

Stany rezonansowe cząstek w nanostrukturach

Podstawowe informacje o własnościach nanostruktury, a właściwie, o zachowaniu się uwięzionych w niej cząstek, można uzyskać modelując oddziaływanie takich cząstek z nanostrukturą za pomocą stosunkowo prostych potencjałów. Jak zaproponować taki potencjał? Zajmijmy się krótko przypadkiem kiedy nanostruktura jest zbudowana z kilku obszarów materiałów krystalicznych półprzewodnikowych (możliwe także izolatory i przewodniki) i rozważamy poruszający się w takiej strukturze elektron. Dla każdego z tych materiałów mamy charakterystyczny rozkład pasm dozwolonych energii, w szczególności pasmo przewodnictwa. Jeśli elektron ma energię w zakresie pasma przewodnictwa, to „czuje się on swobodny”. Jednak obszar zbudowany z danego materiału jest ograniczony (o rozmiarach rzędu kilku, kilkudziesięciu, kilkuset nanometrów). Elektron musi trafić na granicę z materiałem, w którym np. energia rozważanego elektronu przypada na przerwę energetyczną a pasmo przewodnictwa jest powyżej. Wtedy elektron ma trudności z wniknięciem do tego sąsiedniego obszaru. W ogólności takie wniknięcie nie jest jednak niemożliwe. Prawdopodobieństwo jego zajścia zależy od energii elektronu i skoku energii przewodnictwa na granicy materiałów. Całkowicie niemożliwe jest w przypadku idealnego izolatora. Wtedy ten skok jest nieskończony. Modelowy potencjał takiego układu będzie przyjmował w poszczególnych obszarach wartości energii odpowiadające dnom pasm przewodnictwa materiałów wypełniających te obszary.

Wbrew pozorom, sytuacja może być bardzo skomplikowana w zależności od przestrzennego rozkładu różnych materiałów tworzących nanostrukturę. Najprostszym przypadkiem jest rozkład kilku równoległych warstw, które są na tyle rozległe, że w przybliżeniu można je rozważać jako nieskończone. Wtedy potencjał nie zmienia się w płaszczyznach poszczególnych warstw. Zmienia się tylko w kierunku zmian materiału, przechodzenia jednej warstwy w inną. Model sprowadza się do jednego wymiaru odpowiadającego temu właśnie kierunkowi. Zagadnienie badania struktury energetycznej sprowadza się do rozwiązania równania Schroedingera (równania własnego dla operatora energii) jednowymiarowego układu prostokątnych studni i barier. Określenie, co jest studnią, co barierą zależy od względnej wartości potencjału.

Jaką dostajemy informację? Formalnie, matematycznie rzecz biorąc, otrzymujemy wartości własne operatora energii. Fizycznie – dowiadujemy się jakie energie elektronu w nanostrukturze są dozwolone. Mogą to być ściśle określone energie odpowiadające stanom związanym elektronu, tzn. elektronowi uwięzionemu w nanostrukturze tak, że nie może się z niej wydostać. Ich znajomość daje możliwość poznania własności optycznych nanostruktury, tzn. pozwala dowiedzieć się jakie światło nanostruktura może wysyłać lub pochłaniać oraz jaka musiałaby być częstotliwość fali elektromagnetycznej, która mogłaby uwolnić elektron z nanostruktury. Oprócz tych stanów, ściśle związanych, możliwe są też stany kwazizwiązane (albo pseudozwiązane). To takie, w których elektron wydaje się być związany w nanostrukturze, jednak może się z niej w skończonym czasie uwolnić bez otrzymania dodatkowej energii. Wyżej zasugerowano, że elektron może wnikać w obszar o pasmie przewodnictwa powyżej jego energii, to oznacza, że w sprzyjających okolicznościach może wydostać się na zewnątrz nanostruktury. Takim stanom też odpowiadają charakterystyczne energie. Nie są jednak ściśle określone (dyskretne), są nieco „rozmyte”. Znajomość takich stanów jest bardzo ważna, np. ze względu na własności przewodzenia prądu przez nanostruktury, przedostawania się elektronów do wewnątrz i na zewnątrz nanostruktur.

Ta część zajęć poświęcona jest stanom pseudozwiązanym, zwanym także rezonansowymi. Zaczynamy od rozważenia prostego jednowymiarowego modelu, układu studnia-bariera. Na przykładzie analitycznych rozwiązań dla tego przypadku poznajemy podstawowe własności stanów rezonansowych. Następnie, przedstawiamy metody przeznaczone specjalnie do poszukiwania stanów rezonansowych: metodę stabilizacji i metodę obrotu zespolonego.

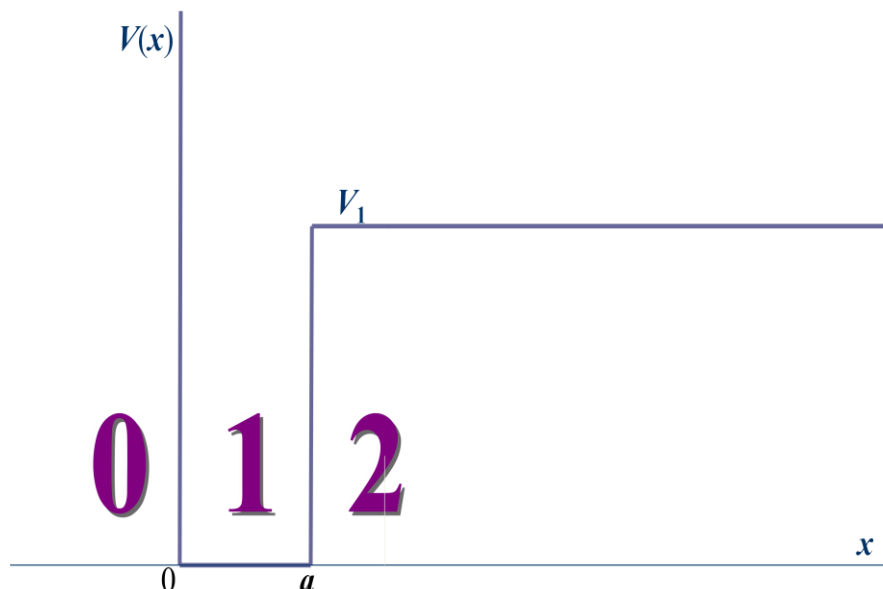
Układ studnia-bariera

Zajmujemy się tutaj jednowymiarowym układem studnia-bariera, który wydaje się być najprostszym przykładem ilustrującym fakt istnienia i właściwości stanów rezonansowych. Rozważamy najpierw tylko studnię potencjału, dla której znajdujemy stany związane. Później dodajemy do niej barierę potencjału, by pokazać, jak stany związane studni przeistaczają się w rezonansowe, jak zmieniają się ich własności.

Stany związane w studni potencjału

Cząstka, którą rozważamy (elektron) porusza się po prostej, jej położenie określa jedna współrzędna – x . Z nanostrukturą (resztą świata) oddziałuje tak, że zyskuje energię potencjalną $V(x)$. Nasza nanostruktura jest nanowarstwą półprzewodnika o grubości a . Dno pasma przewodnictwa w tej warstwie przyjmujemy za 0 na skali energii. Z jednej strony warstwa przylega do nieskończonego półprzewodnika o pasmie przewodnictwa położonym o V_1 wyżej. Z drugiej strony jest ograniczona idealnym izolatorem, w którym potencjał jest nieskończony (pasma przewodnictwa „nieskończenie wysoko”). Potencjał wygląda więc tak, jak na rys. MB.1 i zapisuje się wzorem

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{dla } x \leq 0, \\ 0, & \text{dla } 0 \leq x \leq a, \\ V_1, & \text{dla } x > a. \end{cases}$$



Rys. MB.1 Studnia potencjału. Może modelować układ nanowarstwy półprzewodnikowej (obszar o numerze 1) pomiędzy nieskończonym półprzewodnikiem (obszar 2) o dnie pasma przewodnictwa położonym o V_1 powyżej dna pasma przewodnictwa w nanowarstwie a nieskończonym izolatorem (obszar 0). W zakresie energii pomiędzy 0 a V_1 spodziewamy się jedynie stanów związanych.

Naszym zadaniem jest rozwiązanie równania Schroedingera. Umówmy się najpierw, że interesuje nas energia z zakresu od 0 do V_1 . Poniżej zera nie możemy spodziewać się sensownych, fizycznych rozwiązań, ponieważ oznaczałyby one ujemną energię kinetyczną cząstki. Podobnie byłoby, gdyby cząstka o energii $0 \leq E \leq V_1$ znajdowała się bardzo daleko, próbowałaby uciekać do nieskończoności. Ta ucieczka nie byłaby możliwa. Zatem, w tak ograniczonym zakresie energii spodziewamy się tylko stanów związanych.

Ponieważ potencjał jest określony w szczególny sposób, w trzech obszarach, równanie Schroedingera rozwiązujemy oddzielnie dla każdego obszaru oddzielnie, a następnie otrzymane rozwiązania zszywamy w jedną całość. W obszarze „0” mamy

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_0(x) + (\infty - E)\Phi_0(x) = 0.$$

Wzajemne redukowanie się obu wyrazów dla dowolnej wartości x (w obszarze „0”) wymaga albo nieskończonej drugiej pochodnej Φ_0 albo $\Phi_0(x) = 0$. Pierwsza możliwość jest absurdalna. Jednak druga jest niesłychanie prosta matematycznie i oczywista fizycznie – funkcja falowa równa zero oznacza zerową gęstość prawdopodobieństwa cząstki w obszarze „0”. Tak właśnie miało być, elektron nie może wnikać do obszaru izolatora. Mamy więc rozwiązanie w obszarze „0”,

$$\Phi_0(x) = 0.$$

Na odcinku $[0, a]$ – w studni – równanie Schroedingera ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) + E\Phi_1(x) = 0$$

lub inaczej

$$\frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) + k_1^2 \Phi_1(x) = 0, \text{ gdzie } k_1^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}, k_1 > 0.$$

Jest identyczne z równaniem oscylatora harmonicznego. Jego ogólne rozwiązanie można zapisać w postaci

$$\Phi_1(x) = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x.$$

Pozostaje do znalezienia rozwiązanie w obszarze „2”. Równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_2(x) + (V_1 - E)\Phi_2(x) = 0$$

jest równoważne

$$\frac{d^2}{dx^2} \Phi_2(x) - k_2^2 \Phi_2(x) = 0, \text{ gdzie } k_2^2 \equiv \frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}, k_2 > 0.$$

Różni się od równania oscylatora harmonicznego znakiem przy stałej k_2^2 . Ogólne rozwiązanie,

$$\Phi_2(x) = C e^{-k_2 x} + D e^{k_2 x},$$

jest dowolną kombinacją liniową funkcji wykładniczych, zanikającej i „wybuchającej” w nieskończoności. Ta ostatnia jest niedopuszczalna ze względów fizycznych. Prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w nieskończoności (bardzo daleko od studni) byłoby bardzo duże, a z powodów energetycznych cząstka nie może uciekać nieskończenie daleko od studni. Dlatego spośród wszystkich rozwiązań matematycznych, wybieramy tylko te dopuszczalne fizycznie, przyjmując $D = 0$. (Za chwilę zobaczymy, że z tego właśnie fizycznego warunku wynika dyskretny charakter dopuszczalnych energii). Ostatecznie rozwiązaniem w obszarze „2” jest

$$\Phi_2(x) = C e^{-k_2 x}.$$

Teraz rozwiązania z poszczególnych obszarów trzeba zszyć w jedną gładką całość. Zapewnimy w ten sposób, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w położeniu x będzie zmieniać się w sposób ciągły. Żądamy więc by funkcja i jej pochodna (jeśli możliwe) była ciągła w punktach zszycia, czyli w $x = 0$ i $x = a$, czyli

$$\begin{aligned} \Phi_0(0) &= \Phi_1(0), \\ \Phi_1(a) &= \Phi_2(a), \\ \left. \frac{d\Phi_1}{dx} \right|_{x=a} &= \left. \frac{d\Phi_2}{dx} \right|_{x=a}. \end{aligned}$$

(W naszym przypadku nie można zapewnić ciągłości pochodnej w $x = 0$.) Te formalne warunki prowadzą do układu szczegółowych równań liniowych na współczynniki A, B i C :

$$\begin{aligned} 0 &= A \sin 0 + B \cos 0 \\ A \sin k_1 a + B \cos k_1 a &= C e^{-k_2 a} \\ k_1 A \cos k_1 a - k_1 B \sin k_1 a &= -k_2 C e^{-k_2 a}. \end{aligned}$$

Z pierwszego wynika natychmiast $B = 0$. Dwa pozostałe

$$\begin{aligned} A \sin k_1 a - C e^{-k_2 a} &= 0 \\ k_1 A \cos k_1 a + k_2 C e^{-k_2 a} &= 0 \end{aligned}$$

pozwalają wyznaczyć A i C . Jeśli te dwa równania są liniowo niezależne, to istnieje jedno jedyne rozwiązanie. Jest nim $A = 0$ i $C = 0$. Takie rozwiązanie jest нефизyczne – oznacza, że funkcja falowa jest równa 0 wszędzie, a zatem, prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek jest zerowe – tego układu nie ma (?!).

Czy istnieją jakieś fizyczne rozwiązania? Mogą istnieć pod warunkiem, że powyższe dwa równania są liniowo zależne. Żeby takie były, macierz główna współczynników musi być osobliwa, jej wyznacznik musi zniknąć. Żądamy zatem, aby

$$\begin{vmatrix} \sin k_1 a & -e^{-k_2 a} \\ k_1 \cos k_1 a & k_2 e^{-k_2 a} \end{vmatrix} = 0.$$

Właściwie jest to warunek na energię E , uwikłaną w k_1 i k_2 . Może się zdarzyć, że dla pewnych wartości energii z przedziału powyżej zera a poniżej V_1 , warunek powyższy jest spełniony. Wtedy istnieją stany cząstki związanej w studni dla takich właśnie energii.

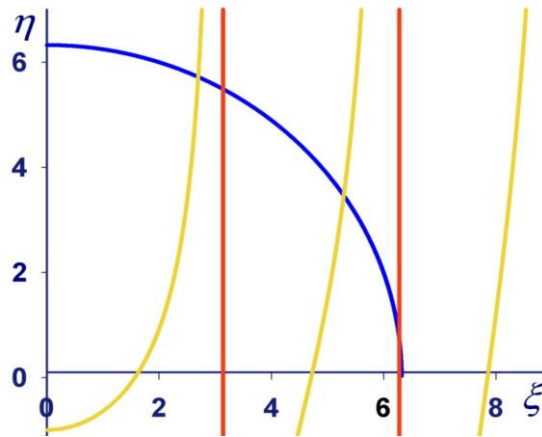
Równanie powyższe jest nieliniowe a jego rozwiązanie nie jest trywialne. Po rozwinięciu wyznacznika i przyjęciu (dla uproszczenia) oznaczeń $\xi \equiv k_1 a$ i $\eta \equiv k_2 a$, otrzymujemy

$$\eta = -\xi \cot \xi.$$

Z definicji przyjętych dla k_1 i k_2 mamy również tożsamościowy związek

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_1 a^2 \equiv R^2.$$

Rysunek MB.2 przedstawia wykresy dwóch ostatnich zależności między ξ i η , wykonane dla konkretnych wartości parametrów $m = 1$ j. u., $a = 2$ j. u., $V_1 = 5$ j. u. i $\hbar = 1$ j. u. (Używamy tu jednostek umownych, specyficznych dla rozważanego układu. Umawiamy się, że masa rozważanej cząstki stanowi jednostkę masy. Jednostki energii są takie, że stała Plancka podzielona przez 2π jest równa 1.) Widać, że w tym przypadku mamy dwa punkty przecięcia wykresów, dwa rozwiązania. Łatwo uzasadnić, że w ogólnym przypadku liczba rozwiązań n jest określona przez warunek $(2n - 1)\frac{\pi}{2} \leq R < 2n + 1)\frac{\pi}{2}$. Jest zawsze skończona. Zależy od szerokości studni a i jej głębokości V_1 . Dla studni wąskiej lub płytkiej może nie istnieć ani jedno rozwiązanie.



Rys. MB.2 Wykresy zależności $\eta = -\xi \cot \xi$ (żółty) i $\xi^2 + \eta^2 = R^2$ (niebieski). Punkty ich przecięcia odpowiadają istnieniu niezerowych rozwiązań równania Schroedingera. Kolorem czerwonym wykreślono asymptoty pionowe w $\xi = m\pi$.

Wartości energii odpowiadających tym rozwiązaniom, wartości własnych hamiltonianu, można uzyskać odczytując z wykresu wartości ξ i η dla punktów przecięcia wykresów. Zastosujemy nieco inny, choć także graficzny, wariant znajdowania tych energii. Ma być spełniony związek $\eta + \xi \cot \xi = 0$. Wykreślmy więc wartości funkcji

$$f(E) = \eta(E) + \xi(E) \cot \xi(E),$$

w zakresie energii, w którym problem rozważaliśmy, $0 < E < V_1$, i znajźmy jej miejsca zerowe.

Rysunek MB.3 przedstawia taki wykres dla przyjętych wcześniej wartości parametrów. Mamy dwa miejsca zerowe, to są dwie energie własne naszego układu: $E_1 \cong 0.91155$ i $E_2 \cong 3.5005$.

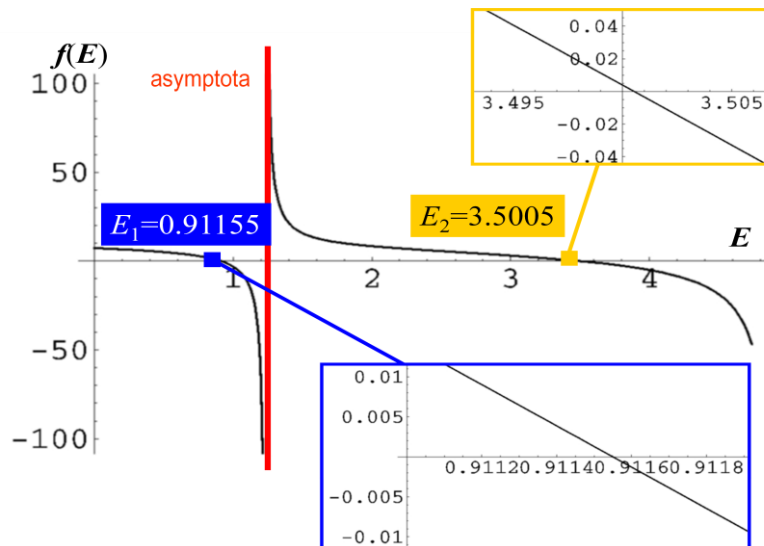
Wstawiając je po kolei do jednego z układu dwóch – zależnych w takim przypadku – równań na A i C dostajemy związek między współczynnikami A i C :

$$C_i = A_i e^{k_2(E_i)a} \sin[k_1(E_i)a], \text{ dla } i = 1, 2.$$

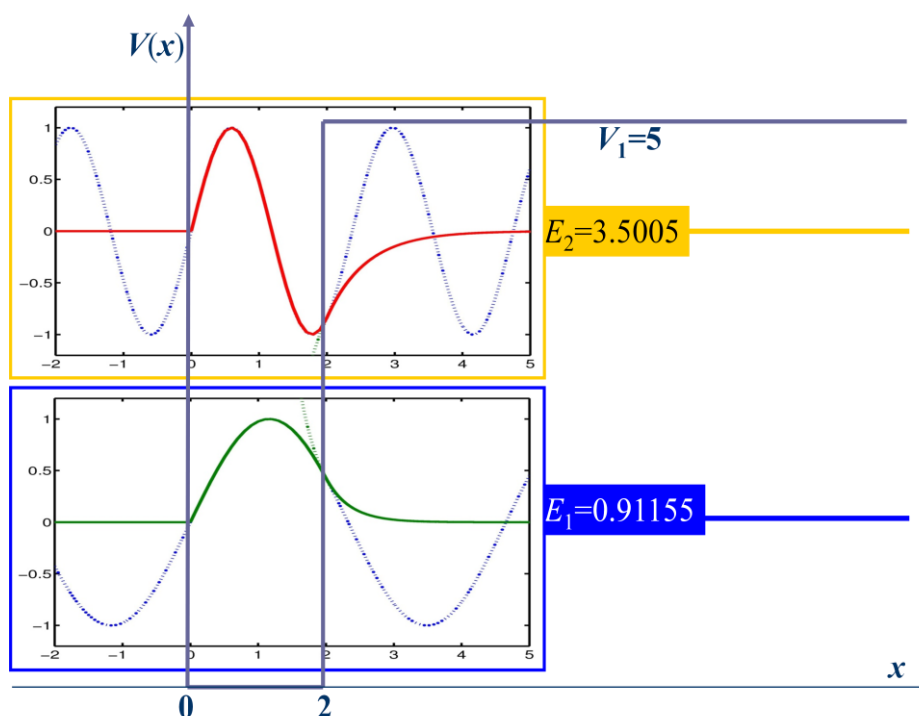
W rezultacie, funkcje falowe odpowiadające wartościom E_i daje się zapisać wzorem

$$\Psi_i(x) = A_i \begin{cases} 0, & \text{dla } x < 0, \\ \sin[k_1(E_i)x], & \text{dla } 0 \leq x \leq a, \\ e^{-k_2(E_i)(x-a)} \sin[k_1(E_i)a], & \text{dla } x > a. \end{cases}$$

Ich wykresy znajdują się na rysunku MB.4.



Rys. MB.3 Wykres funkcji $f(E) = \eta(E) + \xi(E) \cot \xi(E)$. Jej miejsca zerowe odpowiadają wartościom własnym energii (dozwołonym energiom badanego układu). Pionowa czerwona linia jest asymptotą.



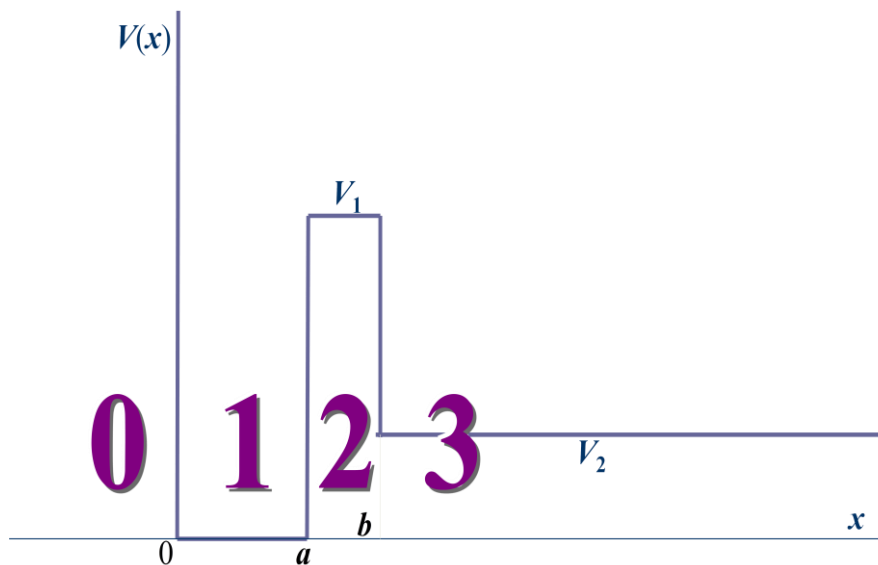
Rys. MB.4 Wykres funkcji falowych jedynych dwóch stanów związanych cząstki w rozważanej studni potencjału. Umieszczono je tradycyjnie na tle wykresu potencjału, każdą na wysokości odpowiadającej jej energii własnej. Ma to na celu wyłącznie ułatwienie skojarzeń. Jedyną wspólną osią dla wszystkich wykresów na tym rysunku jest oś współrzędnych cząstki. Każdy z wykresów funkcji ma swoją, niezależną oś wartości funkcji (niezależną też od osi energii potencjalnej).

Stany rezonansowe układu studnia bariera

Modyfikujemy teraz nasz układ. Obszar „2” jest teraz skończony, sięga do $x = b$. Stanowi barierę. Dalej mamy nieskończenie grubą warstwę materiału o dnie pasma przewodnictwa $V_2 < V_1$. Potencjał odczuwany przez rozważany przez nas elektron

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{dla } x \leq 0, \\ 0, & \text{dla } 0 \leq x \leq a, \\ V_1, & \text{dla } a < x \leq b, \\ V_2, & \text{dla } x > b. \end{cases}$$

przedstawia rys. MB.5 .



Rys. MB.5 Potencjał studnia-bariera. Nieskończoną warstwę 2 z rys. MB.1 ograniczono do odcinka $[a, b]$. Stanowi ona teraz skończoną barierę potencjału, bo dalej (obszar 3) znajduje się nieskończony półprzewodnik o dnie pasma przewodnictwa V_2 powyżej dna pasma przewodnictwa w warstwie studni (obszar 1). Jeśli cząstka o energii powyżej V_2 znajduje się w studni (1), to może wydostać się z niej do obszaru 3 tunelując przez barierę 2. Jej stan nie będzie związany lecz rezonansowy.

Umówmy się, że interesują nas energie tego układu w zakresie $V_2 < E < V_1$. Podobnie jak poprzednio, rozwiązujemy równanie Schroedingera w poszczególnych obszarach. Rozwiązania dla obszarów „0” i „1” SA takie jak w poprzednim przypadku. Obszar „2” jest teraz skończony, więc rosnąca funkcja wykładnicza nie stanowi „fizycznego zagrożenia”. Dopuszczalne rozwiązanie dla tego obszaru ma postać

$$\Phi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}.$$

Sytuacja w zewnętrznym obszarze, „3”, jest teraz inna niż w poprzednim przypadku – rozważane energie cząstki są powyżej wartości energii potencjalnej w tym obszarze. Nie ma powodu, żeby cząstka nie mogła oddalać się dowolnie daleko. Równanie Schroedingera ma tu postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_2(x) + (V_1 - E) \Phi_2(x) = 0$$

lub inaczej

$$\frac{d^2}{dx^2} \Phi_3(x) + k_3^2 \Phi_3(x) = 0, \text{ gdzie } k_3^2 \equiv \frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}, k_3 > 0.$$

Znów jest to równanie identyczne z równaniem oscylatora harmonicznego i można przyjąć ogólne rozwiązanie w postaci kombinacji liniowej sinusa i cosinusa o częstości kołowej k_3 lub w równoważnej postaci

$$\Phi_3(x) = F e^{-ik_3 x} + G e^{ik_3 x} = F(e^{-ik_3 x} + S e^{ik_3 x}).$$

Ta postać jest bardziej przyjazna, bo ma klarowną interpretację fizyczną. Funkcje $e^{ik_3 x}$ i $e^{-ik_3 x}$ są funkcjami własnymi operatora pędu ($\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$) do wartości własnych, odpowiednio, $k_3 \hbar$ i $-k_3 \hbar$. Zatem pierwsza opisuje cząstkę o dodatnim pędzie, czyli uciekającą od układu studnia-bariera, a druga – cząstkę o ujemnym pędzie, zbliżającą się do bariery. Dlatego $e^{ik_3 x}$ nazywa się falą wychodzącą, a $e^{-ik_3 x}$ – falą wchodzącą. Gdyby rozważać sytuację fizyczną jako strumień cząstek padających na barierę, opisanych falą wchodzącą, rozpraszanych na układzie studnia-bariera, to fala wychodząca opisuje strumień cząstek odbitych od układu. Miarą „natężenia” tych strumieni są odpowiednio $|F|^2$ i $|G|^2$. Ich stosunek $|S|^2$ jest swego rodzaju współczynnikiem odbicia. Dlatego w rozwiązaniu szczególnie interesujący będzie współczynnik S , zwany macierzą rozpraszania.

Zszywanie rozwiązań dla poszczególnych obszarów w ciągłą i gładką globalną funkcję falową wymaga spełnienia formalnych warunków

$$\begin{aligned} \Phi_0(0) &= \Phi_1(0), \\ \Phi_1(a) &= \Phi_2(a), \\ \frac{d\Phi_1}{dx} \Big|_{x=a} &= \frac{d\Phi_2}{dx} \Big|_{x=a}, \\ \Phi_2(b) &= \Phi_3(b), \\ \frac{d\Phi_2}{dx} \Big|_{x=b} &= \frac{d\Phi_3}{dx} \Big|_{x=b}. \end{aligned}$$

Ich jawna postać jest następująca

$$\begin{aligned} 0 &= A \sin 0 + B \cos 0, \\ A \sin k_1 a + B \cos k_1 a &= C e^{-k_2 a} + D e^{k_2 a}, \\ k_1 A \cos k_1 a - k_1 B \sin k_1 a &= -k_2 C e^{-k_2 a} + k_2 D e^{k_2 a}, \\ C e^{-k_2 b} + D e^{k_2 b} &= F(e^{-ik_3 b} + S e^{ik_3 b}), \\ -k_2 C e^{-k_2 b} + k_2 D e^{k_2 b} &= -ik_3 F(e^{-ik_3 b} - S e^{ik_3 b}). \end{aligned}$$

Jest to układ pięciu równań liniowych jednorodnych na sześć niewiadomych: A, B, C, D, F, S . Oprócz oczywistego zerowego rozwiązania, istnieją również inne, których charakter jest jak najbardziej fizyczny. Oznacza to, że nie trzeba spełniać dodatkowych warunków, czyli dla dowolnej energii z przyjętego do rozważań zakresu istnieją odpowiednie funkcje falowe spełniające równanie Schroedingera. Każda wartość energii $V_2 < E < V_1$ jest dozwolona.

Jednak rozwiązania te mogą zmieniać się w sposób bardzo istotny ze zmianą energii. Dlatego w dalszej części zajmujemy się badaniem zależności rozwiązania od energii, $\Psi(x; E)$, w zakresie $V_2 < E < V_1$. Zamiast rozwiązywać w pełni układ równań, zastanówmy się przez chwilę, co nas najbardziej w rozwiązaniu interesuje. Potem postaramy się znaleźć tylko odpowiedzi na interesujące pytania, pomijając mniej ważne a zajmujące dużo czasu i miejsca szczegóły. Myśląc o zagadnieniu

jako o strumieniu cząstek padających na układ studnia-bariery, odbijających się od bariery lub tunelujących przez nią do wnętrza studni, za najmniej interesującą część rozwiązania trzeba uznać część wewnątrz bariery. Nie będziemy więc poszukiwać współczynników C i D . Rozwiązanie wewnątrz studni zdeterminowane jest przez współczynnik A (bo $B = 0$). Od jego wartości zależy prawdopodobieństwo znalezienia cząstki wewnątrz studni. Wyznaczenie tego prawdopodobieństwa nie wcale prostą sprawą, bo funkcje nasze nie dają się unormować do jedynki (nie są „całkowalne z kwadratem”; nie znikają w nieskończoności). Gdyby funkcja stanu była unormowana, to prawdopodobieństwo znalezienia w studni cząstki o energii E liczylibyśmy według przepisu $P = \int_0^a |\Psi(x; E)|^2 dx$. Przyjmując, że „nieunormowanie jest takie samo” niezależnie od energii, możemy uznać stosunek

$$\frac{\int_0^a |\Psi(x; E_1)|^2 dx}{\int_0^a |\Psi(x; E_2)|^2 dx} \cong \frac{|A(E_1)|^2}{|A(E_2)|^2}$$

za względne prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w studni mówiące ile razy bardziej prawdopodobne jest znalezienie cząstki w studni, kiedy ma ona energię E_1 , niż wtedy, kiedy posiada energię o wartości E_2 . (Dalsze przybliżenie w powyższym równaniu, sprowadzenie całości do stosunku kwadratów modułu współczynnika A , wynika z przyjęcia, że zależność $k_1(E)$ jest znacznie mniej gwałtowna niż zależność $A(E)$.)

Na zewnątrz bariery istotną informację o rozwiązaniu zawiera macierz rozpraszania S . Współczynnik F możemy uznać za niezależny, który można zmieniać w sposób dowolny. (Mamy pięć równań na sześć niewiadomych. Rozwiązanie jest niejednoznaczne – można pięć niewiadomych wyznaczyć za pomocą szóstej. Wybór F do tej roli jest dość naturalny, to F określa natężenie strumienia padających cząstek).

Rozwiązujemy więc układ tylko ze względu na A i S . Oto rozwiązanie:

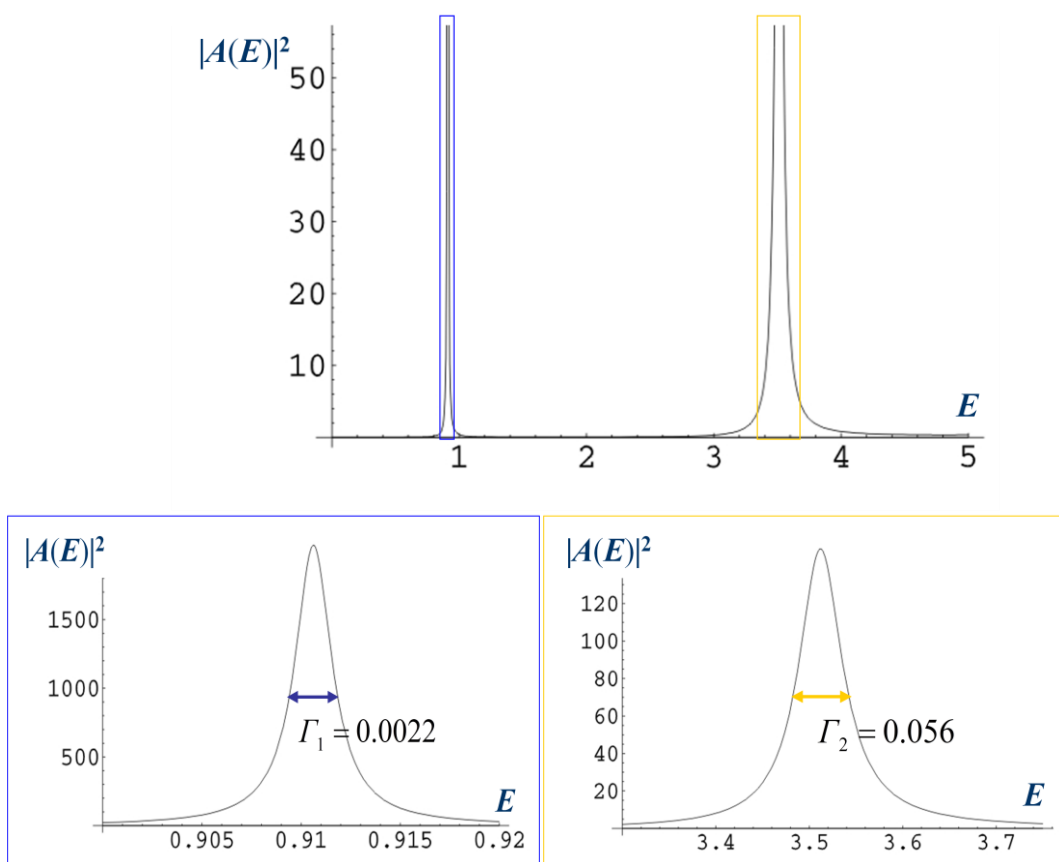
$$A = -F \frac{4ik_2k_3 e^{2k_2(a+b)} e^{-ik_3b}}{k_2 \sin k_1 a [e^{2k_2b} (k_2 - ik_3) - e^{2k_2a} (k_2 + ik_3)] + k_1 \cos k_1 a [e^{2k_2b} (k_2 - ik_3) + e^{2k_2a} (k_2 + ik_3)]}$$

$$S = \frac{k_2 \sin k_1 a [e^{2k_2a} (k_2 - ik_3) - e^{2k_2b} (k_2 + ik_3)] - k_1 \cos k_1 a [e^{2k_2a} (k_2 - ik_3) + e^{2k_2b} (k_2 + ik_3)]}{k_2 \sin k_1 a [e^{2k_2b} (k_2 - ik_3) - e^{2k_2a} (k_2 + ik_3)] + k_1 \cos k_1 a [e^{2k_2b} (k_2 - ik_3) + e^{2k_2a} (k_2 + ik_3)]}$$

Współczynniki są zespolone i zapisane tak złożonymi formułami, że trudno jest z nich samych sądzić cokolwiek o zależności od energii. Zobaczmy ją na wykresach. Rozważamy przykład dla konkretnych wartości parametrów układu, takich jak poprzednio, $m = 1$, $a = 2$, $V_1 = 5$ i $\hbar = 1$ oraz dodatkowo $V_1 = 0$ i $b = 3$.

Zaczynamy od wnętrza studni. Ponieważ nie samo A , lecz $|A(E)|^2$ określa względne prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w studni, na rys. MB.6 wykreślamy zależność tej wielkości od energii. W przyjętym do rozważań zakresie energii od $V_2 = 0$ do $V_1 = 5$ mają miejsce dwa wybitne maksima w okolicach wartości energii będących jedynymi dozwolonymi energiami cząstki w studni. Wtedy cząstka mogła znaleźć się w studni mając jedynie energię E_1 lub E_2 . Teraz, w obecności

skończonej bariery, może znaleźć się w studni mając dowolną energię. Jednak prawdopodobieństwo tego jest niezwykle małe prawie dla wszystkich wartości energii. Tylko w sąsiedztwie E_1 i E_2 wrasta wielokrotnie, o kilka rzędów wielkości. Na dolnej części rys. MB.6 pokazano obydwie maksima bardziej szczegółowo. Ich profile mają identyczny charakter. Wiadomo skądinąd, że ich kształt jest opisany krzywą Lorentza. Profile te różnią się jednak znacznie szerokością mierzoną w połowie wysokości. Jeden, ten w pobliżu niższej energii E_1 , jest bardzo wąski, ma szerokość połówkową $\Gamma_1 = 0.0022$ j. u., a drugi, ten w pobliżu E_2 , ma szerokość znacznie większą, $\Gamma_2 = 0.056$ j. u. Szerokości mają istotne znaczenie fizyczne – są prawdopodobieństwami ucieczki cząstki ze studni w jednostce czasu. (Same wartości nie mają znaczenia, ponieważ przyjęte wartości parametrów układu nie mają szczególnego fizycznego zastosowania. Zwracamy jednak uwagę na wartości, bo poniżej odnajdziemy te same charakterystyki w zgoła innym miejscu).

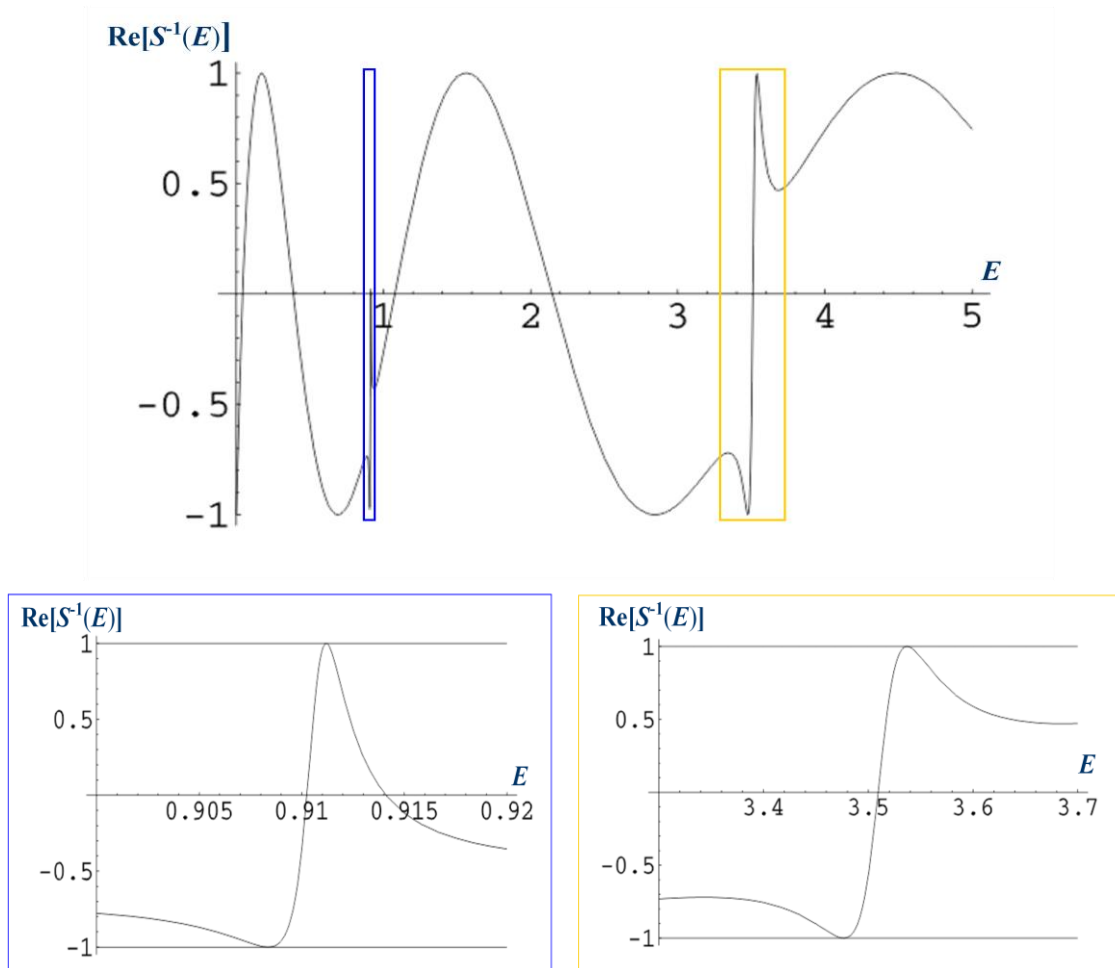


Rys. MB.6 Wielkość $|A(E)|^2$, do której proporcjonalne jest prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w studni. Górny wykres obejmuje cały badany zakres energii. Obszary zaznaczone kolorowymi prostokątami są powiększone w dolnej części.

Najwyraźniej widać, że możliwość uwięzienia cząstki w studni ma rezonansowy charakter. Jego prawdopodobieństwo jest duże tylko w pobliżu energii własnych studni, w skończonych przedziałach o szerokościach określonych przez Γ – analogicznie do drgających układów, które łatwo pobudzić do drgań tylko z częstotliwościami w pobliżu częstotliwości drgań własnych układu.

Jeśli wpadanie cząstki do studni ma charakter rezonansowy, to również odbicie od bariery musi przejawiać gwałtowne rezonansowe zachowanie w pobliżu energii E_1 i E_2 . Rzeczywiście, widać

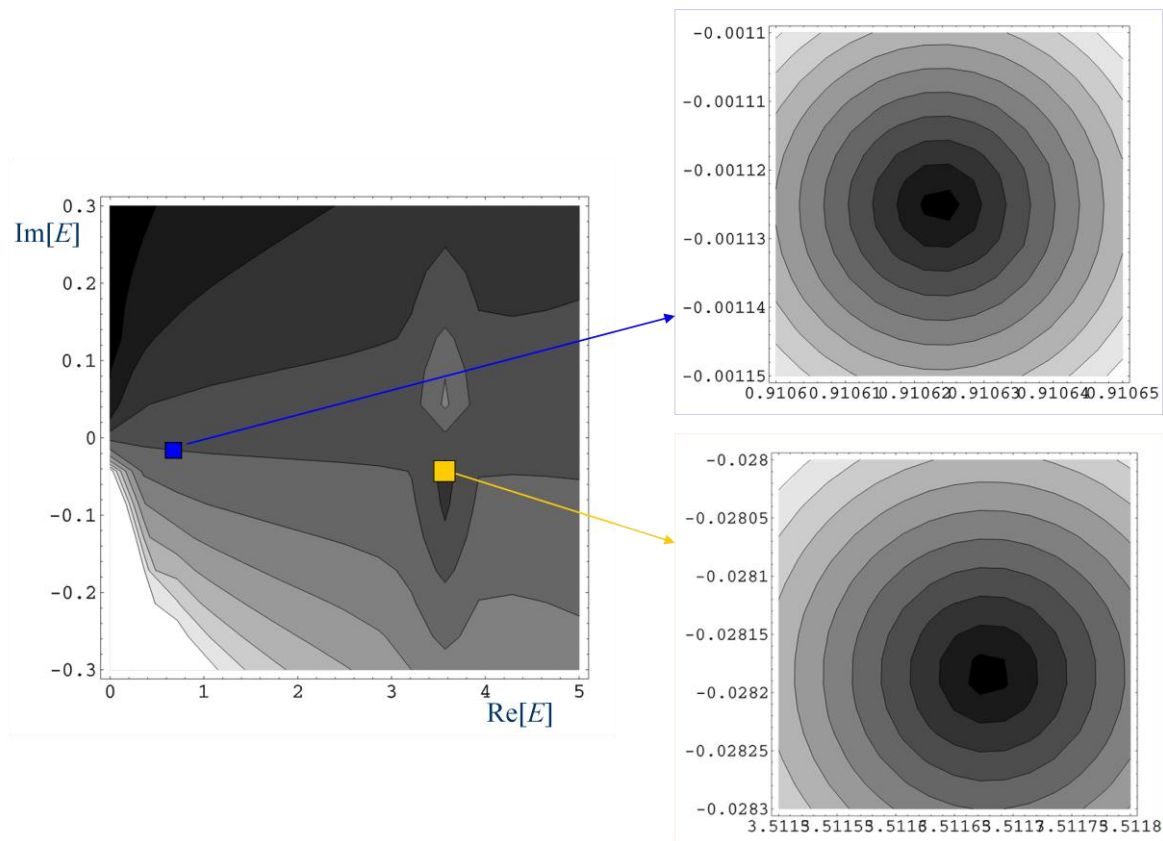
to na rys. MB.7, gdzie wykreślono zależność od energii części rzeczywistej odwrotności S . Na tle gładkiej, oscylacyjnej zależności pojawiają się dwie gwałtowne struktury w okolicach E_1 i E_2 . Ich powiększenia pokazują, że mają taki sam charakter, ale jedna jest wąska a druga szeroka. Podobne rezonansowe zachowanie będzie ujawniać się w części urojonej, argumencie, module S . Zajmiemy się zbadaniem modułu. Zrobimy to w sposób nieco zaskakujący.



Rys. MB.7 Część rzeczywista odwrotności macierzy rozpraszania, współczynnika S . Górny wykres obejmuje cały badany zakres energii. Obszary zaznaczone kolorowymi prostokątami są powiększone w dolnej części.

Puśćmy wodze fantazji i przyjmijmy, że argument E jest zespolony. Dla matematyka nie stanowi to żadnego problemu. Dla fizyka, przyjęcie, że energia może mieć wartości zespolone jest trudne do zaakceptowania. Tym bardziej, że w kursie podstawowym fizyki kwantowej dowodzi się, iż wartości własne operatorów hermitowskich (jakimi mają być operatory wszystkich obserwowalnych wielkości fizycznych) są rzeczywiste. Tak, ale dotyczy to przestrzeni stanów unormowanych, związanych, nie dotyczy stanów nieograniczonych przestrzennie, jakimi są stany rezonansowe. Nie ma więc przyczyn zasadniczych, żeby wzbraniać się przed zespolonym charakterem E . Są psychologiczne. Ciągłe zaniepokojonych zapewniam, że i dla części rzeczywistej i dla urojonej znajdzie się właściwa interpretacja fizyczna.

Ze względów technicznych, które staną się oczywiste za chwilę, zajmiemy się $|S|^{-1}$. Ponieważ mamy badać zależność od dwuwymiarowego, zespolonego argumentu, posłużymy się wykresem konturowym. Przedstawiamy go na rys. MB.8. Widać wyraźnie dwa małe obszary, w których wartość $|S|^{-1}$ gwałtownie spada. Leżą one w pobliżu $\text{Re}(E) = E_1$ i $\text{Re}(E) = E_2$, ale wcale nie na osi $\text{Re}(E)$, lecz poniżej. Jedno z minimów ma miejsce dla $\check{E}_1 \cong 0.91062 - i0.001125$, a drugie dla $\check{E}_2 \cong 3.51168 - i0.02818$. Jest dla nas oczywiste, że części rzeczywiste tych szczególnych liczb są bliskie wartościom energii własnych dla studni, $E_1 = 0.91155$ i $E_2 = 3.5005$. Zauważmy, że nie są jednak takie same. Różnice nie wynikają z jakiejś niedokładności, są fizycznym przejawem modyfikacji układu. Mówi się często, że są przesunięciem pochodzącym od kontinuum energii (w układzie studnia-bariera wszystkie energie powyżej $V_1 = 0$ są dozwolone).

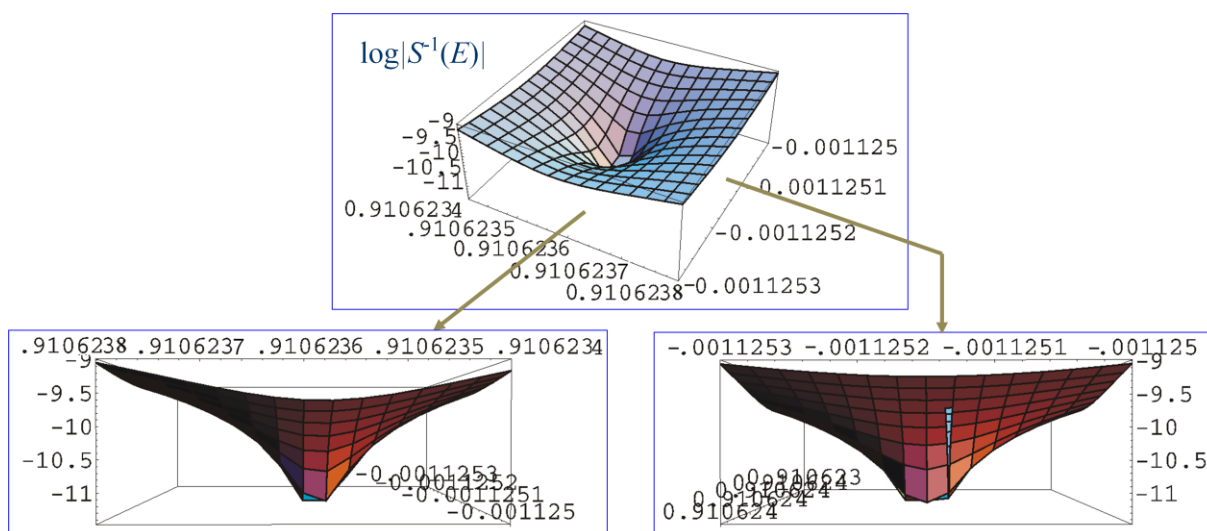


Rys. MB.8 Odwrotność modułu macierzy rozpraszania $|S|^{-1}$ w zależności od zespolonej zmiennej E . Im ciemniejszy odcień tym mniejsza wartość $|S|^{-1}$. Wykres po lewej stronie obejmuje cały badany zakres energii, $V_2 = 0 < \text{Re}(E) < V_1 = 5$. Obszary zaznaczone kolorowymi prostokątami są powiększone po prawej stronie.

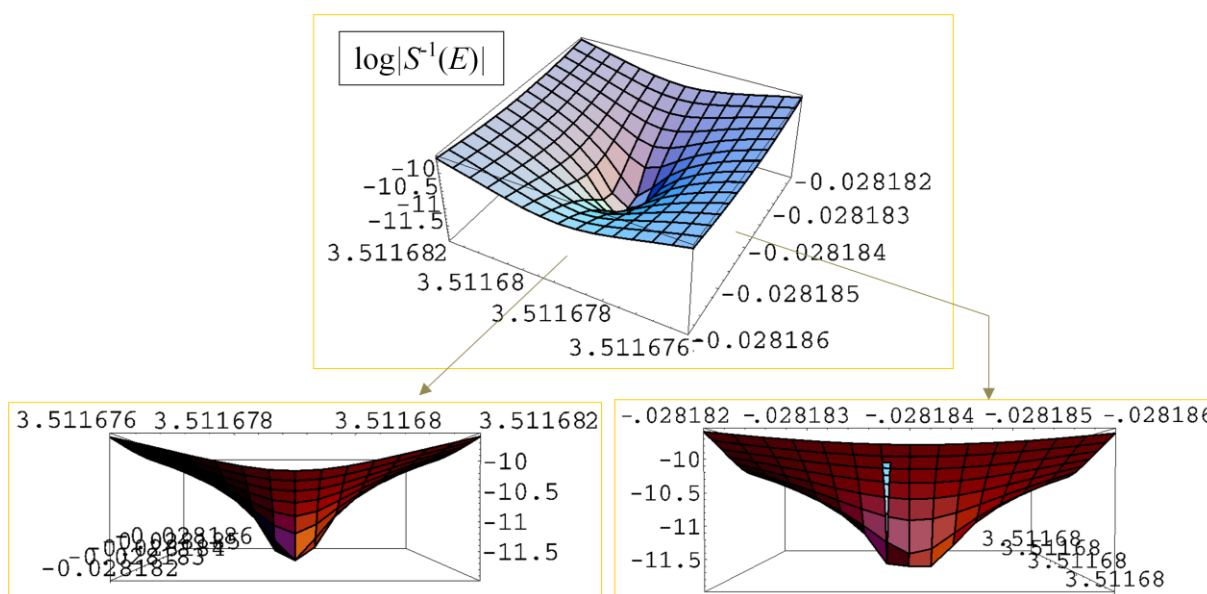
A co z częściami urojonymi? Zauważmy, że jeśli je podwoić, to otrzymujemy wartości szerokości półwkowych otrzymanych dla pików $|A(E)|^2$. Znaleźliśmy więc pewne szczególne zespolone wartości własne równania Schroedingera, których część rzeczywista odpowiada energetycznemu położeniu rezonansu, E_r , a część urojona – połowie jego szerokości półwkowej, Γ : $\check{E} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}$.

Jak głębokie są owe minima widoczne na rys. MB.8? Czy sięgają wartości 0? Żeby to sprawdzić posługujemy się wykresami 3D na rys. MB.9 i MB.10. Przedstawiają one $\log|S^{-1}(E)|$

odpowiednio dla niższego i wyższego energetycznie rezonansu. Podgląd z różnych stron pozwala lepiej odczytać położenie minimum. Na tych rysunkach minima osiągają wartość rzędu 10^{-11} . Zejście dowolnie blisko zera jest kwestią cierpliwości badacza. Rozważane przez nas minima są punktami, w których $S^{-1} = 0$. (Dlatego łatwiej było wykreślać S^{-1} zamiast S). Oznacza to, że w tym szczególnych punktach funkcja falowa nie zawiera fali wchodzącej. Jest tylko fala wychodząca. Są to szczególne warunki asymptotyczne, które można by przyjąć za definicję stanów rezonansowych. Są one stanami pseudozwiązanymi, które mogą się rozpaść. Zawierają więc tylko falę wychodzącą, która taki rozpad opisuje – opisuje uciekającą z układu cząstkę.



Rys. MB.9 $\log|S^{-1}|$ w zależności od zespolonej zmiennej E w pobliżu niższego energetycznie rezonansu rozważanego układu studnia-bariera; na dole oddzielnie widok od strony osi rzeczywistej (po lewej) i od strony osi urojonej (po prawej)



Rys. MB.10 $\log|S^{-1}|$ w zależności od zespolonej zmiennej E w pobliżu wyższego energetycznie rezonansu rozważanego układu studnia-bariera; na dole oddzielnie widok od strony osi rzeczywistej (po lewej) i od strony osi urojonej (po prawej)

Połączenie dwóch parametrów rezonansu, energetycznego położenia i szerokości, w zespolonej „energii” $\tilde{E} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}$ ma szczególny sens w kontekście ewolucji stanu, czyli – w naszym przypadku – rozpadu układu rezonansowego. W pierwszym rozdziale podaliśmy postulaty mechaniki kwantowej. Według jednego z nich, ewolucja każdego stanu odbywa się zgodnie z równaniem Schroedingera zależnym od czasu. Szczególnym przypadkiem są stany własne hamiltonianu niezależnego od czasu. Ewolują one zgodnie z

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(x), \text{ gdzie } \hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x).$$

Wtedy gęstość prawdopodobieństwa $|\psi(x, t)|^2$ dla stanu rezonansowego zmienia się w czasie wykładniczo

$$|\psi(x, t)|^2 = \left| e^{-\frac{i}{\hbar}(E_r - i\Gamma/2)t}\Psi(x) \right|^2 = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}|\Psi(x)|^2 .$$

Zatem w stanie rezonansowym prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w studni maleje wykładniczo. Po czasie $\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$, zwanym średnim czasem życia, maleje e -krotnie.

Przybliżone metody znajdowania położenia i szerokości stanów rezonansowych

Proponujemy tu dwie metody o charakterze wariacyjnym polegające na rozwinięciu poszukiwanej przybliżonej funkcji falowej stanu rezonansowego w bazie zadanych funkcji unormowanych i optymalizacji względem dodatkowych (nieliniowych), specyficznych dla metody parametrów. Z punktu widzenia praktycznych obliczeń, największym problemem jest występowanie rozmytego poziomu rezonansowego na tle ciągłego widma energii odpowiadających stanom niezwiązanym. W związku z tym obliczenia wariacyjne polegające na rozwinięciu funkcji rezonansowej w bazie dają zestaw energii, wśród których trudno zidentyfikować wartość odpowiadającą stanowi rezonansowemu. Drugim problemem jest nienormowalność ścisłej funkcji rezonansowej, co czyni jej reprezentację w bazie funkcji unormowanych istotnym przybliżeniem.

Metoda stabilizacji pozwala na drodze szczególnej optymalizacji wyłonić rezonansowy poziom energetyczny spośród energii odpowiadających stanom niezwiązanym. Jest jednak obciążona błędem ograniczenia poszukiwań funkcji rezonansowej do rozwinięcia w bazie funkcji całkowalnych z kwadratem. Metoda obrotu zespolonego pozwala znaleźć obydwa parametry rezonansu, położenie energetyczne i szerokość, jako rzeczywistą i urojoną część szczególnej zespolonej wartości własnej. Posługuje się transformacją przeprowadzającą funkcję rezonansową w funkcję całkowalną z kwadratem (dającą się unormować). Dzięki temu stosowanie baz funkcji całkowalnych z kwadratem jest w pełni uzasadnione.

Metoda stabilizacji

Zakładamy, że dana jest baza N funkcji $\{\varphi_i(\vec{r})\}_{i=1}^N$. Są one unormowane i określone jednoznacznie. Jeśli zastosować tę bazę do rozwinięcia poszukiwanej funkcji rezonansowej, to jedynymi parametrami wariacyjnymi – umożliwiającymi dopasowanie rozwinięcia tak, aby równanie Schroedingera było spełnione z najlepszą możliwą dokładnością – byłyby współczynniki rozwinięcia (parametry liniowe). Wprowadzimy dodatkowo jeden parametr nieliniowy, wspólny dla wszystkich funkcji bazowych, manipulowanie którym (wariowanie go) umożliwi nam identyfikację rozwiązań dla stanów rezonansowych. Będzie to parametr skalowania współrzędnych, $\vec{r} \rightarrow \alpha\vec{r}$. Wprowadzimy te przeskalowane współrzędne do funkcji bazowych otrzymując bazę funkcji w dodatkowym parametrem α , $\{\varphi_i^\alpha(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_i(\alpha\vec{r})\}_{i=1}^N$. Dopiero w takiej bazie rozwijamy poszukiwaną funkcję rezonansową :

$$\psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha) = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i^\alpha(\vec{r}).$$

Energię odpowiadającą funkcji ψ znajdujemy jako tzw. wartość oczekiwaną:

$$E(c_1, \dots, c_N, \alpha) = \frac{\langle \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha) | \hat{H} | \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha) \rangle}{\langle \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha) | \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha) \rangle}.$$

Optymalna z punktu widzenia spełnienia równania Schroedingera jest ta funkcja $\psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N, \alpha)$, dla której

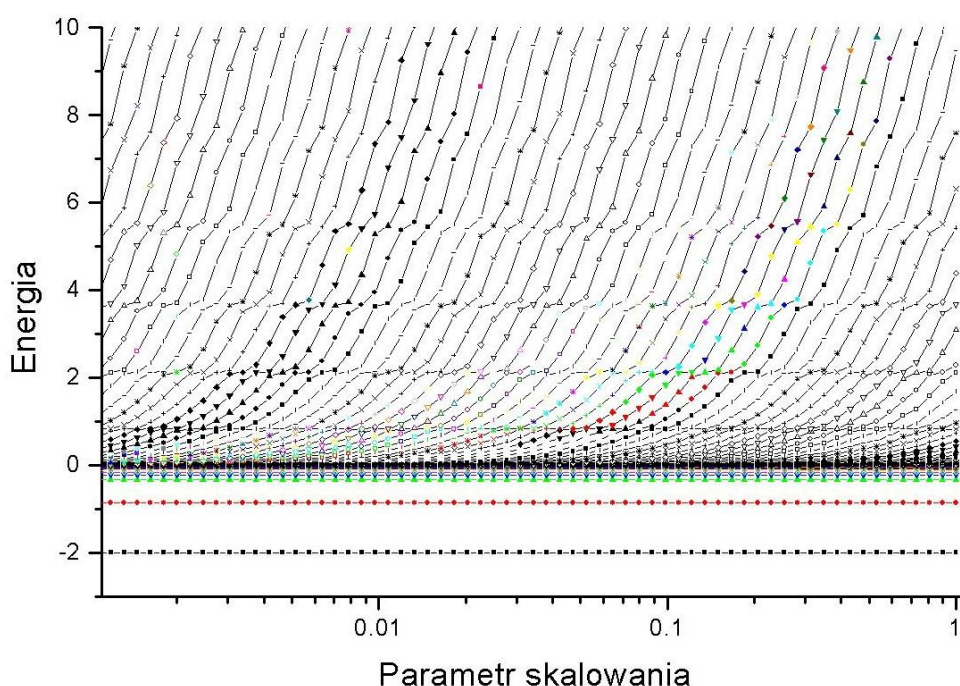
$$\left. \frac{\partial E(c_1, \dots, c_N, \alpha)}{\partial c_i} \right|_{c_i^{\text{opt}}} = 0 \quad \text{i} \quad \left. \frac{\partial E(c_1, \dots, c_N, \alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha^{\text{opt}}} = 0.$$

Ustalmy na razie wartość α i zajmijmy się pierwszym warunkiem. Ponieważ zależność od współczynników c_i jest jednoznacznie określona w sposób analityczny, warunek ten prowadzi po krótkich obliczeniach do równania macierzowego

$$\mathbf{H}(\alpha)\mathbf{C}^{\text{opt}}(\alpha) = E(\alpha)\mathbf{S}(\alpha)\mathbf{C}^{\text{opt}}(\alpha),$$

gdzie $\mathbf{C}^{\text{opt}}(\alpha)$ jest kolumnowym wektorem, którego składowymi są c_i^{opt} , $\mathbf{H}(\alpha)$ jest tzw. macierzą hamiltonianu zbudowaną z elementów $H_{ij}(\alpha) = \langle \varphi_i^\alpha | \hat{H} | \varphi_j^\alpha \rangle$ a $\mathbf{S}(\alpha)$ – macierzą iloczynów skalarnych funkcji bazowych $S_{ij}(\alpha) = \langle \varphi_i^\alpha | \varphi_j^\alpha \rangle$. Rozwiązujemy więc algebraiczny problem (uogólnione równanie własne) dla macierzy kwadratowych o wymiarze $N \times N$. Otrzymamy N rozwiązań – N rzeczywistych wartości własnych $E_k(\alpha)$. Wśród nich, niektóre mogą odpowiadać stanom związanym, liczne stanom niezwiązanym i pewne stanom rezonansowym. Te ostatnie nas interesują, ale nie potrafimy odróżnić ich od energii stanów niezwiązanym.

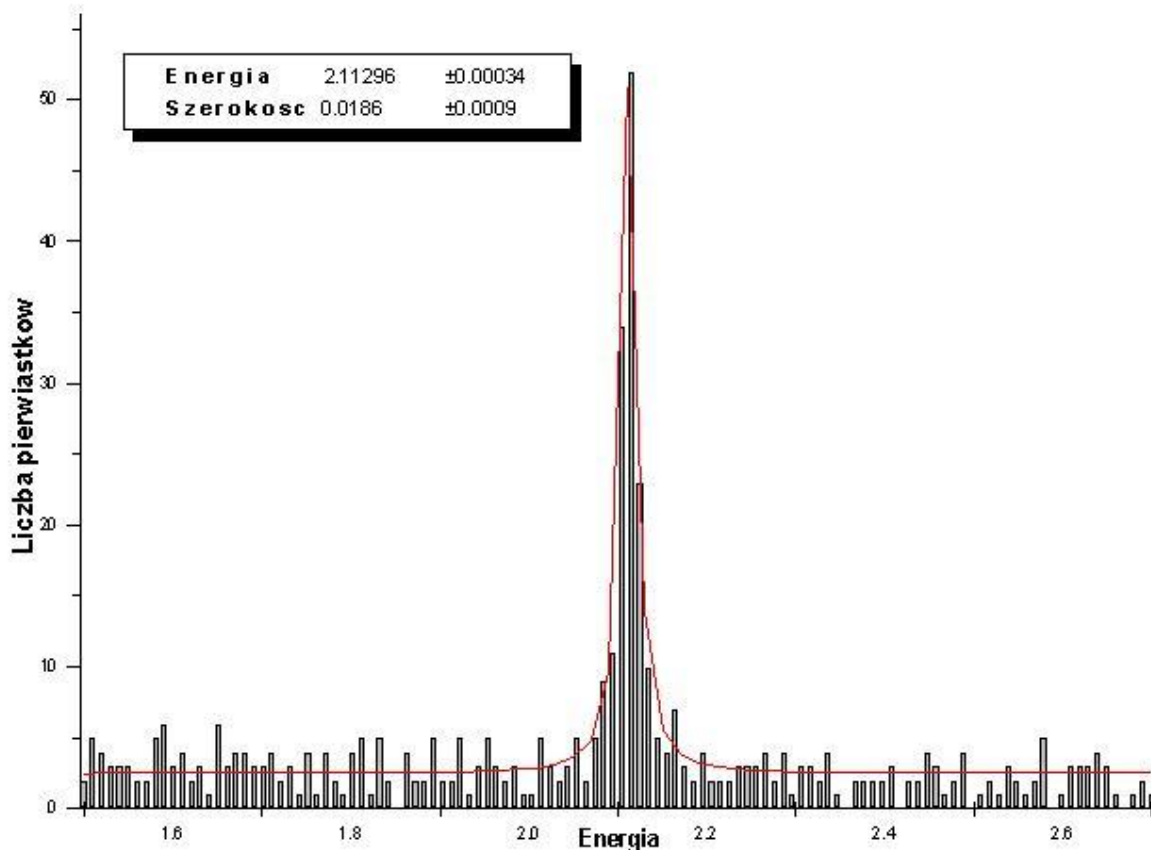
Zajmujemy się teraz poszukiwaniem optymalnej wartości parametru skalowania współrzędnych, α . Nie jesteśmy w stanie określić analitycznie zależności rozwiązań $E_k(\alpha)$ od α . Ustalamy więc punkt optymalny, dla którego $\frac{\partial E_k(\alpha)}{\partial \alpha} = 0$, na drodze numerycznej: 1) wykonujemy serię obliczeń dla wielu wartości α , które zmieniamy w sposób systematyczny, 2) wartości własne $E_k(\alpha)$ otrzymane dla danej wartości α porządkujemy od najmniejszej do największej, 3) wykreślamy zależność kolejnych pierwiastków E_k od α . Przykładowy obraz, otrzymany w taki sposób, pokazany jest na rysunku MB.11. W zasadzie, w miarę rozszerzania się funkcji na skutek skalowania $\alpha \vec{r}$,



Rys. MB.11 Stabilizacja energii pewnego układu w zależności od parametru skalowania współrzędnych, α . Poziome linie dla energii poniżej zera odpowiadają stanom związanym. (Są poziome, bo baza doskonale je odtwarza, niezależnie od parametru α). Obszar widma ciągłego energii rozciąga się powyżej zera. W tym zakresie, każdy z pierwiastków rośnie wraz ze wzrostem α . Jednak stabilizuje się na pewnych poziomach (odpowiadających rezonansom) w niewielkim przedziale wartości α , do momentu aż następny pierwiastek dotrze do tego poziomu i przejmie rolę reprezentowania energii stanu rezonansowego.

wszystkie E_k maleją monotonicznie ku progowi, w którym zaczyna się widmo ciągłe energii. Jednak na pewnych poziomach stabilizują się. Te poziomy energetyczne przypisujemy stanom rezonansowym. Ich wartość można z pewną (ograniczoną) dokładnością odczytać z wykresu lub otrzymać numerycznie z równania $\frac{dE_k(\alpha)}{d\alpha} = 0$. Można też zastosować opisaną niżej procedurę, która pozwala oprócz położenia poziomu energetycznego określić także jego szerokość.

Systematyczne skalowanie współrzędnych pociąga za sobą systematyczne zmiany wartości własnych. Jest to swego rodzaju przeglądanie kontinuum dozwolonych energii. Jeśli liczba wartości parametru α i liczba funkcji bazowych, N , są dość duże, to otrzymujemy liczny zbiór wartości własnych, których gęstość względem energii reprezentuje dość dobrze gęstość stanów badanego układu. W praktyce reprezentujemy ją za pomocą histogramu – dzielimy rozpatrywany przedział energii (w którym poszukujemy stanów rezonansowych) na małe przedziały o jednakowej szerokości, zliczamy ile wartości własnych przypada na dany przedział (dla wszystkich wartości α). Jest dość oczywiste, że w tak przygotowanym histogramie, pojawią się maksima w pobliżu poziomów stabilizacji wartości własnych, tj. w pobliżu poziomów rezonansowych. Na rys. MB.12 przedstawiamy przykład takiego maksimum odpowiadającego poziomowi około 2.1 umownych jednostek na Rys.MB.11.



Rys. MB.12 Gęstość stanów w zakresie widma ciągłego energii w okolicy jednego z rezonansów (Rys.MB.11), reprezentowana przez rozkład pierwiastków pochodzących z obliczeń metodą stabilizacji. Czerwona krzywa jest dopasowaną do rozkładu pierwiastków krzywą Lorentza. Parametrami dopasowania są położenie i szerokość rezonansu podane na rysunku.

Takie maksima odpowiadają w istocie rzeczy maksimum pokazanym na Rys.MB.6. Mają rezonansowy charakter, który można opisać krzywą Lorentza. Dlatego, do rozkładu pierwiastków w pobliżu wybranego stanu rezonansowego dopasowujemy krzywą Lorentza

$$\rho(E) = \rho_0 + \frac{D}{(E - E_r)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2}.$$

Spośród czterech parametrów dopasowania (ρ_0, D, E_r, Γ) , dwa mają istotne znaczenie dla określenia rezonansu. Są to położenie poziomu rezonansowego, E_r , i jego szerokość Γ . Ostatecznie wartości tych parametrów otrzymane w drodze dopasowania krzywej Lorentza do rezonansowej struktury w gęstości stanów (w rozkładzie pierwiastków) uznajemy za najbardziej wiarygodne wartości parametrów stanu rezonansowego jakie można otrzymać metodą stabilizacji.

Metoda obrotu zespolonego współrzędnych

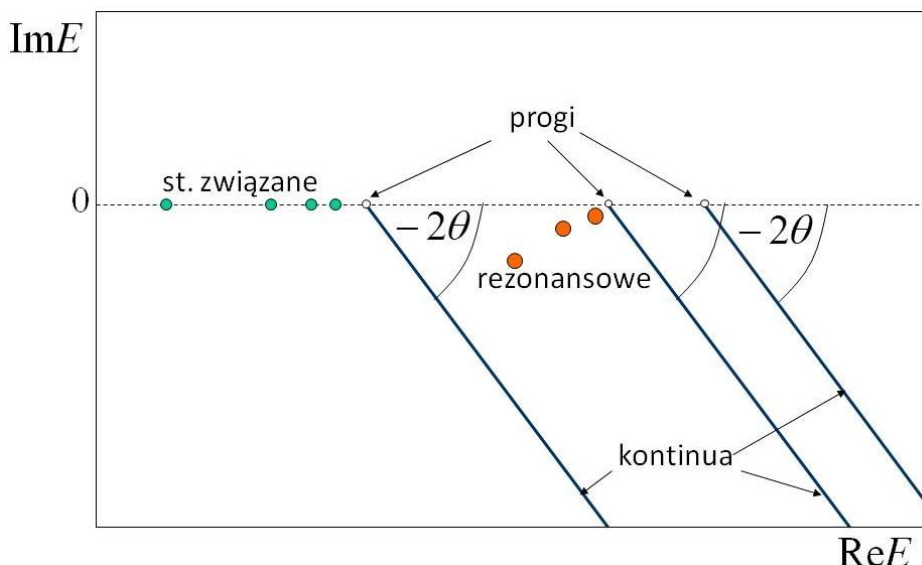
Metoda obrotu zespolonego współrzędnych jest podobna do metody stabilizacji. Stosuje się w niej skalowanie współrzędnych za pomocą zespolonego czynnika $\alpha = e^{i\theta}$, gdzie $\theta > 0$ jest rzeczywistym parametrem. Transformacja $\vec{r} \rightarrow e^{i\theta}\vec{r}$ nazywana jest obrotem zespolonym współrzędnych lub skalowaniem zespolonym. Stąd też metoda nazywana jest czasami skalowaniem zespolonym współrzędnych.

Metoda występuje w kilku odmianach. W najprostszej wersji, transformacja obrotu jest stosowana do współrzędnych w hamiltonianie, a nie w funkcjach. Udowodniono matematycznie, że widmo wartości własnych przetransformowanego operatora Hamiltona, $\hat{H}(e^{i\theta}\vec{r})$ jest w ścisłych relacjach z widmem oryginalnego operatora i można jego składowe interpretować fizycznie. W szczególności:

- 1) Dyskretne wartości własne oryginalnego operatora $\hat{H}(\vec{r})$, odpowiadające stanom związanym, nie zmieniają się na skutek obrotu zespolonego współrzędnych.
- 2) Widmo ciągłe energii odpowiadających stanom niezwiązanym obraca się względem progu widma ciągłego na płaszczyznę zespoloną o kąt -2θ .
- 3) Energie stanów rezonansowych są zespolone, odizolowane od widma ciągłego i w znacznym zakresie niezależne od kąta obrotu θ . Mają ujemną część urojoną.

Własności te zilustrowano na Rys. MB.13.

Oczywistą zaletą tej metody jest znajdowanie obu parametrów rezonansowego poziomu energetycznego w jednej liczbie zespolonej, $\tilde{E} = E_r - i\frac{\Gamma}{2}$, którą stosunkowo łatwo można odróżnić od zespolonych energii odpowiadających stanom niezwiązanym. Drugą – bardzo poważną – zaletą metody obrotu zespolonego współrzędnych jest fakt, że transformacja obrotu czyni rezonansową funkcję falową całkowalną z kwadratem. Ograniczenie się do stosowania bazy funkcji całkowalnych z kwadratem (wygodnych z powodów praktycznych) nie stanowi w tym przypadku przybliżenia (w przeciwieństwie do metody stabilizacji).



Rys. MB.13 Schemat przedstawiający widmo wartości własnych obróconego na sposób zespolony hamiltonianu. Energie odpowiadające stanom związanym i progom (początkom) widma ciągłego pozostają niezmienione przez obrót. Półproste widma ciągłego są obrócone wokół progów widma o kąt 2θ na dolną półpłaszczyznę zespoloną. Wartości własne odpowiadające rezonansom pojawiają się na dolnej półpłaszczyźnie i są odseparowane od widma ciągłego.

W praktyce, z powodu skończonej przestrzeni (skończona baza), w której poszukujemy funkcji stanu rezonansowego, przybliżona energia rezonansu zależy w nieznaczny sposób od θ . Dlatego kąt obrotu traktujemy również jako parametr wariacyjny. Przepis na realizację obliczeń metodą obrotu zespolonego jest następujący:

- 1) Dokonujemy obrotu zespolonego współrzędnych w Hamiltonianie – otrzymujemy $\hat{H}(e^{i\theta}\vec{r})$.
- 2) Poszukujemy rezonansowego rozwiązania równania własnego operatora $\hat{H}(e^{i\theta}\vec{r})$ w postaci rozwinięcia $\psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N) = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i(\vec{r})$, gdzie φ_i są zadanymi funkcjami bazowymi.

- 3) Energię odpowiadającą takiemu rozwinięciu wyraża wartość oczekiwana

$$E(c_1, \dots, c_N, \theta) = \frac{\langle \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N) | \hat{H}(e^{i\theta}\vec{r}) | \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N) \rangle}{\langle \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N) | \psi(\vec{r}; c_1, \dots, c_N) \rangle}.$$

- 4) Optymalne zestawy współczynników c_i i odpowiadające tym zestawom energie znajdujemy rozwiązując równanie macierzowe

$$\mathbf{H}(\theta)\mathbf{C}^{\text{opt}}(\theta) = E(\theta)\mathbf{S}\mathbf{C}^{\text{opt}}(\theta),$$

gdzie $\mathbf{C}^{\text{opt}}(\theta)$ jest kolumnowym wektorem, którego składowymi są $c_i^{\text{opt}}(\theta)$,

$\mathbf{H}(\theta)$ jest tzw. macierzą obróconego hamiltonianu zbudowaną z elementów

$$H_{ij}(\theta) = \langle \varphi_i | \hat{H}(e^{i\theta}\vec{r}) | \varphi_j \rangle, \text{ a } \mathbf{S} - \text{ macierzą iloczynów skalarnych funkcji bazowych}$$

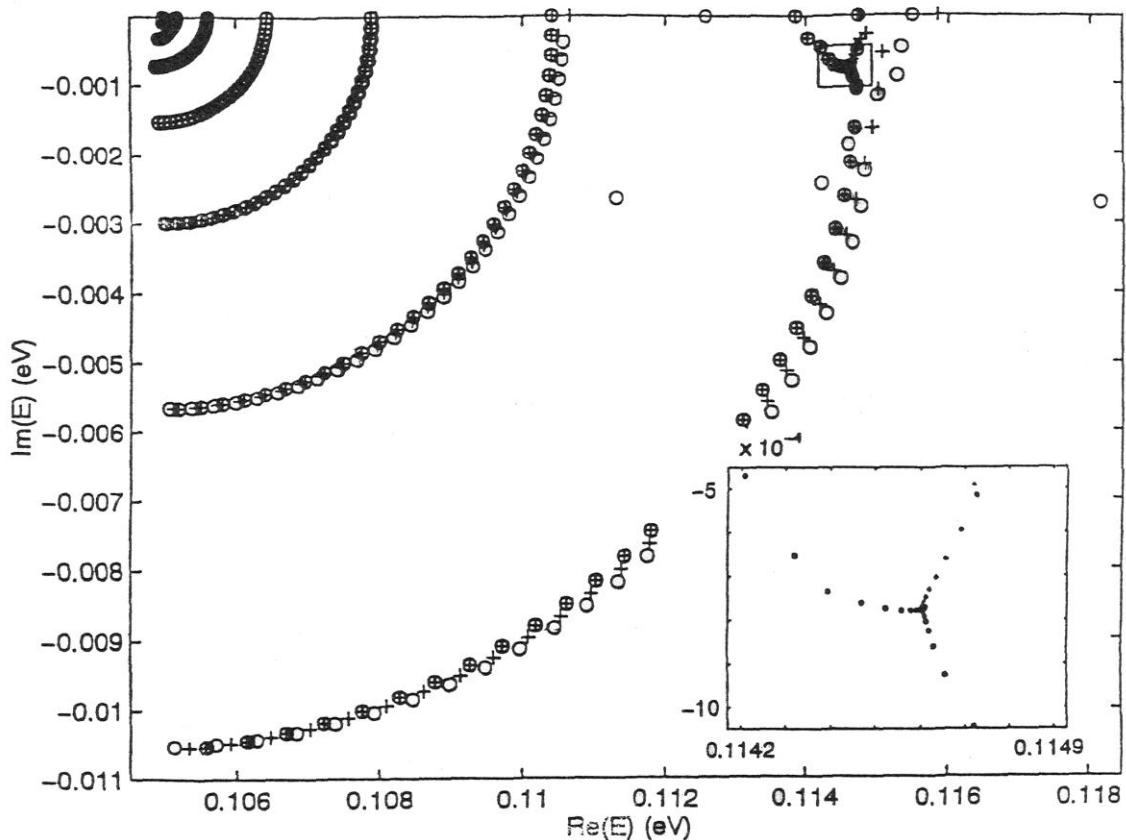
$S_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle$. Ponieważ macierz $\mathbf{H}(\theta)$ nie jest hermitowska, otrzymujemy zespolone rozwiązania $E(\theta)$.

- 5) Część z nich powinna zależeć od θ w sposób właściwy dla energii stanów niezwiązanych. Tylko wybrane zespolone wartości własne, te odpowiadające stanom rezonansowym powinny być niezależne od θ . Powtarzamy rozwiązywanie równania z punktu 4) dla różnych wartości θ , żeby znaleźć optymalne energie rezonansowe z warunku

$\left. \frac{dE(\theta)}{d\theta} \right|_{\theta_{opt}} = 0$. Oznacza to, że spośród wszystkich wartości własnych otrzymywanych w punkcie 4) wybieramy tę, która jest stabilna przy zmianie θ .

- 6) Interpretujemy część rzeczywistą takiej wartości własnej jako położenie energetyczne rezonansu, a część urojoną jako połowę jego szerokości energetycznej.

Przykładowe wyniki otrzymane metodą obrotu zespolonego przedstawia Rys. MB.14. Wszystkie wartości własne o części rzeczywistej w badanym zakresie energii umieszczono na płaszczyźnie zespolonej. Wyniki odpowiadają trzem nieco różnym bazom i trzydziestu wartościom θ zmieniającym się w równych odstępach od 0 do $\frac{\pi}{4}$. Ujawniają się wyraźnie dwa typy θ -trajektorii (torów po których „porusza” się wybrana wartość własna ze zmianą kąta obrotu). Trajektorie w postaci charakterystycznych łuków odpowiadają widmu ciągłemu obracającemu się regularnie w miarę wzrostu kąta obrotu współrzędnych. Wyraźnie od nich różnią się trzy θ -trajektorie (po jednej dla każdej bazy) wykazujące znacznie wolniejszą zależność od θ . Te trzy θ -trajektorie, choć startują dla $\theta = 0$ w różnych punktach na osi rzeczywistej, zbiegają się we wspólnym punkcie, w którym stabilizuje się wartość własna (najwolniej zależy od kąta obrotu). Ten punkt należy uznać za optymalną wartość zespolonej energii rezonansu.



Rys. MB.14 θ -trajektorie otrzymane dla nanostruktury w postaci symetrycznego układu warstw półprzewodnikowych, dwóch barier i studni [M. Bylicki, R. Oszałdowski, W. Jaskólski, J. Phys.: Condensed Matter 8 (1996) 6393]. Obszar zbieżności trajektorii rezonansowych, zaznaczony prostokątem na głównym rysunku, jest powiększony we wstawce.