Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Бурдов, Некоторые свойства стационарных состояний двухуровневых систем, *ТМФ*, 1996, том 108, номер 1, 69–78

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1177>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.80.181.102

26 апреля 2023 г., 18:02:29

В. А. Бурдов

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДВУХУРОВНЕВЫХ СИСТЕМ

Показано, что существует некая функция $J(x)$, сохраняющая свое значение в любой точке x при произвольных изменениях потенциальной энергии двухуровневой системы. Приведены оценки границ области применимости метода ЛКАО для вычисления волновых функций одномерной двухуровневой системы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из упрощений, возникающих при рассмотрении различных квантовых систем, является двухуровневое приближение, которое позволяет получить наглядные результаты, не прибегая к громоздким вычислениям. Так, например, в работах [1–3] с помощью приближения двухуровневой системы исследована многоэлектронная динамика в гетероструктурах на основе квантовых ям.

Расчет волновых функций двухуровневой системы и величины расщепления уровней может быть проведен по методу, который хорошо известен в молекулярной физике (см., например, [4, 5]) как метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). В случае двухъямного потенциала волновая функция ищется в виде суперпозиции волновых функций в изолированных ямах, а коэффициенты разложения определяются из условия минимальности энергии данного состояния [6, 7]. При этом, если исходный потенциал симметричный, волновые функции двух близких уровней имеют вид

$$\chi_0(x) = (\psi(x) + \psi(-x))/\sqrt{2}, \quad \chi_1(x) = (\psi(x) - \psi(-x))/\sqrt{2}.$$

Разность энергий двух уровней $\Delta = E_1 - E_0$ определяется при этом интегралом перекрытия волновых функций в изолированных ямах и поэтому является малой. Волновые же функции обладают тем свойством, что их квадраты отличаются на величину, также определяемую произведением $\psi(x)\psi(-x)$. Таким образом, можно считать, что

$$|\chi_0^2(x) - \chi_1^2(x)| < C_0 \cdot \Delta, \quad (1)$$

где C_0 – некоторая размерная постоянная. В квазиклассическом приближении, как показано в [8], величина Δ экспоненциально мала по параметру $\int_c^d dx |p(x)|/\hbar$ (где c и d – границы классически запрещенной области).

Недостаток такого вариационного метода состоит в том, что с его помощью невозможно оценить величину ошибки, совершаемой при замене истинной волновой функции

линейной комбинацией волновых функций в изолированных ямах. Задача данной работы состоит как раз в проведении этих оценок, а также в выяснении некоторых закономерностей, присущих волновым функциям двухуровневых систем.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ЗАДАЧИ

Будем рассматривать одномерную квантовую систему с дискретным спектром собственных значений E_n и допустим, что в спектре существуют два близких уровня таких, что

$$\Delta/(E_2 - E_1) \rightarrow 0. \quad (2)$$

Для простоты предположим, что условие (2) выполняется для основного и первого возбужденного состояний. Гамильтониан $\hat{H}$ и собственные функции стационарных состояний $\chi_n(x)$ будем считать известными. При этом мы не будем ограничиваться случаем, когда гамильтониан инвариантен относительно замены $x \rightarrow -x$, а исследуем более общую ситуацию.

Рассмотрим также другую систему, близкую к исходной, с гамильтонианом

$$\hat{H}_\mu = \hat{H} + \mu \cdot U(x), \quad (3)$$

где $U(x)$ — произвольная функция, описывающая возмущение, а μ — некоторый параметр. Относительно функции $U(x)$ будем предполагать лишь то, что она не меняет граничных условий, накладываемых на волновые функции системы. В этом случае спектр системы (3) и ее волновые функции могут быть описаны рядами теории возмущений (см., например, [8])

$$\begin{aligned} E_n(\mu) &= E_n + \mu U_{nn} + O(\mu^2), \\ \psi_0(x) &= \chi_0(x) - \mu \frac{U_{01}}{\Delta} \chi_1(x) - \mu \sum_{k=2}^{\infty} \frac{U_{0k}}{E_k - E_0} \chi_k(x) + O(\mu^2), \\ \psi_1(x) &= \chi_1(x) + \mu \frac{U_{01}}{\Delta} \chi_0(x) - \mu \sum_{k=2}^{\infty} \frac{U_{1k}}{E_k - E_1} \chi_k(x) + O(\mu^2), \end{aligned} \quad (4)$$

где введено стандартное обозначение U_{ij} для матричного элемента возмущения, а символом $O(\mu^2)$ обозначены все члены ряда порядка μ^2 и выше.

Умножим уравнение Шредингера для волновой функции $\psi_0(x)$ на $\psi_1(x)$, а уравнение для $\psi_1(x)$ на $\psi_0(x)$, вычтем из одного другое и проинтегрируем в пределах от x до ∞ . Будем иметь

$$\psi_0(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_0'(x) = 2m\Delta(\mu)\hbar^2 \int_x^\infty dy \psi_0(y)\psi_1(y), \quad (5)$$

где $\Delta(\mu) = E_1(\mu) - E_0(\mu)$, а штрих означает дифференцирование по координате. Полагая в уравнении (5) параметр μ равным нулю, получим в точности такое же уравнение,

связывающее волновые функции исходной системы $\chi_0(x)$ и $\chi_1(x)$ с малой разницей энергий Δ . Дифференцируя (5) по μ в точке $\mu = 0$, найдем

$$\begin{aligned} (U_{11} - U_{00}) \int_x^\infty dy \chi_0(y) \chi_1(y) - U_{01} \int_x^\infty dy (\chi_1^2(y) - \chi_0^2(y)) = \\ = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=2}^\infty \left\{ \frac{U_{0k}}{E_k - E_1} (\chi_1(x) \chi'_k(x) - \chi_k(x) \chi'_1(x)) - \right. \\ \left. - \frac{U_{1k}}{E_k - E_0} (\chi_0(x) \chi'_k(x) - \chi_k(x) \chi'_0(x)) \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

В дальнейшем в целях сокращения записи левую часть равенства (6) будем обозначать как $J(x)$ и примем к сведению, что функция $J(x)$, определяемая волновыми функциями двух близких уровней $\chi_{0,1}(x)$, является еще и функционалом относительно произвольной функции $U(x)$. Полученные уравнения (5) и (6) помогут нам впоследствии исследовать некоторые характерные особенности волновых функций двухуровневых систем и произвести соответствующие оценки.

3. ИНВАРИАНТ ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЫ

Остановимся теперь на одном важном свойстве функции $J(x)$, предварительно заметив следующее. Поскольку для рассматриваемой нами квантовой системы с потенциальной энергией $V(x)$ выполняется условие (2), любое изменение потенциальной энергии (сопоставимое с разницей энергий Δ) не приводит к каким-либо качественным изменениям в энергетическом спектре системы. В то же время новые волновые функции основного и первого возбужденного состояний могут при этом существенно отличаться от старых.

Вычислим новые волновые функции $\tilde{\chi}_{0,1}(x)$, отвечающие потенциальной энергии

$$\tilde{V}(x) = V(x) + W(x).$$

На величину возмущения $W(x)$ наложим условие малости

$$W_{ij}/(E_2 - E_1) \rightarrow 0, \quad (7)$$

однако предположим, что по сравнению с величиной Δ возмущение может изменяться в широких пределах.

При выполнении условия (7) для вычисления волновых функций и энергетического спектра $\tilde{E}_{0,1}$ двухуровневой системы можно применить основное приближение теории возмущений для вырожденных состояний, что дает для разности энергий двух уровней

$$\delta = \tilde{E}_1 - \tilde{E}_0 = \sqrt{(\Delta + W_{11} - W_{00})^2 + 4W_{01}^2}.$$

В этом выражении, как и в выражении (7), матричные элементы W_{ij} вычислены в старом базисе $\chi_{0,1}(x)$. Для произведения волновых функций и разности их квадратов будем иметь

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_0(x) \tilde{\chi}_1(x) &= \frac{\Delta + W_{11} - W_{00}}{\delta} \chi_0(x) \chi_1(x) - \frac{W_{01}}{\delta} (\chi_1^2(x) - \chi_0^2(x)), \\ \tilde{\chi}_1^2(x) - \tilde{\chi}_0^2(x) &= \frac{\Delta + W_{11} - W_{00}}{\delta} (\chi_1^2(x) - \chi_0^2(x)) + 4 \frac{W_{01}}{\delta} \chi_0(x) \chi_1(x). \end{aligned} \quad (8)$$

Определим функцию $\tilde{J}(x)$ в произвольном базисе так же, как это было сделано в базисе $\chi_{0,1}(x)$,

$$\tilde{J}(x) = (\tilde{U}_{11} - \tilde{U}_{00}) \int_x^\infty dy \tilde{\chi}_0(y) \tilde{\chi}_1(y) - \tilde{U}_{01} \int_x^\infty dy (\tilde{\chi}_1^2(y) - \tilde{\chi}_0^2(y)), \quad (9)$$

где $\tilde{U}_{ij}$ – матричные элементы произвольной функции $U(x)$ в новом базисе $\tilde{\chi}_{0,1}$. Подставляя в определение (9) соотношения (8), получим

$$\tilde{J}(x) = J(x). \quad (10)$$

Равенство (10) представляет собой своеобразный “закон сохранения” – функция $J(x)$ оказывается инвариантом двухуровневой системы по отношению к изменениям потенциальной энергии $V(x)$.

Попробуем теперь произвести оценку абсолютной величины функции $J(x)$, которая, как следует из ее определения, задается волновыми функциями, а следовательно, исходным потенциалом системы $V(x)$. Допустим, что потенциал $V(x)$ подобран таким образом, что распределения по координатам в основном и первом возбужденном состояниях отличаются очень незначительно:

$$|\chi_0^2(x) - \chi_1^2(x)| < C \cdot \epsilon, \quad (11)$$

где C – размерная постоянная, а $\epsilon \rightarrow 0$.

В этом случае, как видно из (8), при $W_{01} \ll \Delta$ новые волновые функции практически не отличаются от старых, и для них также будет выполнено условие (11). Если же реализуется обратное неравенство $W_{01} \gg \Delta$, тогда малым становится уже произведение функций $\tilde{\chi}_0(x) \tilde{\chi}_1(x)$, в то время как разность квадратов никакой малости не содержит. Изменяя потенциал возмущения $W(x)$, можно реализовать любую из этих двух ситуаций или же какую-либо промежуточную, когда ни произведение функций, ни разность их квадратов не являются малыми величинами (так будет, например, если исходный потенциал двухуровневой системы симметричный, а потенциал возмущения антисимметричный и при этом $W_{01} \sim \Delta$). Очевидно, справедливо и обратное: всегда можно подобрать такое возмущение для произвольной двухуровневой системы, что новые волновые функции будут подчиняться неравенству (11). Единственное условие, которое должно быть при этом выполнено, – чтобы при изменении потенциальной энергии от $V(x)$ до $V(x) + W(x)$ система всегда оставалась двухуровневой, т.е. $\delta/(\tilde{E}_2 - \tilde{E}_1) \rightarrow 0$, что происходит автоматически при выполнении условия (7). Если же условие (7) нарушается, систему уже нельзя считать двухуровневой и полученные здесь выражения утрачивают смысл. Верхний из двух уровней при этом отщепляется от основного и по мере увеличения возмущения приближается к уровню $\tilde{E}_2$. В какой-то момент, при определенных значениях $W(x)$, уже первый и второй уровни ($\tilde{E}_1$ и $\tilde{E}_2$) образуют двухуровневую систему, для описания которой снова можно применить полученные ранее выражения.

Попытаемся теперь определить величину ϵ , введенную в (11), для чего предварительно заметим следующее. Поскольку волновая функция основного состояния не должна иметь нулей, а функция $\chi_1(x)$ один раз обращается в нуль, можно сделать вывод, принимая во внимание неравенство (11), что функция $\chi_0(x)$ имеет минимум в некоторой точке

$x = x_0$. Обозначая через x_1 значение координаты x , при котором $\chi_1(x)$ обращается в нуль, найдем из (5), полагая $\mu = 0$,

$$\chi_0(x_0)\chi_1'(x_0) - \chi_0(x_1)\chi_1'(x_1) = \frac{2m\Delta}{\hbar^2} \int_{x_1}^{x_0} dx \chi_0(x)\chi_1(x). \quad (12)$$

Оценим величину интеграла в правой части (12). Для определенности будем считать, что $x_0 > x_1$, $\chi_0(x) > 0$ и $\chi_1(x) > 0$ при $x > x_1$. Следовательно, значение интеграла должно быть меньше произведения $(x_0 - x_1)\chi_0(x_1)\chi_1(x_0)$. Учитывая (11), можно записать при $x > x_1$

$$|\chi_0(x) - \chi_1(x)| < A \cdot \epsilon,$$

что дает $\chi_0(x_1) < A \cdot \epsilon$, $\chi_1(x_0) < 2A \cdot \epsilon$. Связь между постоянными A и C легко может быть получена с помощью (11) (например, можно выбрать $C = 2A\chi_{\max}$). Таким образом, правая часть (12) не превышает значения

$$\frac{4mA^2}{\hbar^2} \Delta \epsilon^2 (x_0 - x_1),$$

и в силу малости полученного выражения справедливы следующие приближенные равенства:

$$\chi_0(x_0)\chi_1'(x_0) \approx \chi_0(x_1)\chi_1'(x_1) \approx \chi_0(x_0)\chi_1'(x_1) \approx m\Delta/\hbar^2. \quad (13)$$

Разложим левую часть (12) в ряд по малой разнице $x_0 - x_1$. Принимая во внимание (13) и вводя обозначение $F = |V'(z)|$, получим следующую оценку:

$$|x_0 - x_1| < 2\hbar A \epsilon / \sqrt{mF}, \quad (14)$$

где $z = (x_0 + x_1)/2$. Выражение (14) позволит нам в дальнейшем пренебречь разницей $x_0 - x_1$ и считать в главном приближении эти точки совпадающими.

Проведем оценки величины инварианта двухуровневой системы $J(x)$ в точке $x = z$. Учитывая (6) и (14), для $J(z)$ получим

$$J(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=2}^{\infty} \left\{ \frac{U_{0k}}{E_k - E_1} \chi_1'(z)\chi_k(z) + \frac{U_{1k}}{E_k - E_0} \chi_0(z)\chi_k'(z) \right\}. \quad (15)$$

Значения функций $\chi_k(z)$ и их производных, вообще говоря, произвольны и никакой малости не содержат. В свою очередь, $\chi_0(z)$ и $\chi_1'(z)$ связаны соотношением (13) – их произведение пропорционально малой величине Δ .

Для определения $\chi_0(z)$ и $\chi_1'(z)$ поступим следующим образом. Воспользуемся тем обстоятельством, что потенциальная энергия $V(x)$ предполагается непрерывной функцией вместе со своими производными любого порядка и, следовательно, волновые функции системы будут также дифференцируемы до любого порядка в произвольной точке оси x . Будем искать решение уравнения Шредингера для функций $\chi_0(x)$ и $\chi_1(x)$ в виде ряда Тейлора в окрестности точек x_0 и x_1 , соответственно. При этом, как нетрудно убедиться непосредственно с помощью уравнения Шредингера, оказывается, что производные любого порядка (кроме производной первого порядка, которая равна нулю) от функции $\chi_0(x)$ в точке $x = x_0$ определяются значением самой функции в этой точке.

Аналогично все производные от функции $\chi_1(x)$ в точке x_1 (кроме производной второго порядка, равной нулю) пропорциональны $\chi_1'(x_1)$.

Таким образом, волновые функции $\chi_0(x)$ и $\chi_1(x)$ могут быть представлены в следующем виде:

$$\chi_0(x) = \chi_0(x_0)f(x - x_0), \quad \chi_1(x) = \chi_1'(x_1)g(x - x_1),$$

где $f(x - x_0)$ и $g(x - x_1)$ — некоторые функции, коэффициенты разложения которых в степенной ряд уже не содержат самих волновых функций или их производных в точках x_0 и x_1 , соответственно.

Теперь воспользуемся ограничительными неравенствами (11) и (14) и, пренебрегая ошибкой порядка ϵ , запишем равенство

$$\chi_0^2(z)f^2(x - z) = \chi_1'^2(z)g^2(x - z), \quad (16)$$

которое справедливо в любой точке на оси x . Очевидно, функции $f^2(x - z)$ и $g^2(x - z)$ должны быть одинаковы с точностью до постоянного множителя (обозначим его q^2), что, в свою очередь, приводит к соотношению

$$\chi_1'(z) = q\chi_0(z). \quad (17)$$

По своему смыслу произведение $\hbar q$ представляет собой некоторое характерное значение модуля классического импульса частицы в окрестности точки $x = z$ и не зависит от ϵ (см. приложение).

Значения $\chi_0(z)$ и $\chi_1'(z)$ с учетом (13) и (17) оказываются пропорциональными $\sqrt{\Delta}$:

$$\chi_0(z) = \sqrt{\frac{m\Delta}{\hbar^2 q}}, \quad \chi_1'(z) = \sqrt{\frac{qm\Delta}{\hbar^2}}, \quad (18)$$

откуда заключаем, что и вся правая часть (15) имеет тот же порядок малости.

С другой стороны, само определение инварианта $J(x)$ в точке $x = z$ может быть несколько упрощено. Обратим внимание на то, что точка $x = z$ близка с точностью до слагаемых порядка ϵ к значениям z_0 и z_1 , которые определяются из соотношений

$$\int_{z_0}^{\infty} dx \chi_0^2(x) = 1/2, \quad \int_{z_1}^{\infty} dx \chi_1^2(x) = 1/2.$$

Величина интеграла от разности квадратов волновых функций, входящего в определение $J(z)$, равна

$$\int_z^{\infty} dx (\chi_1^2(x) - \chi_0^2(x)) = \int_z^{z_1} dx \chi_1^2(x) + \int_{z_0}^z dx \chi_0^2(x),$$

и, поскольку $|z - z_{0,1}| \sim \epsilon$, а $\chi_0^2(z) \sim \chi_1'^2(z) \sim \Delta$, вторым слагаемым в функции $J(z)$ можно пренебречь по сравнению с первым. Принимая во внимание приближенное равенство

$$\int_z^{\infty} dx \chi_0(x)\chi_1(x) \approx 1/2,$$

будем иметь

$$J(z) = \frac{U_{11} - U_{00}}{2},$$

и, следовательно, с помощью (15) и (18) получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx U(x) (\chi_0^2(x) - \chi_1^2(x)) = \frac{E}{\sqrt{q}} \sqrt{\frac{\Delta}{E}} \sum_{k=2}^{\infty} \left\{ \frac{U_{0k}}{E_k - E_1} \chi_k(z) + \frac{U_{1k}}{E_k - E_0} \frac{\chi'_k(z)}{q} \right\}. \quad (19)$$

Так как функция $U(x)$ с самого начала предполагалась произвольной, выражение (19) приводит нас к оценке (11), где в качестве малого безразмерного параметра ϵ можно теперь принять выражение

$$\epsilon = (\Delta/E)^{1/2}, \quad (20)$$

представляющее собой корень из отношения разности энергий двух близких уровней Δ к некоторой характерной энергии системы $E = \hbar^2 q^2 / m$. Постоянная C в неравенстве (11) зависит от конкретного вида функции $U(x)$. Если выбрать

$$U(x) = \delta(x - t),$$

можно получить из (19) выражение непосредственно для разности квадратов волновых функций. Обозначая в этом случае максимальное значение модуля правой части (19) через $C \cdot \epsilon$, определяем постоянную C в (11).

Продолжим теперь вычисление функции $J(x)$. Учитывая определение $J(x)$, с помощью (11) и (20) можно заключить, что в любой точке оси x (а не только в точке $x = z$) будет иметь место оценка

$$|J(x)| < C(x) \cdot \epsilon,$$

где $C(x)$ — некоторая зависящая от x размерная функция. Явный вид этой функции трудно установить, пользуясь соотношением (19) и определением $J(x)$, однако сейчас в этом нет большой необходимости — для нас важно лишь то, что функция $C(x)$ не зависит от ϵ . Поскольку функция $J(x)$ является инвариантом двухуровневой системы, окончательно можно утверждать, что для любой двухуровневой системы (даже для такой, которая не подчиняется условию (11)) будем иметь оценку

$$|\tilde{J}(x)| < C(x) \cdot \epsilon. \quad (21)$$

Подчеркнем, что в правую часть (21) входят величины, относящиеся к так называемой исходной двухуровневой системе с потенциалом $V(x)$ и разницей энергий Δ , которая может быть существенно меньше разницы энергий δ , отвечающей возмущенной двухуровневой системе (см. ниже).

4. СРАВНЕНИЕ С МЕТОДОМ ЛКАО

Сопоставим оценки, полученные в предыдущем разделе, с оценками метода ЛКАО для разности квадратов волновых функций двух близких уровней в так называемом резонансном случае. С точки зрения метода ЛКАО резонансный случай реализуется, когда энергетические уровни в изолированных ямах совпадают и величина δ оказывается

минимальной и равной Δ . Изменение потенциальной энергии на величину $W(x)$ приводит к относительному сдвигу энергетических уровней в изолированных ямах (но при этом все равно $\delta/(\tilde{E}_2 - \tilde{E}_1) \rightarrow 0$), и, если сдвиг достаточно сильный, величина δ приближается к значению разности энергий уровней в изолированных ямах и становится много больше своего резонансного значения Δ .

Как уже было отмечено во введении, в резонансном случае в приближении ЛКАО всегда реализуется условие (1), т.е. разность квадратов волновых функций ограничена величиной порядка ϵ^2 , как следует из (20). Если систему вывести из резонанса, сильно раздвинув первоначально близкие уровни в соседних ямах, в условии (1) можно заменить разность квадратов волновых функций их произведением, которое также будет иметь значение, пропорциональное ϵ^2 , в то время как разность квадратов уже не будет малой.

В нашем случае разность квадратов волновых функций в резонансном приближении, как следует из (19), определяется величиной ϵ . Выход системы из резонанса здесь также ведет к увеличению этой разницы и к уменьшению произведения $\tilde{\chi}_0(x)\tilde{\chi}_1(x)$. Однако в отличие от метода ЛКАО, принимая во внимание наличие инварианта (10) и его оценку (21), для произведения волновых функций получаем, как и для разности квадратов, значение порядка ϵ .

Очевидно, неравенства типа (1), которые накладываются на волновые функции метода ЛКАО, являются более сильными, чем неравенство (21), из которого следует в некотором частном случае ограничение (11). Можно использовать эти неравенства для оценки величины ошибки, допускаемой при замене истинных волновых функций системы $\chi_{0,1}(x)$ на волновые функции метода ЛКАО $\chi_{0,1}^{(0)}(x)$. Считая малым отклонение $\chi_{0,1}^{(0)}(x)$ от истинного решения:

$$|\delta_{0,1}(x)| \equiv |\chi_{0,1}(x) - \chi_{0,1}^{(0)}(x)| \ll |\chi_{0,1}(x)|,$$

можно получить из (1) и (11), пренебрегая слагаемыми порядка ϵ^2 , следующее неравенство:

$$|\delta_0(x) - \delta_1(x)| < A \cdot \epsilon.$$

Учитывая, что речь идет о произвольной двухуровневой системе и функции $\delta_0(x)$ и $\delta_1(x)$ независимы, найдем, что искомая ошибка метода ЛКАО не превышает значения

$$|\delta_{0,1}(x)| < A \cdot \epsilon. \quad (22)$$

Нужно, однако, иметь в виду, что оценки (11) и (22) следует рассматривать как некие предельно возможные значения для произвольной двухуровневой системы, не учитывая никаких ее конкретных свойств. Если же обратиться к двухуровневой системе какого-то вполне определенного вида, может оказаться, что неравенства (11) и (22) усилятся (как это имеет место, например, в случае симметричного потенциала с прямоугольным разделительным барьером; здесь разность квадратов волновых функций порядка ϵ^2), что расширит возможности применения метода ЛКАО для данной системы.

В заключение заметим, что в настоящей работе нигде (кроме приложения) не были использованы конкретный вид потенциальной энергии и структура спектра и волновых функций в изолированных ямах. Единственное положение, на котором основаны все выводы работы – близость двух уровней в спектре системы, что позволяет говорить о более общем подходе к рассмотрению особенностей и свойств двухуровневых

систем, нежели при использовании различных вариационных процедур, в частности метода ЛКАО [6–8].

Работа была поддержана грантами Международного соровского научного фонда (проект № 3F300) и Госкомитета Российской Федерации по высшему образованию (проект № 94-51-1080).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Покажем, что значение параметра q , введенного в (13), не зависит от ϵ . Для этого предположим наличие почти непроницаемого потенциального барьера, границы которого задаются уравнением

$$V(x) = E.$$

Два решения этого уравнения обозначим через b_1 и b (считаем $b > b_1$) и будем предполагать, что точки x_0, x_1 лежат внутри этого интервала. Обозначим максимальное значение потенциальной энергии на этом участке как $V_{\max}$ и введем

$$p = \sqrt{2m(V_{\max} - E)}/\hbar.$$

Используя новые функции

$$S_{\pm}(x) = \chi'(x) \pm p\chi(x),$$

представим уравнение Шредингера в форме

$$S'_{\pm}(x) \mp pS_{\pm}(x) = -2m/\hbar^2 L(x)\chi(x),$$

где $L(x) = V_{\max} - V(x)$ всегда больше нуля в интервале $b_1 < x < b$. Правую часть этого уравнения формально будем рассматривать как заданную функцию, что позволяет сразу же записать его решение для функций $S_{\pm}(x)$. Выражая $\chi(x)$ через $S_{\pm}(x)$ и используя приближенное равенство (т.к. справедливо условие (11))

$$\chi_0(b) \approx \chi_1(b)$$

(пусть $b - z > z - b_1$), получим для q следующее выражение:

$$q = p \frac{1 - \frac{4m}{\hbar^2} \exp[-p(b-z)] \int_z^b dx L(x) \operatorname{sh}[p(b-x)] f(x-z)/p}{1 - \frac{4m}{\hbar^2} \exp[-p(b-z)] \int_z^b dx L(x) \operatorname{sh}[p(b-x)] g(x-z)},$$

где использовано условие $p(b-z) \gg 1$.

Если считать $L(x)$ малой добавкой, функции $f(x-z)$ и $g(x-z)$ достаточно взять в нулевом приближении:

$$f(x-z) = \operatorname{ch}[p(x-z)], \quad g(x-z) = \operatorname{sh}[p(x-z)]/p.$$

Подстановка их в выражение для q дает оценку $q \leq p$, поскольку всегда $L(x) \geq 0$. В силу произвольности функции $L(x)$ отсюда следует, что максимальное значение параметра q , равное p , достигается в случае постоянного потенциала $V(x) = V_{\max}$.

Аналогично можно установить нижнюю границу возможных значений параметра q . Определим две точки на оси x : $x = a_1$ и $x = a$ ($a_1 > b_1$; $a < b$), такие, что $V(a_1) = V(a)$, $V(x) > V(a)$, и потребуем, чтобы произведение $k \cdot (a - a_1)$ было максимальным. Величину k определим как $\sqrt{2m(V(a) - E)/\hbar}$ и будем считать, что $k(a - z) \gg 1$ (условие непроницаемости барьера). Снова получим неявное решение уравнения Шредингера и приравняем волновые функции в точке $x = a$. Считая, что отклонение потенциальной энергии от значения $V(a)$ мало:

$$\Lambda(x) = V(x) - V(a) \ll V(a),$$

получим для параметра q

$$q = k \left(1 + \frac{4m}{\hbar^2 k} \exp[-k(a - z)] \int_z^a dx \Lambda(x) \operatorname{sh}[k(a - x)] \exp[-k(x - z)] \right).$$

Поскольку $\Lambda(x)$ — неотрицательная функция произвольного вида, очевидно, что q всегда больше k , а значение $q = k$ при $\Lambda = 0$ является минимально возможным.

Таким образом, окончательно находим, что область изменения величины q задается следующими неравенствами:

$$k \leq q \leq p.$$

Список литературы

- [1] В.В. Капеев, Ю.В. Капеев, Н.В. Корняков // Письма в ЖЭТФ. 1993. Т. 58. С. 901.
- [2] В.Е. Житомирский // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 55. С. 657.
- [3] F. Stern, S. das Sarma // Phys. Rev. 1984. V. B30. P. 840.
- [4] М.Г. Весселов. Элементарная квантовая теория атомов и молекул. М.: Физматгиз, 1962.
- [5] Ч. Коулсон. Валентность. М.: Мир, 1965.
- [6] J.W. Corbett // Am. J. Phys. 1963. V. 31. P. 521.
- [7] W.A. Phillips // Proc. Roy. Soc. 1970. V. A319. P. 565.
- [8] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.

Нижегородский государственный
университет

Поступила в редакцию
11.VIII.1995 г.

V. A. Burdov

SOME PROPERTIES OF STATIONARY STATES OF TWO-LEVEL SYSTEMS

It is shown that some function $J(x)$ is a constant at any point on x -axis, when a change of the potential energy of two-level system is arbitrary. The estimations of the LCAO method's accuracy are presented for the wave functions of a one-dimensional two-level system.