

ТУНЕЛЮВАННЯ ЧАСТИНКИ З МАСОЮ, ЗАЛЕЖНОЮ ВІД КООРДИНАТИ, ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦІАЛЬНИЙ БАР'ЄР

Н.А.Сідлецька

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова, 12, Львів, 79005
e-mail: natali@ktf.franko.lviv.ua

У даній статті досліджується тунелювання частинки з масою, залежною від координати, через потенціальний бар'єр. Знайдено коефіцієнт проходження крізь масовий і потенціальний бар'єри, та досліджено його залежність від впорядкування маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії. Показано, що при великому відношенню мас, ці бар'єри працюють як фільтри, пропускаючи хвилі лише у вузьких діапазонах хвильового вектора.

Вступ

Протягом останніх років активно вивчаються квантові гамільтоніани з масою, залежною від координати, які застосовують для дослідження руху електронів у неоднорідних кристалах [1], квантових точках [2], рідких кристалах [3]. Цей формалізм використовують для опису ядер [4], квантових рідин [5], кластерів з металу [6].

Загальний вигляд одновимірного гамільтоніану з масою, залежною від координати запропонований вон Роосом у [7], задається формулою

$$H_{vR} = \frac{1}{4} (m^\alpha p m^\beta p m^\gamma + m^\gamma p m^\beta p m^\alpha) + U(x), (1)$$

де $m = m(x)$, $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$, $U(x)$ – потенціальна енергія, коефіцієнти: $\alpha + \beta + \gamma = -1$. Залежно від значень цих коефіцієнтів будемо мати різне впорядкування маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії, а отже й різні гамільтоніани [8-10].

Для розв'язку рівняння Шредінгера з масою, залежною від координати використовують метод суперсиметрії та формінваріантність [11], алгебру Лі [12-15], точково-канонічні перетворення [16-18].

У даній статті ми досліджуємо коефіцієнт проходження частинки через потенціальний і масовий бар'єри. Фізично таку систему утворюють послідовним з'єднанням напівпровідника, тонкої плівки та напівпровідника. На границі з'єднання утворюється потенціальний бар'єр, крім того маса електрона змінюється вздовж напрямку руху. Теоретично цю систему можна описати моделю, що має назву модель із стрибкоподібною масою, яка схематично зображена на рис.1. Зліва і справа від бар'єру маса частинки рівна m , всередині бар'єру — m_1 . У кожній з цих областей маса постійна, проте на границі з'єднання вона змінюється стрибкоподібно. Таким чином, ми розглядаємо бар'єри утворені як потенціалом, так і масою. Ця модель накладає обмеження на впорядкування маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії, коефіцієнти в гамільтоніані (1) повинні задовільняти такій умові: $\alpha = \gamma$, $2\alpha + \beta = -1$ [19]. У цій статті також було показано, що на хвильову функцію $\psi(x)$ повинні накладатися певні обмеження, а саме, на границі з'єднання $m^\alpha \psi$ та $m^{\alpha+\beta} \psi'$ повинні бути неперервними.

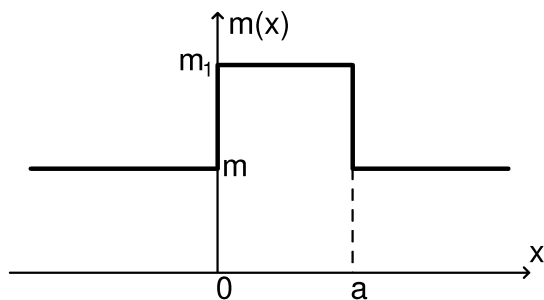


Рис.1: Модель системи з стрибкоподібною масою.

Проблема тунелювання частинки, з масою залежною від координати, розглядалася в [20,21]. Так, у [20] знайдено точний розв'язок рівняння Шредінгера з масою, залежною від координат для постійного потенціалу. Автори досліджували модель, в якій зовні бар'єру маса є постійною, а в середині — певна функція від координати. Для такої системи вони знайшли загальний вигляд коефіцієнта проходження. В [21] для кількох часткових випадків мас, залежних від координати, знайдено коефіцієнти проходження. Проте автори розглядали лише часткове впорядкування маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії, а саме $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$.

В даній роботі, ми розглянули загальний випадок впорядкування стрибкоподібних мас та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії $\alpha = \gamma$, $2\alpha + \beta = -1$ У другому розділі розглянемо проходження частинки крізь масовий бар'єр. У третьому розділі дослідимо розсіювання на масовому й на потенціальному бар'єрах. Висновки містяться в четвертому розділі.

Тунелювання крізь масовий бар'єр

Розглянемо рух вільної частинки (потенціальна енергія всюди рівна нулеві) через бар'єр утворений стрибком мас (рис.1):

$$m(x) = \begin{cases} m, & x < 0, \\ m_1, & 0 \leq x \leq a, \\ m, & x > a. \end{cases} \quad (2)$$

Нехай j — густина потоку ймовірності для падаючої частинки, j_1 — для відбитої частинки, а j_2 — для частинки, що пройшла через масовий бар'єр. Згідно з законом збереження потоку,

$$j = j_1 + j_2 \quad (3)$$

Коефіцієнти проходження крізь бар'єр D і відбивання від бар'єру R :

$$D = \frac{j_2}{j}, \quad R = \frac{j_1}{j}. \quad (4)$$

Для розрахунку величин D та R необхідно знайти хвильову функцію зліва від бар'єра $x < 0$, справа від нього $x > a$ та всередині бар'єра $0 \leq x \leq a$, врахувавши умови зшивання хвильової функції та її першої похідної в точках $x = 0$, $x = a$.

У першій області $x < 0$ рівняння Шредінгера та його розв'язок мають вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} = E \psi_1, \quad (5)$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx}, \quad (6)$$

де A_1 — амплітуда падаючої хвилі, A_2 — амплітуда відбитої хвилі, хвильове число — $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Для другої області $0 \leq x \leq a$ рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} = E \psi_2 \quad (7)$$

має загальний розв'язок

$$\psi_2(x) = B_1 e^{ik_1 x} + B_2 e^{-ik_1 x}, \quad (8)$$

хвильове число $k_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$.

У третій області $x > a$ рівняння Шредінгера та хвильова функція записуються:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_3}{dx^2} = E \psi_3, \quad (9)$$

$$\psi_3(x) = C_1 e^{ikx}. \quad (10)$$

C_1 — амплітуда хвилі, що пройшла через бар'єр.

Умови зшивання хвильової функції та її першої похідної в точках $x = 0$ та $x = a$ є такі:

$$m^\alpha \psi_1(0) = m_1^\alpha \psi_2(0),$$

$$m^{\alpha+\beta} \psi_1'(0) = m_1^{\alpha+\beta} \psi_2'(0),$$

$$m_1^\alpha \psi_2(a) = m^\alpha \psi_3(a),$$

$$m_1^{\alpha+\beta} \psi_2'(a) = m^{\alpha+\beta} \psi_3'(a).$$

Використовуючи явний вигляд хвильової функції та визначення потоку, знайдемо коефіцієнт прозорості бар'єру

$$D = \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\left(\frac{m}{m_1} \right)^\beta \frac{k}{k_1} - \left(\frac{m_1}{m} \right)^\beta \frac{k_1}{k} \right)^2 \sin^2(k_1 a)}. \quad (11)$$

Враховуючи вигляди хвильових векторів k та k_1 , ми отримуємо такий вираз для коефіцієнта прозорості:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m^{2\beta+1} - m_1^{2\beta+1})^2}{4(m_1 m)^{2\beta+1}} \sin^2(k_1 a)}. \quad (12)$$

Для часткового впорядкування маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$ цей результат спрощується до:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m - m_1)^2}{4m_1 m} \sin^2(k_1 a)}, \quad (13)$$

який співпадає з коефіцієнтом проходження у [21].

Якщо порівняти вигляд хвилі, що падає на бар'єр, тобто в області $x < 0$, з виглядом хвилі після проходження бар'єра (область $x > a$), то її амплітуда буде відрізнятись на такий множник:

$$\frac{C_1}{A_1} = \frac{e^{-ika+\varphi}}{\sqrt{\cos k_1 a + \frac{1}{4} \left(\left(\frac{m}{m_1} \right)^\beta \frac{k}{k_1} + \left(\frac{m_1}{m} \right)^\beta \frac{k_1}{k} \right) \sin(k_1 a)}}, \quad (14)$$

де φ — зсув фаз, який дорівнює

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{1}{2} \left(\left(\frac{m}{m_1} \right)^\beta \frac{k}{k_1} + \left(\frac{m_1}{m} \right)^\beta \frac{k_1}{k} \right) \operatorname{tg}(k_1 a). \quad (15)$$

На рис. 2 зображено залежність коефіцієнта прозорості від енергії при різних значеннях коефіцієнта β . Порівнюючи ці залежності з тими, що є для коефіцієнта прозорості для потенціального бар'єру, але для постійної маси [22] бачимо, що ко-

ефіцієнт прозорості не прямує до одиниці при великих значеннях енергії, а змінюється періодично щоразу збільшуючи період. Зауважимо: коли ми виберемо впорядкування, при якому $\beta = -\frac{1}{2}$, то коефіцієнт прозорості буде рівний $D = 1$.

Для випадку, коли одна маса набагато більша від іншої $m \gg m_1$ і $\beta > 1$, коефіцієнт проходження, що задається формулою (12), можна наблизити таким виразом:

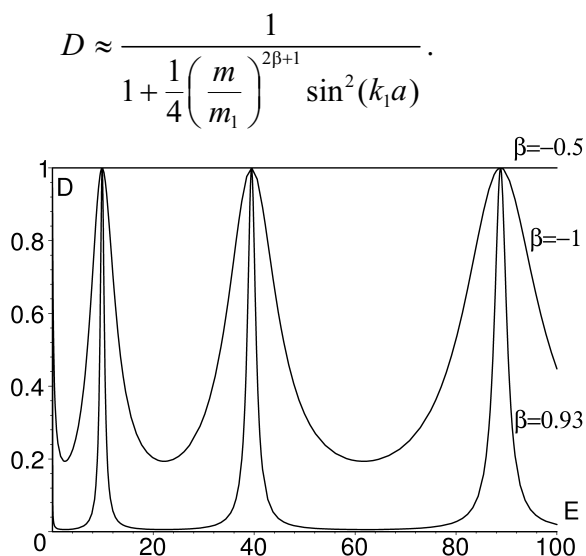


Рис.2: Залежність коефіцієнта прозорості від енергії для $m = 6$, $m_1 = 1$ в одиницях $\frac{2m_1 a^2}{\hbar^2} = 1$.

Якщо значення $\sin(k_1 a)$ є порядку одиниці, то $D \ll 1$ — бар'єр практично не пропускає частинок. Коефіцієнт пропускання значний, коли значення виразу $\frac{1}{4} \left(\frac{m}{m_1} \right)^{2\beta+1} \sin^2(k_1 a)$ невелике. Тому через бар'єр проходять лише частинки з хвильовими векторами у діапазоні

$$k_1 = \left[\frac{\pi n}{a} - \frac{2}{a} \left(\frac{m_1}{m} \right)^{\frac{2\beta+1}{2}}; \frac{\pi n}{a} + \frac{2}{a} \left(\frac{m_1}{m} \right)^{\frac{2\beta+1}{2}} \right].$$

Подібний результат спостерігаємо, коли $m_1 \gg m$. Таким чином, при великому відношенні мас бар'єр працює як

фільтр, пропускаючи хвилю лише у вузькому діапазоні хвильових векторів.

Тунелювання частинки з масою, залежною від координати, через потенціальний бар'єр

Розглянемо більш загальну задачу, коли поряд із стрибком маси є стрибок потенціальної енергії:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U = \text{const}, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x \geq a. \end{cases} \quad (16)$$

Рівняння Шредінгера для хвильових функцій ψ_1 та ψ_3 залишаються без змін, лише для ψ_2 воно поміняється та матиме вигляд:

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + U \psi_2 = E \psi_2 \quad (17)$$

Розв'язок цього рівняння буде подібний (8), проте хвильовий вектор матиме тепер такий вигляд:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} (E - U)} \quad (18)$$

Випадок $E > U$. Підставляючи у (11) хвильові вектори з потенціалом, ми отримаємо наступний вигляд коефіцієнта прозорості для загального впорядкування стрибкоподібної маси та оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії $\alpha = \gamma$, $2\alpha + \beta = -1$:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m^{2\beta+1} E - m_1^{2\beta+1} (E - U))^2}{4(m_1 m)^{2\beta+1} E(E - U)}} \sin^2(k_1 a) \quad (19)$$

Коефіцієнт прозорості для часткового впорядкування $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$ має вигляд:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m(E - U) - m_1 E)^2}{4m_1 m E(E - U)}} \sin^2(k_1 a), \quad (20)$$

що збігається з результатом, отриманим у [21].

Випадок $E < U$. Ці результати легко перенести на випадок $E < U$ зробивши аналітичне продовження. Маємо:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1(E-U)}{\hbar^2}} = i\kappa,$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_1(U-E)}{\hbar^2}}.$$

Проробивши незначні математичні перетворення у знаменнику для коефіцієнтів прозорості (20), (19) ми отримаємо наступні вирази для часткового і загального впорядкування

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m(U-E) - m_1E)^2}{4m_1mE(U-E)} \text{sh}^2(\kappa a)}, \quad (21)$$

$$D = \frac{1}{1 + \frac{(m^{2\beta+1}E - m_1^{2\beta+1}(U-E))^2}{4(m_1m)^{2\beta+1}E(U-E)} \text{sh}^2(\kappa a)}. \quad (22)$$

Випадок E прямує до U . Коли енергія частинки, що налітає на бар'єр, дорівнює його висоті, тобто $E \rightarrow U$, то коефіцієнти прозорості набувають вигляду:

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U \left(\frac{m_1}{m}\right)^2}{4} \Big/ \frac{\hbar^2}{2a^2m}}, \quad (23)$$

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U \left(\frac{m}{m_1}\right)^{2\beta+1}}{4} \Big/ \frac{\hbar^2}{2a^2m_1}}. \quad (24)$$

На рис. 3 зображено залежність коефіцієнта прозорості від енергії для потенціального бар'єру при різних значеннях коефіцієнту β . Коли $\beta = -\frac{1}{2}$, коефіцієнти проходження через потенціальні бар'єри не залежать від розподілу мас. Дані результати співпадають з отриманими у випадку постійної маси [22].

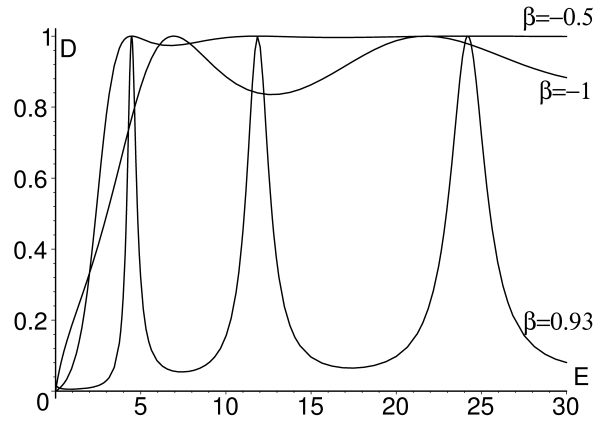


Рис.3: Залежність коефіцієнта прозорості від енергії для $U = 2$, $m = 4$, $m_1 = 1$ в одиницях $\frac{2m_1a^2}{\hbar^2} = 1$.

Висновок

У даній статті ми досліджували коефіцієнт проходження частинки з масою, залежною від координати, через потенціальний бар'єр. Отримано вирази для коефіцієнта проходження як для загального впорядкування стрибкоподібної маси так і для оператора імпульсу в операторі кінетичної енергії з коефіцієнтами $\alpha = \gamma$, $2\alpha + \beta = -1$, та часткового впорядкування з коефіцієнтами — $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$. Для різних значень β графічно зображено залежність коефіцієнта проходження від енергії частинки для масового та потенціального бар'єрів. На відміну від випадку потенціального бар'єру з постійною масою, коефіцієнт прозорості для потенціального і масового бар'єрів не прямує до одиниці при великих значеннях енергії, а змінюється періодично щоразу збільшуючи період. Цікаво, що при певних відношеннях мас бар'єр виступає як фільтр, пропускаючи хвилі лише в певному діапазоні хвильових векторів. Коефіцієнт проходження через потенціальний бар'єр для часткового впорядкування $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = -1$ співпадає з отриманим у [21].

Література

1. M. R. Geller and W. Kohn, Phys. Rev. Lett. 70 3103 (1993)
2. L. Serra and E. Lipparini, Europhys. Lett. 40, 667 (1997).
3. M. Barranco et al., Phys. Rev. B 56, 8997 (1997).
4. P. Ring and P. Schuck The Nuclear Many Body Problem (New York: Springer) (1980).
5. F. Arias de Saavedra et al., Phys. Rev. B 50, 4248 (1994).
6. A. Puente, Ll. Serra and M. Casas, Z. Phys. D 31, 283 (1994).
7. O. von Roos, Phys. Rev. B 27, 7547 (1983).
8. D. J. BenDaniel and Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966).
9. Q.-G. Zhu and H. Kroemer, Phys. Rev. B 27, 3519 (1983).
10. G. Bastard, Phys. Rev. B 24, 5693 (1981).
11. B. Baghchi, A. Banerjee, C. Quesne and V. M. Tkachuk, J. Phys. A: Math. Gen. 38, 2929 (2005).
12. Y. Alhassid et al., Ann. Phys., NY 167, 181 (1986).
13. J. Wu and Y. Alhassid, J. Math. Phys. 31, 557 (1990).
14. M. J. Englefiel and C. Quesne, J. Phys. A: Math. Gen. 24, 3557 (1991).
15. G. Levai, J. Phys. A: Math. Gen. 27, 3809 (1994).
16. A. Bhattacharjie and E. C. G. Sudarshan, Nuovo Cimento 25, 864 (1962).
17. G. A. Natanzon, Theor. Math. Phys. 38, 146 (1979).
18. G. Levai, J. Phys. A: Math. Gen. 22, 689 (1989).
19. R. A. Morrow and K. R. Brownstein, Phys. Rev. B 30, 678 (1984).
20. R. Koç, M. Koca and G. Şahinoğlu, Eur. Phys. J. B 48, 583 (2005).
21. J.-M. Levy-Leblond, Eur. J. Phys. 13, 215 (1992).
22. І. О. Вакарчук Квантова механіка (ЛНУ, Львів, 2004).

TUNNELING OF A PARTICLE WITH A POSITION-DEPENDENT MASS THROUGH A POTENTIAL BARRIER

N.A. Sidletska

Ivan Franko National University of Lviv,
12 Drahomanov St., Lviv, 79005
e-mail: natali@ktf.franko.lviv.ua

Tunneling of a particle with a position-dependent mass through a potential barrier is investigated. Coefficient of transmission through mass and potential barriers is found. Its dependence on the ordering of the mass and momentum operators is also considered. It is shown that for large mass ratio these barriers behave as filters transmitting only the waves in narrow wave-vector bands.