

P11-2016-4

И. В. Амирханов, Н. Р. Саркар\*, И. Сархадов, З. К. Тухлиев

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ  
КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ  
В ДВУХБАРЬЕРНОЙ ОТКРЫТОЙ ЯМЕ

Направлено в журнал «Письма в ЭЧАЯ»

---

\*E-mail: sarker@jinr.ru

Амирханов И. В. и др.

P11-2016-4

Исследование свойств квазистационарных состояний  
в двухбарьерной открытой яме

В работе проведено исследование решений квазистационарных состояний в рамках уравнения Шредингера при комплексных значениях энергии с кусочно-постоянными потенциалами при различных значениях параметров потенциалов. Найдены квазиуровни для подбарьерного и надбарьерного случаев. Для заданных высот потенциальных барьеров количество подбарьерных квазиуровней для двухбарьерного потенциала больше по сравнению с однобарьерным потенциалом. Из расчетов следует, что действительная часть значений энергии меняется плавно, а мнимая часть значений энергии меняется сложным нерегулярным образом при изменении параметров потенциала.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2016

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2016-4

Investigation of Quasi-Stationary States in the Double-Barrier Open Well

In this paper an investigation of solutions of quasi-stationary states in the framework of the Schrödinger equation with complex energies with piecewise constant potentials for various values of the parameters of the potential is conducted. Quasi-levels are found for the under- and above-barrier cases. For the given potential barrier heights the number of under-barrier quasi-levels for the double-barrier potential is more than for the single-barrier potential. The calculations show that the real part of the energy varies smoothly and the imaginary part of the energy changes irregularly when changing the parameters of the potential.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2016

## ВВЕДЕНИЕ

Современные экспериментальные возможности создания многослойных наногетеросистем позволяют получать и исследовать как закрытые, так и открытые квантовые точки [1]. Важной особенностью открытых систем по сравнению с закрытыми является возможность управления дополнительным каналом релаксации энергии квазичастиц из-за их ухода из квантовой точки в открытое пространство внешней среды.

Открытые наносистемы представляют несомненный интерес и с теоретической точки зрения, так как при определенных условиях в них возникают квазистационарные состояния с мало изученными или совсем неизученными свойствами. Такая ситуация имеет место в наносистемах с низкими и узкими потенциальными барьерами, из-за чего квазичастицы в них слабо локализованы.

В открытых наносистемах из-за малой эффективной массы электронов и малой энергии потенциальных барьеров характер квазистационарных состояний оказывается весьма чувствительным к толщине слоя барьера. Поэтому возникает необходимость детально исследовать спектральные характеристики.

Решения уравнения Шредингера при комплексных значениях энергии  $E = E_1 + iE_2$  описывают различные физические процессы [2, 3]. Например, при вещественных значениях  $E$  описывает рассеяние, которое выражается через вещественные фазы рассеяния и сечение рассеяния. Полюсы матрицы рассеяния при мнимых и комплексных значениях  $E$  описывают связанные, виртуальные и квазистационарные состояния системы. Полюсам матрицы рассеяния в нижней полуплоскости  $E$ , не находящимся на мнимой оси, соответствуют квазистационарные состояния, описывающие распад или же захват в системе. При комплексных значениях энергии, в силу того что плотность вероятности убывает со временем по экспоненциальному закону, сохранение вероятности может быть обеспечено и при наличии только расходящейся волны в асимптотике решения.

Плотность вероятности для распадающегося состояния, определяющаяся квадратом модуля волновой функции, затухает по экспоненциальному закону  $|\psi(t)|^2 \sim \exp(-(1/\hbar)\Gamma t)$ . В частности, по такому же закону изменяется со временем и вероятность нахождения частицы в какой-либо ограниченной области пространства. Вероятность распада в единицу времени  $w = \Gamma/\hbar$ . Поэтому время жизни распадающегося квазистационарного состояния  $\tau$  можно определить посредством равенства  $\tau = \hbar/\Gamma$ . Далее  $E = E_1 - iE_2$ , где  $E_1 \geq 0$ ,  $E_2 \geq 0$  и  $E_2 = \Gamma/2$ .

Заметим, что система, распадающаяся со временем, вообще говоря, не обладает дискретным спектром энергий. Вылетающая при распаде частица уходит на бесконечность, поэтому движение системы инфинитно, следовательно, энергетический спектр системы непрерывен. Однако если в силу каких-либо причин вероятность распада системы мала, то можно ввести понятие о квазистационарном состоянии. В таком квазистационарном состоянии частица в течение длительного времени движется внутри системы, покидая ее лишь по истечении значительного промежутка времени  $\tau = 1/w$ . Энергетический спектр таких квазистационарных состояний является квазидискретным и состоит из ряда размытых уровней  $E$ , ширина которых  $\Gamma$  определяется временем жизни соответствующих состояний:  $\Gamma = \hbar/\tau$ . Очевидно, введение квазистационарных состояний имеет смысл только в том случае, если ширина соответствующих квазидискретных уровней оказывается малой по сравнению с расстояниями между уровнями  $\Gamma \ll D$ , где  $D$  — среднее расстояние между квазидискретными уровнями.

Барьерные задачи квантовой механики — задачи о квантово-механическом движении в среде со скачками потенциала — используются как модельные во многих научных и технических приложениях. Эти задачи имеют высокую значимость, особенно в связи с современными исследованиями и разработками в нанодиапазоне [4].

В данной работе мы исследуем квазистационарные состояния в рамках уравнения Шредингера. В безразмерных переменных (для  $S$ -волны, т. е.  $l = 0$ )

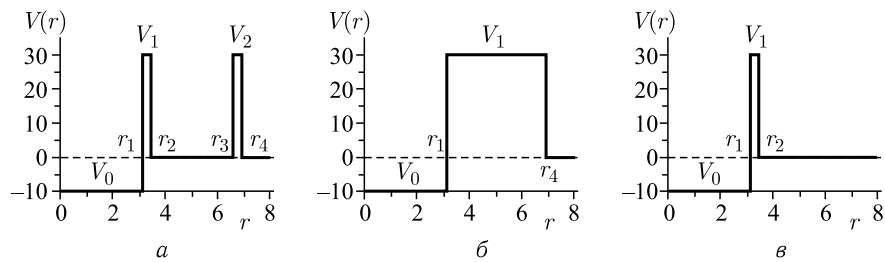


Рис. 1. Потенциалы с двумя барьерами (а), с одним широким барьером (б) и с одним узким барьером (в) с параметрами  $V_0 = 10$ ,  $V_1 = 30$ ,  $V_2 = 30$ ,  $r_1 = \pi$ ,  $r_2 = r_1 + \pi/10$ ,  $r_3 = r_2 + \pi$ ,  $r_4 = r_3 + \pi/10$

оно имеет вид

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - k^2 \right] \psi(r) = 0, \quad (1)$$

где  $k^2 = V(r) - E$ ,  $E = E_1 - iE_2$ .

Исследуем решения уравнения (1) для квазистационарных состояний с различными кусочно-постоянными потенциалами, которые показаны на рис. 1.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для нахождения квазистационарных состояний уравнение (1) решаем со следующими граничными условиями:

$$\psi(r)|_{r=0} = 0 \quad \text{и} \quad \psi(r)|_{r \rightarrow \infty} \sim \exp(ikr).$$

С учетом этих граничных условий решения уравнения (1) для прямоугольной ямы (рис. 1, а) ищем в виде

$$\begin{aligned} \psi_1(r) &= A_1 \sin(k_1 r), \quad k_1 = \sqrt{V_0 + E}, \quad V_0 > 0, \quad 0 \leq r \leq r_1; \\ \psi_2(r) &= A_2 \exp(-k_2 r) + A_3 \exp(k_2 r), \quad k_2 = \sqrt{V_1 - E}, \quad r_1 < r < r_2; \\ \psi_3(r) &= A_4 \cos(k_3 r) + A_5 \sin(k_3 r), \quad k_3 = \sqrt{E}, \quad r_2 \leq r \leq r_3; \\ \psi_4(r) &= A_6 \exp(-k_4 r) + A_7 \exp(k_4 r), \quad k_4 = \sqrt{V_2 - E}, \quad r_3 \leq r \leq r_4; \\ \psi_5(r) &= A_8 \exp(ik_3 r), \quad r_4 \leq r < \infty. \end{aligned} \quad (2)$$

Из условий непрерывности функции  $\psi(r)$  и ее первой производной в точках  $r_1, r_2, r_3, r_4$  для нахождения  $E_1, E_2$  получаем систему однородных алгебраических уравнений

$$WA = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{32} & W_{33} & W_{34} & W_{35} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & W_{42} & W_{43} & W_{44} & W_{45} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_{54} & W_{55} & W_{56} & W_{57} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & W_{64} & W_{65} & W_{66} & W_{67} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & W_{76} & W_{77} & W_{78} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & W_{86} & W_{87} & W_{88} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \\ A_8 \end{pmatrix} = 0, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned}
W_{11} &= \sin(k_1 r_1), & W_{12} &= -\exp(-k_2 r_1), & W_{13} &= -\exp(k_2 r_1), \\
W_{21} &= k_1 \cos(k_1 r_1), & W_{22} &= -k_2 W_{12}, & W_{23} &= k_2 W_{13}, \\
W_{32} &= \exp(-k_2 r_2), & W_{33} &= \exp(k_2 r_2), & W_{34} &= -\sin(k_3 r_2), \\
W_{35} &= -\cos(k_3 r_2), & W_{42} &= -k_2 W_{32}, & W_{43} &= k_2 W_{33}, \\
W_{44} &= k_3 W_{35}, & W_{45} &= -k_3 W_{34}, & W_{54} &= \sin(k_3 r_3), \\
W_{55} &= \cos(k_3 r_3), & W_{56} &= -\exp(-k_4 r_3), & W_{57} &= -\exp(k_4 r_3), \\
W_{64} &= k_3 W_{55}, & W_{65} &= -k_3 W_{54}, & W_{66} &= -k_4 W_{56}, \\
W_{67} &= k_4 W_{57}, & W_{76} &= \exp(-k_4 r_4), & W_{77} &= \exp(k_4 r_3), \\
W_{78} &= -\exp(ik_3 r_4), & W_{86} &= -k_4 W_{76}, & W_{87} &= k_4 W_{77}, \\
W_{88} &= ik_3 W_{78}.
\end{aligned}$$

Значения энергии квазиуровней  $E = E_1 - iE_2$  определяются из условия  $\det(W) = F_{\text{Re}} + iF_{\text{Im}} = 0$ :

$$\begin{aligned}
F_{\text{Re}}(E_1, E_2) &= 0, \\
F_{\text{Im}}(E_1, E_2) &= 0.
\end{aligned} \tag{4}$$

Для других потенциалов (рис. 1, б, в) задача ставится аналогично.

Система нелинейных трансцендентных уравнений (4) решена методом Ньютона. При этом начальные приближения для собственных значений  $(E_1, E_2)$  выбраны различным образом, в частности методом Монте-Карло.

### ОБСУЖДЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

Главная идея исследования поставленной задачи заключается в нахождении  $E_1, E_2$  при различных значениях параметров потенциала, т. е., меняя параметры

$$\begin{aligned}
V_0 &= 10, & V_1 &= 30, & V_2 &= 30, \\
r_1 &= \pi, & r_2 &= \pi + \frac{\pi}{10}, & r_3 &= r_2 + \pi, & r_4 &= r_3 + \frac{\pi}{10},
\end{aligned}$$

изучить динамику поведения  $E_1, E_2$ .

В табл. 1–3 приведены результаты решения трансцендентных уравнений (4) для трех типов потенциалов. В табл. 1 представлены результаты решения (4) с параметрами (рис. 1, а):

$$\begin{aligned}
V_0 &= 10, & V_1 &= 30, & V_2 &= 30, \\
r_1 &= \pi, & r_2 &= \pi + \frac{\pi}{10}, & r_3 &= r_2 + \pi, & r_4 &= r_3 + \frac{\pi}{10};
\end{aligned}$$

**Таблица 1. Результаты решения трансцендентных уравнений (4) для потенциала, приведенного на рис. 1, а**

$E_1$	$E_2$	$F_{Re}$	$F_{Im}$
0,7945816627	1,8529202E-3	-1,514566E-12	1,375955E-11
3,1334752243	1,4458915E-2	-3,183564E-13	-7,685519E-13
4,3721276838	1,6625567E-3	-9,182585E-14	4,801714E-14
7,1419268623	5,4204324E-2	7,549516E-15	-8,54872E-15
11,874943138	5,1702684E-2	9,662493E-12	4,085538E-14
13,121150972	9,3246721E-2	1,526778E-12	1,536548E-13
19,365814555	0,2537267944	3,937905E-12	-5,294653E-13
22,332512649	6,9861138E-2	2,320366E-14	-6,641909E-14
28,069082803	0,5037686613	2,116862E-11	1,954170E-11
33,436631230	0,1678846677	5,273981E-12	1,245634E-11
38,469042234	0,8376436418	4,476891E-11	2,827464E-11
45,893855574	0,4793321234	2,322163E-12	-0,139935E-12
50,789255561	1,2025901554	-5,722126E-11	-2,167546E-11
59,600208173	1,0986117606	9,271544E-12	3,409678E-11
74,673325781	1,9918607026	2,405691E-11	2,534573E-11
81,427352154	2,2095729066	1,676937E-11	9,511328E-11

**Таблица 2. Результаты решения трансцендентных уравнений (4) для потенциала, приведенного на рис. 1, б**

$E_1$	$E_2$	$F_{Re}$	$F_{Im}$
4,338100230	6,455927E-02	9,277751E-12	4,173923E-11
12,34195453	0,1966712341	1,059588E-11	-1,58553E-011
22,07458257	0,4440861477	1,534680E-10	-6,8173223E-9
33,52456040	0,8763077811	2,328467E-12	4,108369E-12
46,69513520	1,5798293705	-2,526830E-12	9,694537E-12
61,60014648	2,6605887131	2,107604E-12	-6,082593E-12
78,24299789	4,2711654236	-5,420580E-12	2,007110E-11
96,54866418	6,7244199942	-5,094055E-12	6,942621E-12

в табл. 2 — с параметрами (рис. 1, б):

$$V_0 = 10, \quad V_1 = 30,$$

$$r_1 = \pi, \quad r_4 = r_1 + \frac{6\pi}{5};$$

в табл. 3 — с параметрами (рис. 1, в):

$$V_0 = 10, \quad V_1 = 30, \quad r_2 = r_1 + \frac{\pi}{10}.$$

Таблица 3. Результаты решения трансцендентных уравнений (4) для потенциала, приведенного на рис. 1, в

$E_1$	$E_2$	$F_{Re}$	$F_{Im}$
4,403099342	2,849640E-15	7,211464E-08	2,6192966E-6
12,38233155	4,938341E-14	3,0869375E-8	-8,665453E-07
21,90576604	1,114146E-09	1,1054157E-9	-1,231767E-10
30,57736878	4,821866E-02	3,0664800E-9	4,4439328E-9
31,85465278	0,1006095347	4,882069E-11	2,898085E-11
33,46202096	0,2426668178	4,7945312E-8	1,4163378E-7
36,52406660	0,5397857089	-6,9227316E-7	4,8686710E-6
40,74726603	0,8179035585	-4,319570E-10	-8,140671E-10
45,01756025	0,7800700011	1,179658E-13	2,176429E-11
47,440749084	0,6538421485	-4,7872552E-6	4,9219989E-6
48,907240396	1,1231457262	1,8792713E-6	3,3029011E-6
54,708214968	1,6307266312	-6,3383075E-7	4,8319201E-7
60,638313460	1,4730314467	5,994909E-11	-2,452084E-11
65,992583270	1,9438290278	-4,1008052E-8	5,4809764E-8
73,362955306	2,4323029886	1,2336351E-9	2,2934613E-9
80,148040586	2,1652587514	5,511449E-10	-1,0866106E-9
87,332377918	3,0120074519	-2,624738E-11	1,699224E-12

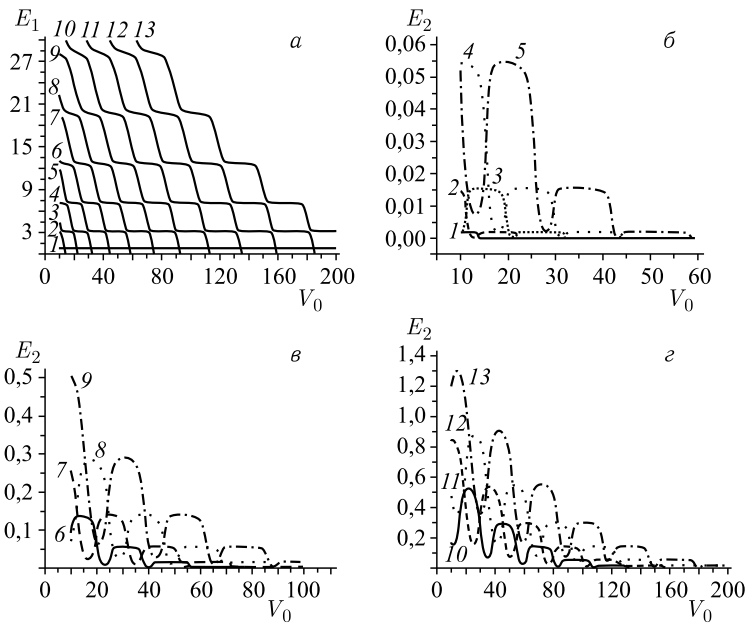


Рис. 2. Динамика энергии квазиуровней для потенциала (рис. 1, а) при изменении глубины ямы  $V_0$



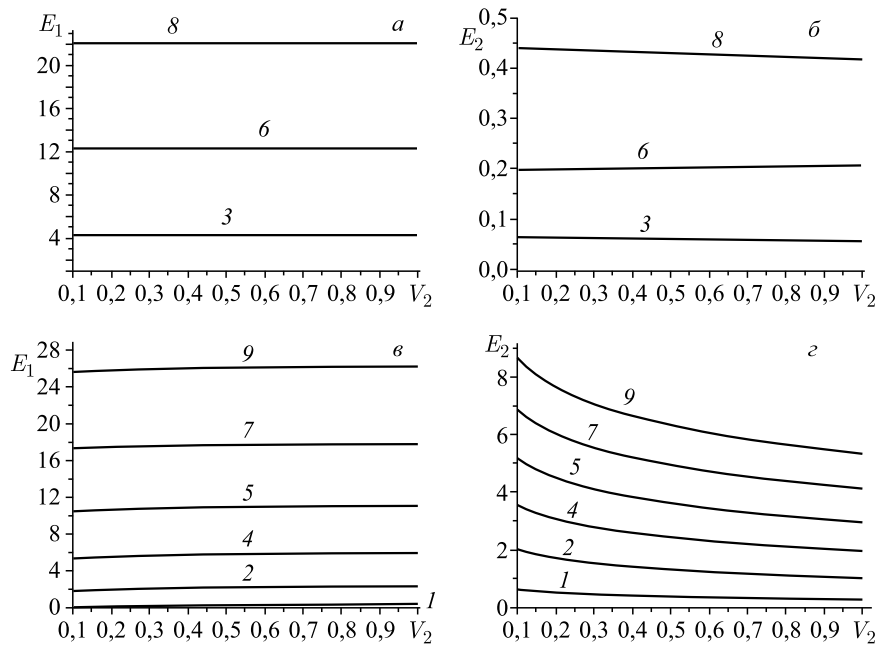


Рис. 3. Динамика энергии квазиуровней для двухбарьерного потенциала при  $V_2 \rightarrow 0$

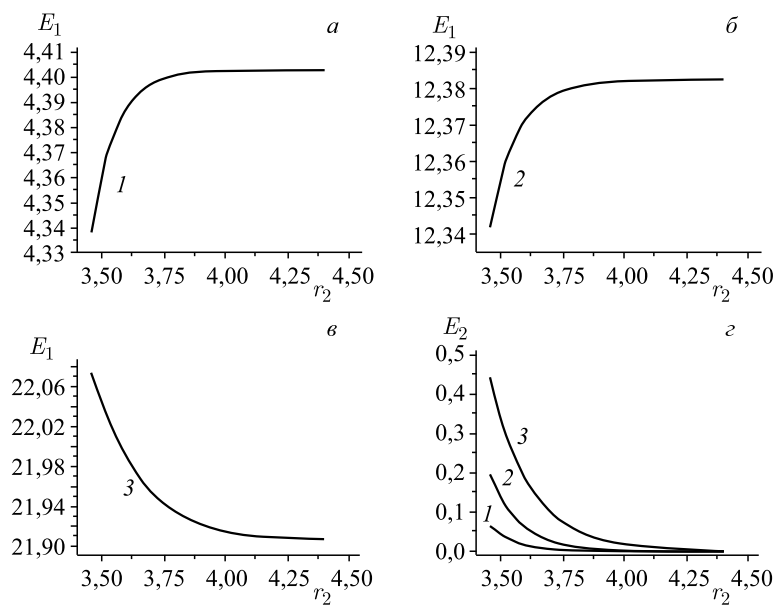


Рис. 4. Динамика энергии квазиуровней при увеличении  $r_2$  для задачи с одним барьером

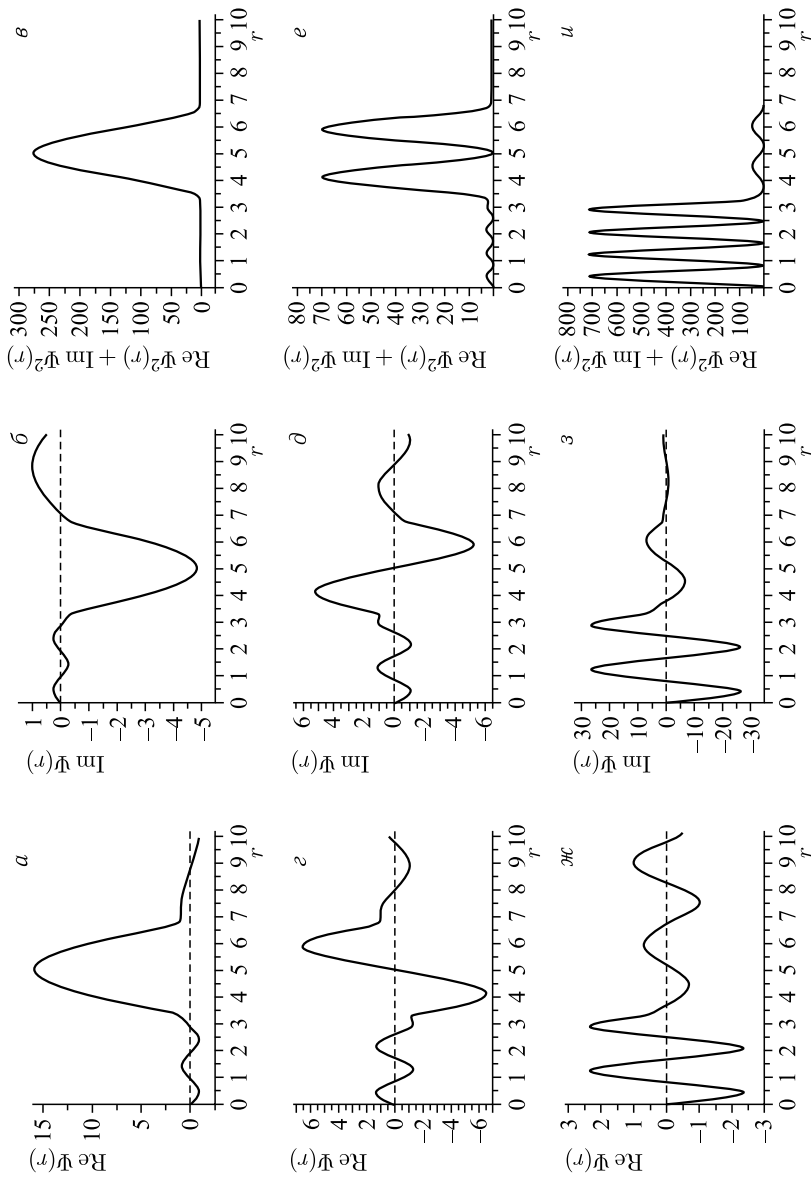


Рис. 5. Волновые функции и их квадрат модуля для первых трех нижних квазиуровней

При  $0 < E_1 < 30$  получены решения для подбарьерных случаев, а при  $E_1 > 30$  — для надбарьерных.

Из табл. 1 следует, что количество квазиуровней зависит от количества потенциальных барьеров. Можно отметить, что для заданного значения высоты потенциальных барьеров количество подбарьерных уровней ( $E_1$ ) для двухбарьерного потенциала больше, чем для случая однобарьерного потенциала. Причем мнимая часть ( $E_2$ ) нижележащих уровней в основном уменьшается, т.е. времена жизни этих квазиуровней увеличиваются. В отличие от этого для надбарьерных уровней  $E_2$  увеличивается и времена жизни этих уровней уменьшаются.

На рис. 2 приведены зависимости  $E_1$  и  $E_2$  от глубины ямы  $V_0$ .

Видно, что при увеличении параметра  $V_0$  энергия уровней, находящихся ниже барьера, уменьшается и при некоторых значениях  $V_0$  энергия самых нижележащих уровней постепенно стремится к нулю (так как  $E_1$  становится отрицательной, квазиуровень переходит в связанное состояние), энергия надбарьерных уровней уменьшается и они становятся подбарьерными. Расчеты показывают, что  $E_1$  меняется плавно, а  $E_2$  меняется сложным образом и очень чувствительна к изменениям параметров потенциала.

Как уже отмечено, количество квазиуровней зависит от количества потенциальных барьеров. В связи с этим интересно было решать систему уравнений (4) с двумя барьерами при  $V_2 \rightarrow 0$ . Численные результаты (рис. 3) подтверждают, что при  $V_2 \rightarrow 0$  три решения из девяти стремятся к решениям с одним барьером, а у остальных шести решений мнимая часть становится большой и не удовлетворяет критериям квазиуровней.

Было интересно посмотреть динамику квазиуровней с одним узким барьером (рис. 1, *в*) при увеличении  $r_2$ . Численные результаты приведены на рис. 4. Видно, что при увеличении  $r_2$  решение с узким барьером стремится к решению с широким барьером (рис. 1, *б*).

На рис. 5 приведены зависимости реальной и мнимой частей волновых функций и их квадрата модуля для первых трех нижних квазиуровней для потенциала с двумя барьерами (рис. 1, *а*).

## ВЫВОДЫ

Ниже приведены некоторые важные результаты решений поставленных задач.

1. Количество подбарьерных квазиуровней зависит от количества барьеров.
2. Время жизни нижележащих подбарьерных квазиуровней больше, чем вышележащих квазиуровней.

3. При изменении параметров потенциала  $E_1$  меняется плавно, а  $E_2$  меняется сложным образом и очень чувствительна к изменениям параметров потенциала.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-01-00628а.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Ткач Н. В., Сети Ю. А.* Спектр и свойства сечения рассеяния электронов в открытых сферических квантовых точках // *Физика и техника полупроводников*. 2009. Т. 43, вып. 3. С. 357–363.
2. *Ситенко А. Г.* Лекции по теории рассеяния. Киев, 1975. 256 с.
3. *Тейлор Дж.* Теория рассеяния. М., 1975. 567 с.
4. *Нелин Е. А.* Импедансная модель для «барьерных» задач квантовой механики // *УФН*. 2007. Т. 177, № 3. С. 307–313.

Получено 1 февраля 2016 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 12.04.2016.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,81. Уч.-изд. л. 0,98. Тираж 215 экз. Заказ № 58796.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)