02;09

Интерференция при туннельной ионизации электрона, связанного двумя короткодействующими потенциалами

© *П.А. Головинский*[1,2], *А.А. Дробышев*[1]

[1] Воронежский государственный архитектурно-строительный университет, Воронеж
[2] Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный
E-mail: golovinski@bk.ru

Поступило в Редакцию 3 августа 2016 г.

Рассмотрена туннельная ионизация электрона, связанного двумя дельта-потенциалами, под действием постоянного электрического поля. Получены распределения плотности электронного тока для двух разных начальных состояний. Исследована зависимость эмиссионного тока от ориентации потенциалов относительно направления поля и расстояния между ними. Определены условия проявления интерференционных эффектов.

DOI: 10.21883/PJTF.2017.04.44304.16452

Метод потенциалов нулевого радиуса широко используется в атомной и ядерной физике, а также в физике конденсированных сред [1–3]. Важными приложениями метода стали описание нелинейной ионизации, генерации высоких гармоник в сильных лазерных полях [4–7] и простая модель туннельного эффекта в атомной микроскопии [8]. Известно аналитическое решение задачи о поляризации и туннельном отрыве электрона из короткодействующего потенциала атомарного отрицательного иона. Изучено также фоторазрушение отрицательных ионов в присутствии постоянного электрического поля разной конфигурации [9,10]. Используемый при этом единичный дельта-потенциал не описывает возможность делокализации электрона между несколькими областями притяжения, что на самом деле характерно для молекулярных и твердотельных систем.

Для задачи туннельной ионизации нейтральных молекул получило развитие обобщение метода сшивания асимптотик волновых функций в параболических координатах на случай сферически несимметричных состояний [11–13]. Однако и здесь теория пока ограничивается рассмотрением локализованных состояний отдельных молекулярных орбиталей. Представление о локализованных состояниях, не учитывающее их возможную интерференцию, лежит в основе описания туннельных эффектов в наноструктурах [14,15]. В то же время теоретически показано, что делокализация существенно влияет на рассеяние аттосекундных лазерных импульсов двухатомными молекулярными анионами [16]. Выяснение возможной роли делокализации в формировании электронного тока при туннельной ионизации требует специального рассмотрения.

Задача о движении частицы в поле нескольких короткодействующих потенциалов без внешнего поля допускает проведение полного аналитического исследования [17]. При относительной близости потенциальных ям волновые функции в них перекрываются, и образуется общее протяженное состояние. Кроме того, такие системы обладают специфическим откликом на внешнее поле [18]. Нами рассмотрена картина интерференции электронных волн, образующихся при туннельном отрыве электрона из двухъямного потенциала, при разной ориентации поля и потенциала.

Задачу о движении частицы в поле нескольких дельта-потенциалов можно сформулировать на языке граничных условий, накладываемых на волновую функцию в точках расположения потенциалов. Для одиночного s-состояния с $l = 0$ волновая функция $\psi \sim r^{-1}\exp(-\alpha r)$, и граничное условие принимает вид [2]

$$\left.\frac{d\ln(r\psi)}{dr}\right|_{r=0} = -\alpha, \tag{1}$$

где $\alpha = \sqrt{-2E_0}$, E_0 — энергия связи. Мы пользуемся атомной системой единиц, в которой $|e| = m = \hbar = 1$.

Для нескольких потенциалов их действие задается суммой одиночных потенциалов. Состояние частицы в поле двух одинаковых центров притяжения и внешнем электрическом поле с напряженностью F описывается стационарным уравнением Шредингера

$$\left(\varepsilon + \frac{1}{2}\nabla^2 + Fz\right)\psi(\mathbf{r}) = \big(V_1(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)\big)\psi(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где каждый потенциал [1,3]

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{\alpha}\,\delta(\mathbf{r})\,\frac{\partial}{\partial r}\,r.$$

Решение, как и в задаче без поля [19], ищется в виде суперпозиции функций Грина

$$\psi(\mathbf{r}) = AG(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \varepsilon) + BG(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \varepsilon),$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j, \varepsilon)$ — функции Грина с асимптотикой уходящей волны, удовлетворяющие уравнению (2) с заменой правой части на $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$, $\mathbf{r}_1$ — радиус-вектор первого центра, $\mathbf{r}_2$ — радиус-вектор второго центра (рис. $1, a$). Функция Грина частицы, движущейся под действием постоянной силы, выражается через функции Эйри $\mathrm{Ai}(u)$ и $\mathrm{Bi}(u)$ [8]:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \varepsilon) = \frac{1}{2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \big(\mathrm{Ci}(\chi_+)\mathrm{Ai}'(\chi_-) - \mathrm{Ci}'(\chi_+)\mathrm{Ai}(\chi_-)\big),$$

$$\chi_\pm = -(2F)^{-2/3}(2\varepsilon + \mathbf{F}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \pm F|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

Функция $\mathrm{Ci}(u) = \mathrm{Bi}(u) + i\mathrm{Ai}(u)$ имеет асимптотику уходящей волны при $u \to \infty$.

Учитывая граничные условия вида (1), получим систему уравнений для комплексной квазиэнергии $\varepsilon = \mathrm{Re}\varepsilon - i\Gamma/2$ и коэффициентов A и B:

$$\frac{1}{\rho_j \psi} \frac{\partial}{\partial \rho_j} (\rho_j \psi)_{\rho_j = 0} = -\alpha,$$

где $\boldsymbol{\rho_j} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$, $j = 1, 2$. Эту систему можно записать в виде [20]

$$\begin{pmatrix} b_+ & G(-\mathbf{R}/2, \mathbf{R}/2, \varepsilon) \\ G(\mathbf{R}/2, -\mathbf{R}/2, \varepsilon) & b_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0, \tag{3}$$

$$b_\pm = \frac{\pi}{(2F)^{1/3}} \big(\mathrm{Ai}'(\xi_\pm)\mathrm{Ci}'(\xi_\pm) - \xi_\pm \mathrm{Ai}(\xi_\pm)\mathrm{Ci}(\xi_\pm)\big) + \alpha,$$

$$\xi_\pm = -\frac{2\varepsilon \pm FR\cos\theta}{(2F)^{2/3}},$$

где $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R}/2$, $\mathbf{r}_2 = -\mathbf{R}/2$, $R = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$. Система уравнений (3) имеет два решения, определяющих две волновые функции и два значения энергии $\varepsilon_\pm$ соответствующих состояний с их ширинами, которые находятся из условия равенства детерминанта нулю.

Из системы уравнений (3) следует также связь коэффициентов A и B:

$$\frac{A}{B} = -\frac{2\pi G(-\mathbf{R}/2, \mathbf{R}/2, \varepsilon) + b_\pm}{2\pi G(\mathbf{R}/2, -\mathbf{R}/2, \varepsilon) + b_\mp}\Big|_{\varepsilon = \varepsilon_\pm}.$$

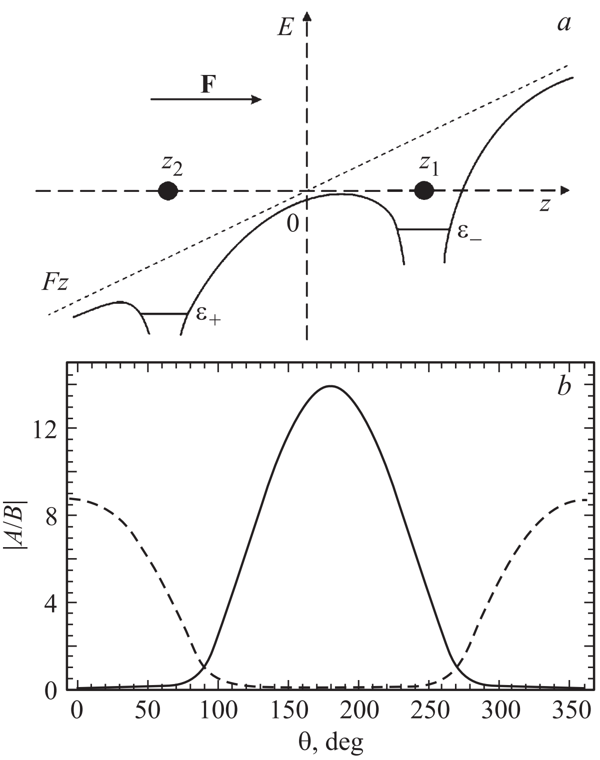

Рис. 1. Взаимное расположение центров (a) и зависимость отношения коэффициентов $|A/B|$ от угла θ (b). Сплошная линия — основное состояние, пунктир — возбужденное.

Для слабого электрического поля $(F/\alpha^3 \ll 1)$ сдвиги уровней и ширины вычислены ранее [18] и зависят от угла θ между линией, соединяющей центры, и направлением электрического поля.

Наблюдаемой величиной в процессе туннельной ионизации является плотность электронного тока, пересекающего плоскость, перпендикулярную оси z, задаваемой направлением электрического поля:

$$j_z = \mathrm{Im}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z}\right).$$

Пространственное распределение электронного тока зависит от угла θ между осью, соединяющей центры, и направлением электрического поля, параметра $\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, характеризующего расстояние между центрами в сравнении с затуханием невозмущенной волновой функции, локализованной на отдельном центре, а также от параметра F/α^3, задающего величину силы действия электрического поля по отношению к характерной силе, удерживающей частицу в потенциальной яме.

На рис. 1, b показан результат расчета отношения коэффициентов $|A/B|$ в зависимости от угла θ между $\mathbf{R}$ и $\mathbf{F}$ для значений параметров $E_0 = 1\,\mathrm{eV}$, $F = 10^7\,\mathrm{V/cm}$, $R = 10\,\mathrm{a.u.}$ Из представленных на рисунке зависимостей видно, что при $\theta = \pi/2$ отношение коэффициентов в основном и возбужденном состояниях $|A/B| = 1$, что соответствует ситуации осевой симметрии. При ориентации системы параллельно полю $(\theta = 0)$ в основном состоянии $|A/B| = 0.07$, т.е. электрон фактически локализован на втором центре. В возбужденном состоянии, при $\theta = 0$, отношение коэффициентов $|A/B| = 9$, что соответствует локализации электрона на первом центре.

Имеются два предельных случая ориентации двухъямного потенциала относительно поля: параллельно полю и перпендикулярно полю. При параллельной ориентации $(\theta = 0)$ отношение коэффициентов A/B зависит от напряженности поля и расстояния между ямами. В этом случае внешнее поле вызывает делокализацию исходных состояний. Вычисления показывают, что увеличение расстояния и напряженности поля приводит к уменьшению смешения состояний, и электрон локализуется на одном из центров. В основном состоянии электрон локализуется на втором центре и туннелирует практически без взаимодействия с первым центром, а распределение туннельного тока аналогично току от одного точечного источника (рис. 2, a). В возбужденном состоянии электрон локализуется на первом центре и после туннелирования может рассеиваться на втором центре [20].

При ориентации двухъямного потенциала перпендикулярно полю $(\theta = \pi/2)$ отношение коэффициентов $|A/B| = 1$. Это означает, что волновая функция электрона является суперпозицией волновых функций в каждом из дельта-потенциалов, и электрон одинаково локализован на обоих центрах. В этом случае при ионизации электрона центры ведут себя как точечные когерентные источники (рис. 2, b). Внешнее поле в такой геометрии не вызывает делокализации исходных состояний.

На рис. 3 показан результат расчета поперечного распределения электронного тока при двух разных расстояниях между потенциалами.

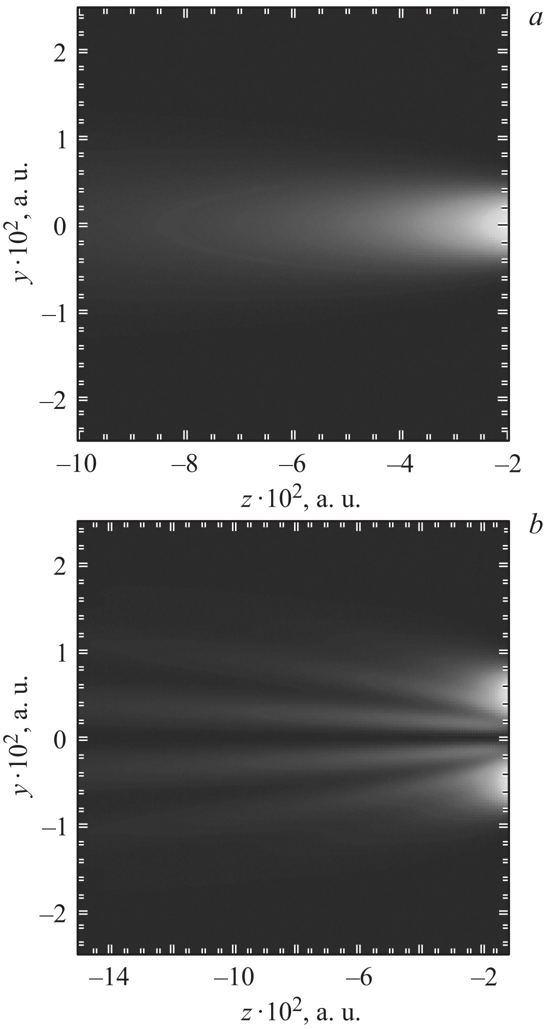

Рис. 2. Распределение электронного тока из основного состояния при значении угла $\theta = 0$ (a) и $\theta = \pi/2$ (b). Напряженность поля $F = 10^7$ V/cm, $E_0 = 1$ eV, $R = 100$ a.u.

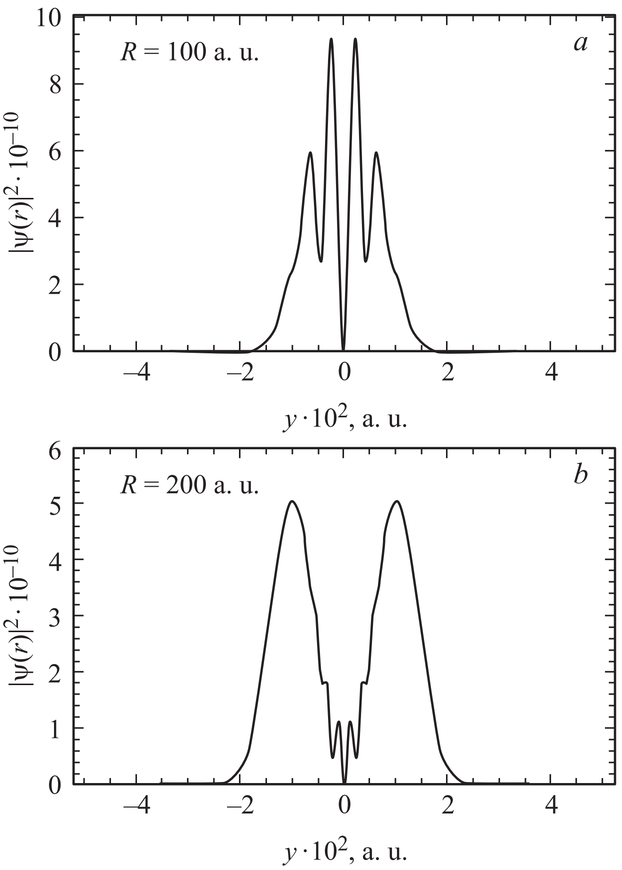

Рис. 3. Распределение электронного тока из основного состояния при разных значениях расстояния между потенциалами. Угол θ равен $\pi/2$. Расстояние до экрана составляет 500 a.u., $E_0 = 1$ eV, $F = 10^7$ V/cm.

Сравнения представленных зависимостей демонстрирует, что при увеличении расстояния между центрами картина приближается к распределению тока от двух одинаковых независимых точечных источников.

Рассмотренное в работе явление интерференции электронных волн, образующихся при туннельной ионизации электрона из двухъямного потенциала, существенно зависит от взаимной ориентации поля и потенциала, влияющей на степень локализации электрона возле разных центров. При ориентации двухъямной системы перпендикулярно полю распределение электронного тока эквивалентно распределению тока от двух одинаковых точечных когерентных источников. С ростом расстояния между центрами распределение приближается к картине, характерной для двух независимых источников. При наклонной ориентации потенциала, отличной от расположения перпендикулярно полю, делокализация исходных состояний увеличивается с ростом напряженности поля и расстояния между центрами.

Наблюдение описанных эффектов интерференции возможно в двухатомных молекулярных анионах [16]. Однако в таких экспериментах требуется решить дополнительные вопросы, связанные с выстраиванием оси молекулярного иона в заданном направлении и учетом или фиксацией его пространственного положения. В то же время современные технологии позволяют создавать наноэмиттеры из набора острых наноиголок [21,22], а также в виде нанопирамиды с вершиной из одного атома [23]. Близкое расположение таких наноразмерных источников будет обусловливать интерференционные проявления в токе эмиссии [24,25]. Это позволяет экспериментально проверить особенности пространственного распределения тока, предсказываемые предложенной моделью. Проведенные расчеты указывают также в целом на важность учета типа связи в молекулах при интерпретации результатов наблюдения туннельной ионизации электронов и необходимость проведения дополнительных исследований в этом направлении.

Работа выполнена в рамках ГЗ Министерства образования и науки РФ № 2014/19-2881.

Список литературы

[1] *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: ЛГУ, 1975. 240 с.

[2] *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.

[3] *Киржниц Д.А.* Полевые методы теории многих частиц. М.: Либроком, 2010. 344 с.

[4] *Frolov M.V., Manakov N.L., Starace A.F.* // Phys. Rev. A. 2008. V. 78 (6). P. 063418 (1–27).

[5] *Frolov M.V., Flegel A.V., Manakov N.L., Starace A.F.* // Phys. Rev. A. 2007. V. 75 (6). P. 063407 (1–14).
[6] *Borzunov S.V., Frolov M.V., Ivanov M.Y.* et al. // Phys. Rev. A. 2013. V. 88 (3). P. 033410 (1–18).
[7] *Frolov M.V., Knyazeva D.V., Manakov N.L.* et al. // Phys. Rev. A. 2014. V. 89 (6). P. 063419 (1–18).
[8] *Donner B., Kleber M., Bracher C., Kreuzer H.J.* // Am. J. Phys. 2005. V. 73 (8). P. 690–700.
[9] *Головинский П.А.* // ЖЭТФ. 1997. Т. 112. В. 5. С. 1574–1583.
[10] *Golovinski P.A., Drobyshev A.A.* // Proc. SPIE. 2010. V. 7993. P. 799311 (1–9).
[11] *Batishev P.A., Tolstikhin O.I., Morishita T.* // Phys. Rev. A. 2010. V. 82. P. 023416 (1–14).
[12] *Jiang W.-Ch., Tolstikhin O.I., Peng L.Y., Gong Q.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 023404 (1–15).
[13] *Tolstikhin O.I., Morishita T., Madsen L.B.* // Phys. Rev. A. 2011. V. 84. P. 053423 (1–17).
[14] *Головинский П.А., Дробышев А.А.* // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. В. 6. С. 984–990.
[15] *Golovinski P.A., Drobyshev A.A.* // JEMAA. 2014. V. 6. P. 8–14.
[16] *Есеев М.К., Матвеев В.И., Юлкова В.М.* // ЖТФ. 2012. Т. 82. В. 11. С. 130–132.
[17] *Demkov Yu.N., Subramanian P.* // Sov. Phys. JETP. 1970. V. 30. N 2. P. 381–383.
[18] *Dalidchik F.I., Slonim V.Z.* // Sov. Phys. JETP. 1976. V. 43. N 1. P. 25–31.
[19] *Smirnov B.M., Firsov O.B.* // Sov. Phys. JETP. 1965. V. 20. N 1. P. 156–160.
[20] *Борзунов С.В., Манаков Н.Л., Старас А.Ф., Фролов М.В.* // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. В. 5. С. 835–855.
[21] *Choi C.-H., Kim C.-J.* // Nanotechnology. 2006. V. 17 (21). P. 5326–5333.
[22] *Verma1 P., Gautam S., Pal S.* et al. // Defence Sci. J. 2008. V. 58 (5). P. 650–654.
[23] *Chang C.-C., Kuo H.-S., Hwang I.-S., Tsong T.T.* // Nanotechnology. 2009. V. 20 (11). P. 115401 (6 p.).
[24] *Straton J.C., Bilyeu T.T., Moon B., Moeck P.* // Cryst. Res. Technol. 2014. V. 49 (9). P. 663–680.
[25] *Mándi G., Palotás K.* // Phys. Rev. B. 2015. V. 91 (16). P. 165406 (1–12).