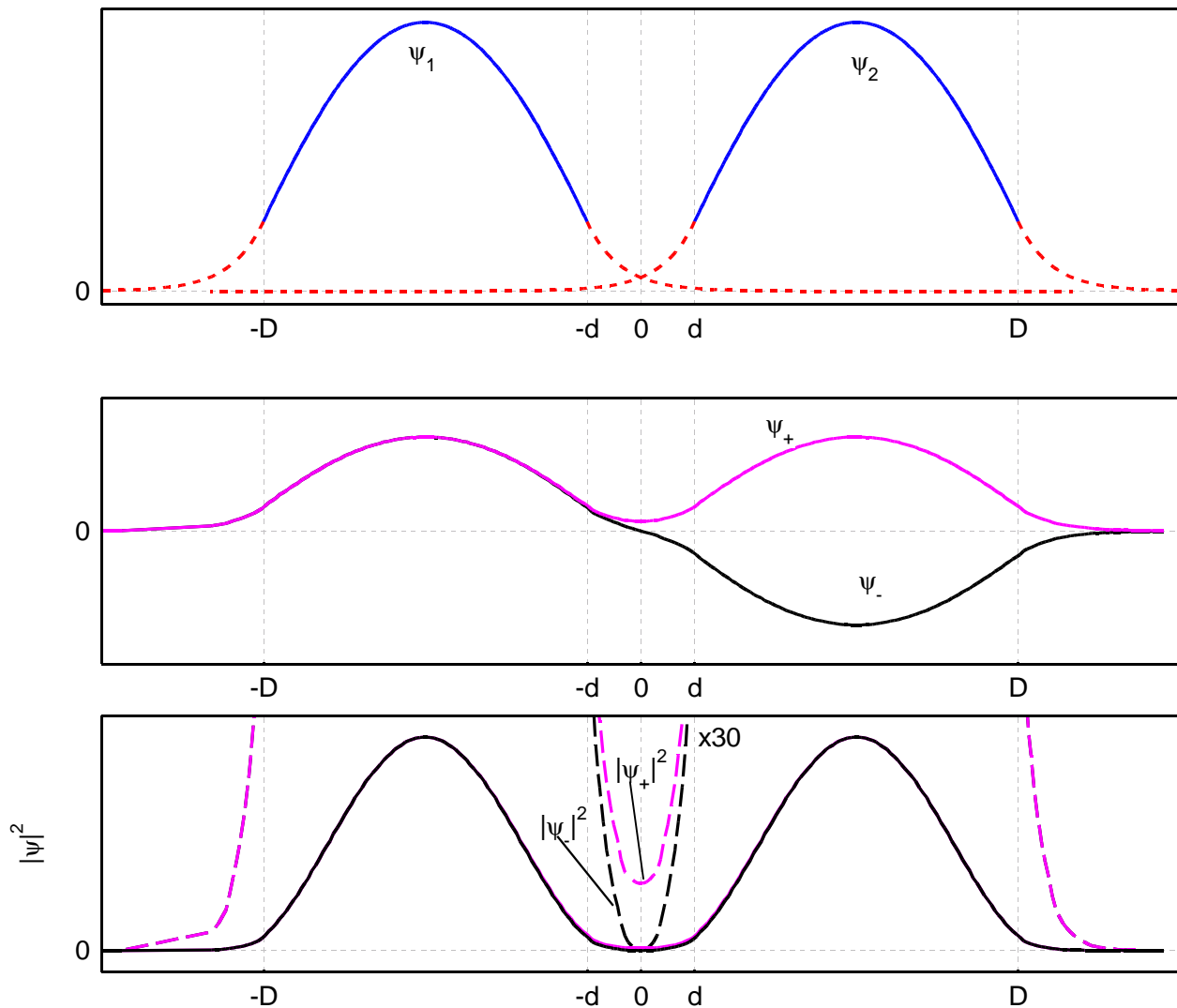
Качественные соображения.

Рисунок 2: Верхняя панель: Волновые функции ψ_1 и ψ_2 исходного приближения, пунктиром показаны волновые функции в классически запрещённых областях под барьером. Средняя панель: чётная и нечётная комбинация исходных волновых функций. Нижняя панель: плотность вероятности, пунктиром показаны кривые увеличенные в 30 раз.

Будем для определённости рассматривать состояния с наименьшей энергией. Наши рассуждения легко обобщаются на произвольный случай.

Если ямы находятся очень далеко друг от друга, то их можно считать независимыми и система уровней и волновые функции известны из решения задачи о симметричной яме. При этом каждый уровень энергии оказывается двукратно вырожденным (частица может быть либо в одной, либо в другой яме — есть два различных состояния с различными $\psi(x)$, но с совпадающими энергиями).

Потенциал симметричен относительно $x=0$. Поэтому и решения для волновой функции должны быть симметричными. Точнее, плотность вероятности $|\psi|^2$ должна быть симметрична относительно $x=0$. То есть $\psi(x)$ либо чётная, либо нечётная функция.

Пусть для несвязанных ям $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ волновые функции состояний с одинаковой энергией E_0 для частицы, находящейся в левой и правой яме соответственно. Если связь

ям слаба, то приближённое решение уравнения Шредингера можно искать в базисе этих двух функций (формальное обоснование относится к теории возмущений для вырожденного уровня). А по соображениям симметрии возможно всего две «правильных» (с точки зрения требований симметрии) комбинации этих функций: $\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 \pm \psi_2)$.

Количественное решение.

Симметрия нашей задачи позволяет сразу определить правильный вид волновых функций нулевого приближения.

Для нахождения энергии нужно найти матричный элемент гамильтониана

$$E_{\pm} = \langle \psi_{\pm} | \hat{H} | \psi_{\pm} \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \psi_1 \pm \psi_2 \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_1(x) + U_2(x) \right| \psi_1 \pm \psi_2 \right\rangle, \text{ где } U_1(x) \text{ и } U_2(x)$$

потенциалы, описывающие левую и правую ямы. По определению функций $\psi_{1,2}$

$$E_{\pm} = E_0 + \frac{1}{2} \left(\langle \psi_1 | U_2 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_2 | U_1 | \psi_2 \rangle \right) \pm \frac{1}{2} \left(\langle \psi_2 | U_2 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | U_1 | \psi_2 \rangle \right). \text{ Второе слагаемое}$$

описывает сдвиг уровней, третье — расщепление вырожденного уровня. Для ненулевого расщепления необходимо перекрытие волновых функций $\psi_{1,2}$ (точнее, проникновение волновой функции состояния в одной из ям в другую яму). При наличии такого перекрытия вырожденный уровень расщепится на два за счёт туннельных переходов между ямами. Это называют иногда туннельным расщеплением уровней.

Для вычисления рассмотрим туннельное расщепление нижнего уровня. Если (по условию) в изолированной яме уместится много уровней, то для волнового вектора основного состояния можно записать $ka = \frac{\pi}{2} - \delta, \delta \ll 1$, где $2a = D - d$ ширина ямы. Тогда из

$$\cos ka = \frac{ka}{\sqrt{\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}}} \text{ имеем } \delta = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}}. \text{ Внутри ямы исходная волновая функция}$$

основного состояния имеет вид $A \cos(k\xi)$, где переменная $\xi = x \pm \frac{D+d}{2}$ отсчитывается

от центра ямы. Для глубоких уровней в нормировке затухающие участки волновой функции можно не учитывать, тогда для нормировки имеем

$$1 \approx A^2 \int_{-a}^a \cos^2\left(\frac{\pi x}{2a}\right) dx = \frac{2a}{\pi} A^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 x dx = a A^2, \text{ т. е. } A = \frac{1}{\sqrt{a}} = \sqrt{\frac{2}{D-d}}$$

Значение волновой функции на границе равно $A\delta$. Для низкого уровня $E_0 \ll U_0$ и

коэффициент затухания в экспоненте $\kappa \approx \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$. При вычислении поправок к энергии нам нужны только экспоненциально затухающие «хвосты» волновых функций.

Вычисляем:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | U_2 | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_2 | U_1 | \psi_2 \rangle = -U_0 \int_{-D}^{-d} |\psi_2|^2 dx \approx -U_0 \int_{-\infty}^{-d} |\psi_2|^2 dx = \\ &= -\frac{U_0}{2\kappa} (A\delta)^2 e^{-4\kappa d} = -\frac{\pi^2}{8a^3} \frac{\hbar^3}{(2m)^{3/2} \sqrt{U_0}} e^{-4\kappa d} \end{aligned}$$

здесь мы воспользовались приближением $D \gg d$ для упрощения и тем, что на правой границе левой ямы значение $\psi_2 = A\delta e^{-2\kappa d}$. Аналогично для второго типа матричных

элементов

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | U_2 | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_1 | U_1 | \psi_2 \rangle = -U_0 \int_{-D}^{-d} \psi_1^* \psi_2 dx \approx -U_0 A \delta \int_{-D}^{-d} \psi_2 dx \approx -\frac{U_0 (A \delta)^2}{\kappa} e^{-2\kappa d} = \\ &= -\frac{\pi^2}{4a^3} \frac{\hbar^3}{(2m)^{3/2} \sqrt{U_0}} e^{-2\kappa d} \end{aligned}$$

здесь в силу быстрого спада экспоненциального хвоста функции ψ_2 функция ψ_1 заменена своим значением на границе.

Таким образом, уровень расщепляется на два подуровня с расщеплением

$$\Delta = \frac{\pi^2}{2a^3} \frac{\hbar^3}{(2m)^{3/2} \sqrt{U_0}} e^{-2\kappa d},$$

средняя линия между этими подуровнями немного смещается вниз, но это смещение имеет дополнительную малость ($e^{-4\kappa d}$ против $e^{-2\kappa d}$ для расщепления).

Минимальной оказывается энергия состояния, соответствующего чётной комбинации волновых функций. Это соответствует известной теореме квантовой механики, что в основном состоянии волновая функция не имеет нулей кроме как может быть на границах.

Осцилляции между ямами.

Рассмотрим теперь вторую задачу. Пусть изначально частица была локализована в левой яме. То есть, пусть исходное состояние описывалось волновой функцией ψ_1 . Эта функция не собственная для системы с двумя ямами, её изменение во времени описывается нестационарным уравнением Шредингера. Разложим волновую функцию в произвольный момент времени по собственным функциям гамильтониана ψ_{\pm} :

$$\psi(t) = a(t) e^{-iE_+ t/\hbar} \psi_+ + b(t) e^{-iE_- t/\hbar} \psi_-.$$

В исходный момент $t=0$ $a=b=1/\sqrt{2}$, условие нормировки $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Далее имеем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \hat{H} \psi \\ a'(t) e^{-iE_+ t/\hbar} \psi_+ + b'(t) e^{-iE_- t/\hbar} \psi_- &= 0 \end{aligned}$$

решением (так как ψ_{\pm} - ортогональные функции) является $a(t) = b(t) = \text{const} = \frac{1}{\sqrt{2}}$, мы полностью угадали временную зависимость, вынеся мнимые экспоненты с энергиями собственных состояний.

Тогда

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-iE_+ t/\hbar} \psi_+ + e^{-iE_- t/\hbar} \psi_- \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE t/(2\hbar)} \left(e^{-i\Delta t/(2\hbar)} \psi_+ + e^{i\Delta t/(2\hbar)} \psi_- \right)$$

где средняя энергия $\bar{E} = (E_+ + E_-)/2$, а расщепление уровней $\Delta = E_+ - E_-$. Небольшой перегруппировкой можно получить более наглядную запись

$$\psi(t) = e^{iE t/\hbar} \left[\cos\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \psi_1 - i \sin\left(\frac{\Delta t}{2\hbar}\right) \psi_2 \right].$$

Таким образом, если частицу изначально локализовать в одной из ям, то со временем её положение будет осциллировать. Через время $\frac{\Delta \tau}{2\hbar} = \frac{\pi}{2}$ частица перейдёт в состояние, локализованное в другой яме и так далее.

Такие осцилляции являются общим свойством квантовомеханических систем: если система переведена в несобственное состояние, то вероятности её обнаружить в других состояниях этого несобственного базиса волновых функций периодически меняется во времени.

Одним из фундаментальных проявлений этого эффекта являются наблюдаемые как в природных, так и в реакторных экспериментах осцилляции нейтрино. Рождающиеся в процессах слабого взаимодействия электронные, мюонные и тау-нейтрино являются не собственными состояниями, поэтому при распространении потока нейтрино (образовавшихся, например, в результате термоядерных реакций на Солнце) происходит (с точки зрения наблюдателя) превращение одного типа нейтрино в другой. Как мы видели в нашей простой модели для возникновения осцилляций необходимо расщепление между собственными значениями энергии, отсюда следует наличие у нейтрино массы (различие в энергии релятивистских частиц может быть связано только с различием их масс, для безмассовой частицы $E = pc$), различие этих масс у разных нейтрино и открывается возможность к оценке этих масс (верхняя граница массы нейтрино около 0.3 эВ).