

ВРЕМЕНА ПРОХОЖДЕНИЯ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ ЧЕРЕЗ ТУННЕЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ

Ю. Е. Лозовик*, А. В. Филинов†

*Институт спектроскопии Российской академии наук
142092, Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 6 ноября 1998 г.

С помощью метода квантового обобщения молекулярной динамики детально изучаются закономерности прохождения волновых пакетов через туннельные барьеры. Вычислена функция распределения времен, описывающих появление туннелирующего пакета перед и за барьером, а также его функция распределения по импульсам. Исследовано поведение средней координаты пакета, среднего импульса и их дисперсий. Обнаружено, что под барьером часть пакета испытывает отражение, гауссовый барьер увеличивает средний импульс прошедшего пакета и его дисперсию в импульсном пространстве.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в связи с развитием нанoeлектроники важную роль приобретает изучение туннелирования в наноструктурах. В ряде случаев, например при изучении воздействия фемтосекундных световых импульсов на связанные ямы, возникает задача о туннелировании волновых пакетов через потенциальный барьер. Эта задача важна и при возможном использовании сканирующего туннельного микроскопа, облучаемого фемтосекундными импульсами, для изучения наноструктур с одновременно высоким пространственным и временным разрешениями [1]. Интересен также вопрос о времени туннелирования при ионизации атома водорода сверхкороткими лазерными импульсами, а также туннелирования, вызванного воздействием лазерного импульса на низколежащие энергетические уровни ядра. В настоящей работе исследуется не менее интересный вопрос о продолжительности туннелирования в наноструктурах. В этом случае время туннелирования представляет практический интерес, так как позволяет оценивать быстродействие полупроводниковых элементов. В этой связи задача, которую мы рассматриваем, такова: допустим, с помощью лазерного импульса был создан волновой пакет возбужденного электрона недалеко от туннельного барьера; спрашивается, через какое время протуннелировавшая часть пакета появится за барьером. Появление волнового пакета можно было бы зарегистрировать путем изучения локальных изменений оптических свойств, используя пробные ультракороткие импульсы.

Интересно, что при прохождении пакета через туннельный барьер обнаруживается ряд эффектов, которые отсутствуют в стационарном случае. Время туннелирования пакета в общем случае определяется не обратной вероятностью стационарного туннелирования, а связано с довольно сложными процессами: изменением формы и поведени-

*E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

†E-mail: alex@vovan.msk.ru

ем пакета внутри барьера. Более того, время прохождения через барьер неоднозначно зависит от измеряемых величин, т. е. от типа эксперимента.

Исследование вопроса о времени пребывания туннелирующей частицы под барьером началось довольно давно [2–4] и в настоящее время предложено много как теоретических, так и экспериментальных способов измерения времени туннелирования. Существуют, например, подходы, где в качестве наблюдаемой величины выбирается пик пакета или средняя координата («центроид»), а время отражения или прохождения определяется их эволюцией. Однако, как было показано в [5, 6] и последующих работах, падающий на потенциальный барьер пик волнового пакета не переходит в пик прошедшей волны. В работе [7] был рассмотрен случай, в котором из-за дисперсии волнового пакета в импульсном пространстве высокоэнергетические компоненты достигали барьера раньше остальных. Так как вероятность туннелирования растет с увеличением энергии, эти компоненты давали главный вклад в прошедшую через барьер часть пакета. Начальные параметры можно было выбрать таким образом, чтобы прошедшая часть пакета покинула барьер задолго до того, как появится основной пик, выбранный в качестве наблюдаемой величины. Этот пример демонстрирует нарушение принципа причинности, который положен в основу данного метода, и, следовательно, ограничивает область его применимости. Кроме того, трудно придумать экспериментальный способ измерения времени появления пакета по его пику или «центроиду».

Существует также класс подходов, определяющих время туннелирования с помощью ансамбля динамических траекторий. Эти динамические траектории возникают как необходимый аппарат описания в фейнмановской и бомовской интерпретациях квантовой механики. В случае использования фейнмановских траекторий [8] время прохождения через барьер определялось как функциональный интеграл по всем возможным траекториям, которые стартуют из заданной точки слева от барьера, а в некоторый момент времени приходят в точку, расположенную справа от барьера. В качестве интегрируемой функции в функциональном интеграле присутствовало произведение классического времени пребывания траектории внутри барьера на весовой множитель $\exp[iS(x(t'))/\hbar]$, где $S(x(t'))$ — действие, связанное с рассматриваемой траекторией $x(t')$. Из-за умножения на комплексный вес вычисляемые времена имели действительную и мнимую части, и возникал вопрос о том, как соотносить эти времена с физически наблюдаемыми величинами, которые всегда являются действительными. Для объяснения комплексных времен, которые возникают и в других методах (например, в методе «физических часов» (см. ниже)), Соколовский и Коннор [9] рассмотрели так называемые прямые и косвенные измерения. При проведении косвенного измерения, которым и является рассматриваемый метод, величины могут оказаться комплексными.

Довольно широкое распространение получили подходы, использующие физические часы. Физические часы — это различные дополнительные степени свободы в системе, позволяющие определить продолжительность нахождения частицы в заданной области. В теоретических работах подробно исследовались три вида часов. В своих работах Базь и Рыбаченко [10, 11] в качестве часов использовали прецессию спина в слабом однородном магнитном поле, существующем внутри барьера. Сначала рассматривалась прецессия спина в одной плоскости, а затем Бюттикер и Ландауэр [12] обобщили рассмотрение на трехмерный случай. За время туннелирования спин приобретает компоненту вдоль направления движения и вдоль магнитного поля. Понятно, что интенсивности регистрируемых компонент с поляризацией спина вдоль этих двух направлений будут пропорциональны времени пребывания частицы в области с магнитным полем, т. е. в обла-

сти барьера. Как оказалось, для прямоугольного барьера определенные таким способом времена туннелирования совпадают с действительной и мнимой частями комплексного времени туннелирования, введенного через фейнмановские интегралы по траекториям [8]. Обобщение описанного метода для произвольного потенциального барьера было сделано в работе [13]. Бюттикер и Ландауер [14] в качестве физических часов рассмотрели осциллирующий барьер, у которого амплитуда осцилляций временной компоненты была много меньше высоты барьера. На низких частотах частицы видят эффективный статический барьер, так как время пролета через барьер оказывается намного меньше периода колебаний временной компоненты барьера. При увеличении частоты запаздывающие частицы или компоненты волнового пакета видят слегка модифицированный потенциальный барьер. Наконец, при некоторых частотах на туннелирующие частицы начинает оказывать влияние один или несколько периодов колебаний. Частота, на которой появится существенное отличие от адиабатического случая, соответствующего стационарному барьеру, будет определять обратное время взаимодействия с барьером или время его прохождения. Мартин и Ландауер [15] в качестве физических часов выбрали осциллирующую амплитуду падающей волны. Для этого слева от барьера выбиралась волновая функция, представляющая собой суперпозицию двух плоских волн с разной энергией. Понятно, что в этом случае волновая функция справа от барьера будет тоже суперпозицией протуннелировавших частей плоских волн, которые, однако, имеют разную амплитуду прохождения через барьер, так как она зависит от энергии. Прошедшая волновая функция будет воспроизводить падающую, если амплитуды протуннелировавших плоских волн мало отличаются, что соответствует адиабатическому случаю. Разница энергий исходных плоских волн, при которой волновая функция за барьером не воспроизводит падающую, позволяет определить время прохождения потенциального барьера. Основное достоинство этого метода в том, что он применим ко всем видам потенциалов, однако он использует два значения энергии, и поэтому не понятно, какой энергии приписывать полученное время туннелирования.

Все ли часы дают один и тот же результат измерения? Конечно, нет. Однако в ряде случаев эти результаты близки друг к другу или совпадают [13, 16–18]. Главное достоинство подходов с физическими часами заключается в том, что они пытаются определить время туннелирования через возможные измерения в физических экспериментах.

Не менее популярным подходом является поиск «операторов времени» и изучение их свойств [19–24]. Основная трудность, как было отмечено еще Паули [25], состоит в том, что не существует эрмитова оператора времени, измерение которого было бы возможно при том, что гамильтониан системы имеет ограниченный спектр. Были предприняты разные попытки построения операторов, которые описывали бы необходимые свойства физического времени. Для того чтобы построенный оператор удовлетворял принципу соответствия, за основу для операторного построения выбирались соотношения из классической механики. Однако, как известно, построение операторного выражения, соответствующего классической величине, неоднозначно, а его связь с процессом измерения требует дополнительного анализа.

В настоящей работе время туннелирования определялось как разница средних времен «появления» и «присутствия» волнового пакета (см. разд. 3) до и после барьера. Для расчета этих времен и исследования динамики туннелирующего волнового пакета использовался метод квантового обобщения молекулярной динамики [26–28].

Как известно, молекулярная динамика исследует свойства классических систем в фазовом пространстве, поэтому обобщать этот метод для квантовых систем тоже есте-

ственно в фазовом пространстве. Эволюция системы в фазовом пространстве описывается, например, в рамках вигнеровского формализма квантовой механики уравнением Вигнера—Лиувилля. Для решения уравнения Вигнера—Лиувилля, записанного в интегральной форме, его удобно представить в виде итерационного ряда. Каждый член этого ряда можно рассматривать как весовой вклад траектории, состоящей из отрезков классических траекторий, разделенных конечными возмущениями импульса. Далее подобную траекторию мы будем называть квантовой. Статистический ансамбль квантовых траекторий позволяет вычислять сумму всех членов ряда. Для учета только траекторий, которые дают главный вклад, используется метод Монте-Карло. В классическом пределе квантовые траектории переходят в классические, а метод обобщенной молекулярной динамики совпадает с обычной молекулярной динамикой. В разд. 2 излагаются основы метода. В разд. 3 в рамках вигнеровского формализма квантовой механики приводятся выражения для вычисления распределений времен появления и присутствия волнового пакета. В разд. 4 обсуждаются результаты моделирования. В работе рассмотрен одномерный случай, однако используемый метод позволяет проводить аналогичные вычисления для многомерных и многочастичных систем, где он имеет серьезные преимущества по сравнению, например, с решением нестационарного уравнения Шредингера с точки зрения вычислительных затрат.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Для вычисления квантовомеханического среднего величины A для нестационарного состояния $|\psi\rangle$ в вигнеровской формулировке квантовой механики необходимо вычислить интеграл в фазовом пространстве [29]:

$$A(t) = \langle \psi | \hat{A}(t) | \psi \rangle = \iint dqdp A(q, p) W(q, p, t), \quad (1)$$

где, по определению, вводятся символ Вейля $A(q, p)$ оператора \hat{A} и вигнеровская функция распределения $W(q, p, t)$, представляющая фурье-образ недиагонального элемента матрицы плотности:

$$A(q, p) = \int d\xi \exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right) \left\langle q + \frac{\xi}{2} \left| \hat{A} \right| q - \frac{\xi}{2} \right\rangle, \quad (2)$$

$$W(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\xi \exp\left(-\frac{ip\xi}{\hbar}\right) \psi^*\left(q - \frac{\xi}{2}, t\right) \psi\left(q + \frac{\xi}{2}, t\right). \quad (3)$$

Дифференцируя по времени функцию распределения, подставляя ее в правую часть уравнения Шредингера вместо производной по времени от функции ψ и интегрируя по частям, можно получить интегродифференциальное уравнение Вигнера—Лиувилля [30]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} + F(q) \frac{\partial W}{\partial p} = \int_{-\infty}^{\infty} ds W(p-s, q, t) \omega(s, q). \quad (4)$$

В этом уравнении величина

$$\omega(s, q) = \frac{2}{\pi\hbar^2} \int dq' V(q-q') \sin\left(\frac{2sq'}{\hbar}\right) + F(q) \frac{d\delta(s)}{ds} \quad (5)$$

учитывает нелокальный вклад потенциала, а $F(q) = -\partial V(q) / \partial q$ — классическая сила. В классическом пределе, когда $\hbar \rightarrow 0$, уравнение (4) переходит в классическое уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial q} = -F(q) \frac{\partial W}{\partial p}. \tag{6}$$

Уравнение (4) можно представить в интегральной форме. Для этого вводятся динамические траектории $\{\bar{q}_\tau(\tau; p, q, t), \bar{p}_\tau(\tau; p, q, t)\}$ и $\tau \in [0, t]$, стартующие из точки (p, q) в момент времени $\tau = t$:

$$\begin{aligned} d\bar{p}/d\tau &= F(\bar{p}(\tau)), & \bar{p}_t(t; p, q, t) &= p, \\ d\bar{q}/d\tau &= \bar{q}(\tau)/m, & \bar{q}_t(t; p, q, t) &= q. \end{aligned} \tag{7}$$

Интегральное уравнение получается после подстановки правой части этих уравнений в уравнение Вигнера—Лиувилля, его левая часть принимает вид полного дифференциала, и после интегрирования по времени имеем

$$W(p, q, t) = W^0(\bar{p}_0, \bar{q}_0) + \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} ds W(\bar{p}_\tau - s, \bar{q}_\tau, \tau) \omega(s, \bar{q}_\tau). \tag{8}$$

Здесь $W^0(\bar{p}_0, \bar{q}_0) = W(p, q, 0)$ — это вигнеровская функция распределения нулевого момента времени. Решение уравнения (8) можно представить в виде итерационного ряда. Для этого введем обозначение для функции распределения \tilde{W}^{τ_1} , которая классически эволюционирует в интервале $[0, \tau_1]$, и интегральный оператор $K_{\tau_i}^{\tau_{i+1}}$, описывающий эволюцию между временами τ_i и τ_{i+1} . Теперь уравнение (8) можно представить в виде

$$W^t = \tilde{W}^t + K_\tau^t W^\tau, \tag{9}$$

где $\tilde{W}^t = W^0(\bar{p}_0, \bar{q}_0)$. Соответствующий итерационный ряд, который является решением этого уравнения, можно записать как

$$W^t = \tilde{W}^t + K_{\tau_1}^t \tilde{W}^{\tau_1} + K_{\tau_2}^t K_{\tau_1}^{\tau_2} \tilde{W}^{\tau_1} + K_{\tau_3}^t K_{\tau_2}^{\tau_3} K_{\tau_1}^{\tau_2} \tilde{W}^{\tau_1} + \dots \tag{10}$$

Теперь для вычисления квантовомеханического среднего (1) необходимо вычислить линейный функционал от вигнеровской функции распределения

$$\begin{aligned} A(t) &= \iint dq dp A(q, p) W(q, p, t) \\ &= (A | \tilde{W}^t) + (A | K_{\tau_1}^t \tilde{W}^{\tau_1}) + (A | K_{\tau_2}^t K_{\tau_1}^{\tau_2} \tilde{W}^{\tau_1}) + (A | K_{\tau_3}^t K_{\tau_2}^{\tau_3} K_{\tau_1}^{\tau_2} \tilde{W}^{\tau_1}) + \dots \end{aligned} \tag{11}$$

Здесь скобки $(\dots | \dots)$ для функций $A = A(p, q)$ и \tilde{W}^t или $K_{\tau_1}^t K_{\tau_2}^{\tau_3} \dots K_{\tau_1}^{\tau_2} \tilde{W}^{\tau_1}$ означают интегрирование по всему фазовому пространству $\{p, q\}$.

Первый член в правой части уравнения (10) задает классически эволюционирующее начальное распределение $W^0(\bar{p}_0, \bar{q}_0)$, т. е. эволюцию функции распределения без квантовых поправок. Однако даже этот первый член итерационного ряда описывает не

классические, а квантовые эффекты и может содержать произвольные степени постоянной Планка, так как в качестве начальных данных уравнения (10) берется квантовое начальное состояние системы. Остальные члены итерационного ряда описывают квантовые поправки к эволюции. Каждый член итерационного ряда (10) является многократным интегралом. Этот многократный интеграл можно заменить интегральной суммой, а каждый член интегральной суммы можно представить в виде вклада траекторий определенного топологического типа. Эти траектории состоят из отрезков классических траекторий — решений уравнений (7), разделенных друг от друга случайными возмущениями импульса.

В соответствии с теорией методов Монте-Карло для решения линейных интегральных уравнений можно вычислять все члены итерационного ряда. Для этого разрабатывается схема Монте-Карло, обеспечивающая существенную выборку тех членов итерационного ряда, которые давали бы главный вклад в ряд (10). Эта существенная выборка также уменьшает вычислительные затраты, необходимые для вычисления отдельных интегралов, входящих в каждый член итерационного ряда. Рассмотрим второй член ряда (10), который можно тождественно переписать в виде

$$\begin{aligned}
 K_{\tau_1}^t \bar{W}^{\tau_1} &= \int_0^1 d\tau_1 \int ds_1 \omega(s_1, \bar{q}_1) W^0(\bar{p}_0^{-1}, \bar{q}_0^1) = \\
 &= \int_0^1 d\tau_1 [B(\bar{q}_2)(1 + Q(\bar{q}_2))] \theta(1 - \tau_2) r(\tau_2) \int ds_1 P(s_1, \bar{q}_1^2) C(\bar{q}_1^2) r(\tau_1) \times \\
 &\times \left\{ \sigma(s_1, \bar{q}_1^2) t \bar{Q}(\bar{q}_1^2) \theta(\tau_2 - \tau_1) / C(\bar{q}_1^2) r(\tau_1) \right\} W^0(\bar{p}_0^{-1}, \bar{q}_0^1), \quad (12)
 \end{aligned}$$

где для всех членов итерационного ряда (10) сделана замена переменных $\tau \rightarrow \tau t$ ($\tau \in [0, 1]$). Величина $r(\tau_1)$ — это вероятность выбора случайного момента времени τ_1 , а θ — тета-функция.

Записав второй член ряда (10) в виде (12), ему можно придать следующий вероятностный смысл. Воспользуемся обратимостью во времени уравнений классической динамики (7) и начнем построение траектории с момента времени $\tau = 0$. В момент времени τ_1 для траектории, представляющей произвольный член итерационного ряда, с вероятностью $C(\bar{q}_1^2)$ может произойти возмущение импульса траектории на величину s_1 , а вероятность отвергнуть возмущение импульса равна $B(\bar{q}_2)$ ($C(\bar{q}_1^2) + B(\bar{q}_2) = 1$). Вероятность B для запрещения скачков импульса была введена с целью сделать более гибким алгоритм, в котором в зависимости от степени квантовости системы обеспечивался бы автоматический переход от квантовых траекторий к классическим.

Так как мы рассматриваем траекторию, представляющую второй член итерационного ряда, то возмущение импульса в момент времени τ_1 было принято. Поэтому теперь необходимо выбрать на интервале времени $[\tau_1, 1]$ случайное значение τ_2 , которое представляет собой время следующей попытки возмущения импульса. После возмущения импульса на величину s мы должны продолжить генерацию траекторий в соответствии с уравнениями Гамильтона до момента времени τ_2 . В этот момент времени попытка возмущения импульса для второго члена итерационного ряда должна быть отвергнута, и мы продолжаем генерацию траектории до момента $\tau = 1$. Отвергнутую попытку возмущения импульса необходимо учесть, умножив весовую функцию траектории на компенсирующий множитель, который стоит в фигурных скобках в правой части

выражения (12). Произведение символа Вейля рассматриваемого оператора и весовой функции в различных точках на траектории дает временную зависимость вычисляемых величин. Усреднение по большому ансамблю траекторий этого типа дает вклад второго члена итерационного ряда.

Аналогичные выражения, но с большим числом промежуточных моментов времени на классических траекториях, когда происходит возмущение импульса, можно записать и для других членов ряда (10). Число возмущений импульса на траектории определяет номер члена итерационного ряда (10), описываемого данной траекторией.

Окончательное выражение, которое используется для вычисления линейного функционала (11), имеет следующий вид:

$$A(t) = M \{ \alpha(A; T_i) \} = \sum_{p,q} (\Delta p \Delta q) \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^i \sum_{\tau_j} \sum_{s_j} \alpha(A; T_i) P(T_i), \quad (13)$$

$$\alpha(A; T_i) = A(p, q) W^0(\bar{p}_0^1, \bar{q}_0^1) \Omega(T_i),$$

где функции P и Ω — соответственно вероятность генерации квантовой траектории T_i и ее весовая функция.

3. ИЗМЕРЯЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ

Изучение временных аспектов туннелирования можно начать с изучения эволюции волнового пакета. Вероятность обнаружить волновой пакет или частицу в произвольной точке X определяется квадратом модуля волновой функции $|\psi(X, t)|^2$. В нестационарной задаче эта вероятность зависит от времени и определяет характерные времена динамики волнового пакета. Если в эксперименте используется идеальный детектор (т. е. его измерение не возмущает волновой функции), реагирующий на присутствие частиц, тогда измеряемое им среднее время присутствия в точке X определяется формулой

$$\bar{t}_X = \frac{\int_0^{\infty} dt t |\psi(X, t)|^2}{\int_0^{\infty} dt |\psi(X, t)|^2}. \quad (14)$$

Описание этих времен можно найти в [31–33], а распределение времен присутствия в точке X имеет вид

$$\bar{P}(t_X) = \frac{|\psi(X, t)|^2}{\int_0^{\infty} dt |\psi(X, t)|^2}. \quad (15)$$

Чтобы найти квадрат волновой функции $|\psi(X, t)|^2$, достаточно вычислить квантовомеханическое среднее от оператора

$$\langle \psi(t) | \delta(\hat{q} - X) | \psi(t) \rangle = \int dq \delta(q - X) |\psi(q, t)|^2 = |\psi(X, t)|^2.$$

На языке вигнеровского формализма это равносильно вычислению интеграла

$$\langle \psi(t) | \delta(\hat{q} - X) | \psi(t) \rangle = \iint dq dp \delta(q - X) W(q, p, t) = \int dp W(X, p, t). \quad (16)$$

Если точка X выбрана справа от барьера, то этот интеграл позволяет вычислить квадрат протуннелировавшей волновой функции. Распределение времен «присутствия» в соответствии с формулой (16) можно переписать в виде

$$P_X(t) = \frac{|\psi(X, t)|^2}{\int_0^\infty dt |\psi(X, t)|^2} = \frac{\int dp W(X, p, t)}{\int_0^\infty dt \int dp W(X, p, t)}. \quad (17)$$

Чтобы определить средний момент времени, когда волновой пакет проходит через детектор в точке X , необходимо вычислить интеграл

$$\langle t(X) \rangle = \int_0^\infty dt t P_X(t), \quad (18)$$

а среднее время перемещения пакета из точки X_i в точку X_f будет равно

$$\langle t_T(X_i, X_f) \rangle = \langle t(X_f) \rangle - \langle t(X_i) \rangle. \quad (19)$$

Если точки X_i и X_f выбраны по разные стороны потенциального барьера, тогда выражение (19) можно использовать в качестве оценки времени туннелирования.

Главный недостаток определения (17) заключается в том, что в физических экспериментах, как правило, используются детекторы, реагирующие на плотность потока, а не на плотность вероятности, поэтому для сопоставления теории и эксперимента необходимо рассматривать другую величину. Для этого было введено распределение времен появления волнового пакета в заданной точке через плотность потока вероятности [34]:

$$P_X(t) = \frac{\langle \psi(t) | \hat{J}(X) | \psi(t) \rangle}{\int_0^\infty dt \langle \psi(t) | \hat{J}(X) | \psi(t) \rangle}, \quad (20)$$

где

$$\hat{J}(X) = \frac{1}{2} [\hat{p} \delta(\hat{q} - X) + \delta(\hat{q} - X) \hat{p}]. \quad (21)$$

Конечно, определение (20) не является настоящей функцией распределения из теории вероятности, так как в некоторых точках эта функция может принимать отрицательные значения. Тем не менее определение (20) будет функцией распределения, если через точку X отсутствует обратный поток или он пренебрежимо мал. Для этого точка X выбирается на достаточном расстоянии от барьера. Измерив распределения времен появления пакета перед и за барьером, можно будет вычислить время прохождения

через область намного большую, чем область потенциального барьера. Это время аналогично асимптотическим фазовым временам [35] и кроме времени туннелирования, времени взаимодействия пакета с барьером содержит также время прохождения через область, где потенциальный барьер равен нулю. Разделить эти времена не представляется возможным. Эта проблема времени туннелирования, несмотря на продолжающиеся обсуждения [19–24, 36, 37], еще не получила своего окончательного решения.

Другая проблема касается физической реализации эксперимента, в котором одно-временное детектирование пакета перед и за барьером не приводило бы к значительной редукции волновой функции. По этой причине в экспериментах обычно измеряется другая величина — «временная задержка» [38–42]. Временная задержка возникает из-за наличия барьера и определяется как разница средних времен появления туннелирующего и свободного пакетов:

$$\Delta\tau_{arrival}(X) = \langle t_X \rangle^{tun} - \langle t_X \rangle^{free}. \quad (22)$$

Использование определения (20) для вычисления средних времен появления дает разумную оценку временных задержек, измеряемых в эксперименте.

В вигнеровской формулировке квантовой механики распределение времен появления (20) переписывается в следующем виде:

$$P_X(t) = \frac{\iint dqdp J_X(q, p) W(q, p, t)}{\int_0^\infty dt \iint dqdp J_X(q, p) W(q, p, t)}, \quad (23)$$

где символ Вейля от оператора тока $\hat{J}(X)$ после вычисления имеет вид

$$J_X(q, p) = \frac{\hbar}{2} \sin\left(\frac{2p(X-q)}{\hbar}\right) \frac{\partial}{\partial q} \delta(q-X). \quad (24)$$

Подставив в (20) выражение (24) и взяв по частям интеграл по переменной q , можно получить следующее выражение:

$$P_X(t) = \frac{\int dp p W(X, p, t)}{\int_0^\infty dt \int dp p W(X, p, t)}. \quad (25)$$

Сравнивая выражения (17) и (25), нетрудно увидеть, что разница между ними заключается в возникновении в числителе и знаменателе выражения (25) импульса p . Этот импульс появился в последнем выражении, из-за того что там измеряется плотность потока вероятности.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассмотрим серию экспериментов о туннелировании электрона с волновой функцией

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x)^{1/4}} \exp \left[- \left(\frac{x - x_0}{2\sigma_x} \right)^2 + ik_0x \right] \quad (26)$$

через гауссовый потенциальный барьер вида

$$V(x) = V_0 \exp \left[- \frac{(x - d)^2}{\sigma^2} \right].$$

Вигнеровская функция распределения (3), соответствующая исходной волновой функции электрона, записывается в виде

$$W(p, q, 0) = 2 \exp \left[- \frac{(q - x_0)^2}{2\sigma^2} \right] \exp \left[- \frac{2\sigma^2(p - \hbar k_0)^2}{\hbar^2} \right]. \quad (27)$$

Центр волнового пакета $x_0 = \langle \psi(x, 0) | \hat{x} | \psi(x, 0) \rangle$ в начальный момент времени выбирался достаточно далеко от левой границы барьера, чтобы плотность вероятности за барьером была пренебрежимо мала по сравнению с вероятностью прохождения через барьер $|T|^2$. Туннелирование происходило через «широкий» ($\sigma = 2.5$ нм — этот параметр барьера характерен для структур $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) и «узкий» ($\sigma = 0.5$ нм) гауссовы барьеры высотой $V_0 = 0.3$ эВ и с центром в $d = 0$. Кинетическая энергия электрона составляла $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m = V_0 / 2 = 0.15$ эВ. Будем использовать систему единиц, в которой $\hbar = m = V_0 = 1$. Расстояния измерялись в единицах приведенной волны де Бройля $\lambda = 1/k_0$. В выбранной системе единиц волновой пакет и барьер имели следующие значения параметров: $E_0 = 0.5$, $\Delta k = 0.04$ (0.125), $\sigma_x = 1/2\Delta k = 12.5$ (4), $x_0 = -92.5$ (-43), $\sigma = 5$ (2.5 нм) и $\sigma = 1$ (0.5 нм).

4.1. Эволюция волнового пакета

Взаимодействие волнового пакета ($\hbar\Delta k = 0.125$) с узким потенциальным барьером ($\sigma = 1$ (0.5 нм)) показано на рис. 1а и б. На них представлена плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$ (кривые 1–5) отраженного (рис. 1а) и протуннелировавшего (рис. 1б) волновых пакетов в последовательные моменты времени $t = 114$ –239 фс. Вычисление плотности вероятности проводилось по формуле (16), т. е. через вигнеровскую функцию распределения. Этот интеграл вычислялся вдоль квантовых и классических траекторий. При расчете по классическим траекториям только высокоэнергетические компоненты пакета могли классически пройти поверх барьера. Этот расчет соответствует кривой 1 на рис. 1в, а эволюция функции Вигнера описывается лишь первым членом ряда (10). В рамках формализма квантовых траекторий прохождение компонент пакета за барьер связано со случайными возмущениями импульса, т. е. с виртуальным изменением энергии. Результаты этого расчета соответствуют кривой 2 на рис. 1в. Теперь в эволюции вигнеровской функции учитываются квантовые поправки, вносимые всеми членами ряда (10).

Разумеется, при расчете по квантовым траекториям учитываются и высокоэнергетические компоненты, которые проходят над барьером, так как они описывают вклад первого члена ряда (10). Однако, как показывает сравнение кривых 1 и 2 на рис. 1в, для узкого барьера их роль незначительна, основная часть пакета проходит над барьером за счет виртуального изменения энергии, описываемого как случайные возмущения импульса квантовых траекторий. Изучение туннелирования через широкий барьер приводит к противоположному выводу. На рис. 1г кривые 1 и 2 почти совпадают. Это

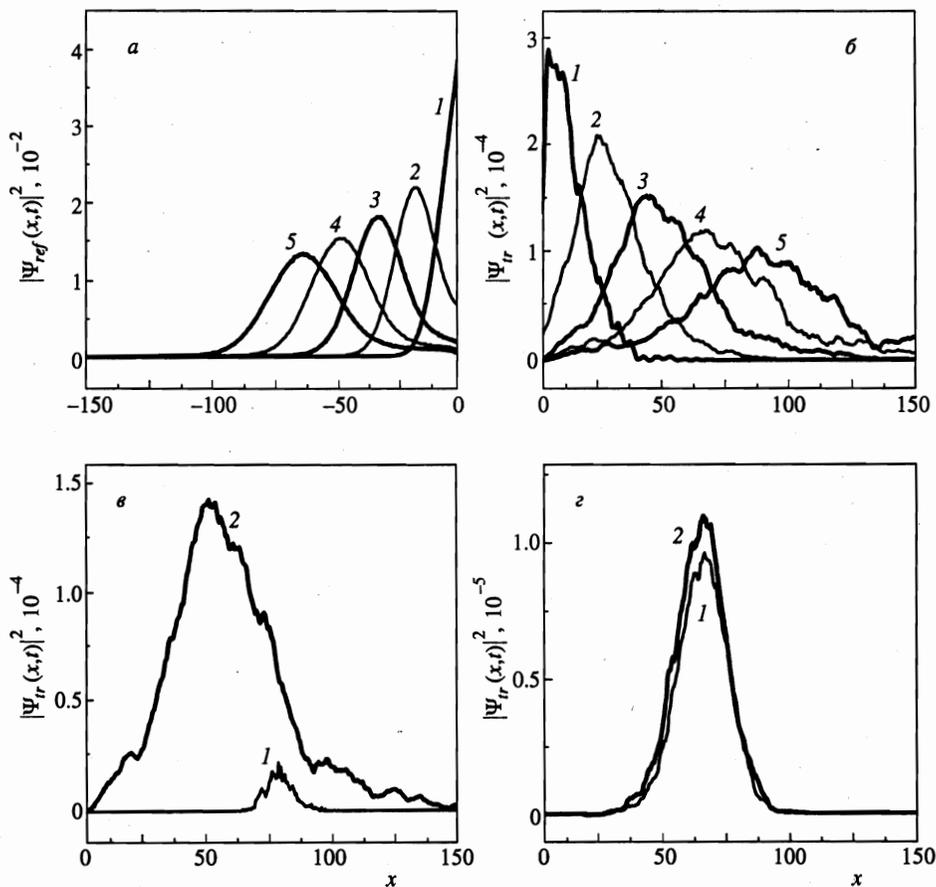


Рис. 1. Плотности вероятности отраженного $|\psi_{ref}(x, t)|^2$ (а) и протуннелировавшего $|\psi_{tr}(x, t)|^2$ (б) волновых пакетов в последовательные моменты времени $t_i = 144-239$ фс (кривые 1-5) при $\Delta k = 0.125$ и «толщине» барьера $\sigma = 1$ (0.5 нм); а также $|\psi_{tr}(x, t)|^2$ (в, г) в момент времени $t = 187$ фс, $\Delta k = 0.125$ при толщине барьера $\sigma = 1$ (0.5 нм) (в) и $\sigma = 5$ (2.5 нм) (г): кривая 1 — расчет по классическим траекториям, кривая 2 — по квантовым траекториям

означает, что основная часть пакета прошла над барьером, а вклад всех членов ряда (10), кроме первого, пренебрежимо мал. Чтобы избежать подобной ситуации и восстановить важность квантовых эффектов, необходимо уменьшить неопределенность импульса начального волнового пакета. Далее все вычисления для широкого барьера приводятся при неопределенности импульса $\hbar\Delta k = 0.04$.

4.2. Средняя координата, средний импульс и их дисперсии

На рис. 2а представлена эволюция средней координаты $\langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle$ волнового пакета для расчета по классическим (кривая 1) и квантовым (кривая 2) траекториям. До взаимодействия с барьером в этих двух методах расчета средней координаты \bar{X} не наблюдается никаких различий (кривые 1 и 2 совпадают). Объяснить этот результат

можно следующим образом. Квантовомеханические свойства проявляются в обсуждаемом методе в двух пунктах: в свойствах начального состояния волнового пакета и в его эволюции. Так как начальные данные для квантовых и классических траекторий выбирались одни и те же, то совпадение \bar{X} должно объясняться эволюцией волнового пакета, а именно, пока пакет свободно движется до барьера, он правильно описывается и классическими траекториями. В этом случае для описания эволюции вигнеровской функции достаточно учета только первого члена ряда (10). Этот результат можно получить и аналитически, оценив правую часть уравнения Вигнера—Лиувилля (4). Для выбранной нами начальной функции Вигнера (27) и гауссового барьера легко показать, что величина интеграла в правой части уравнения (4) экспоненциально затухает с увеличением расстояния до барьера. В этом случае уравнение (4) переходит в классическое уравнение Лиувилля, характеристиками которого являются обычные классические траектории.

Отличие в поведении кривых 1 и 2 появляется после взаимодействия пакета с барьером

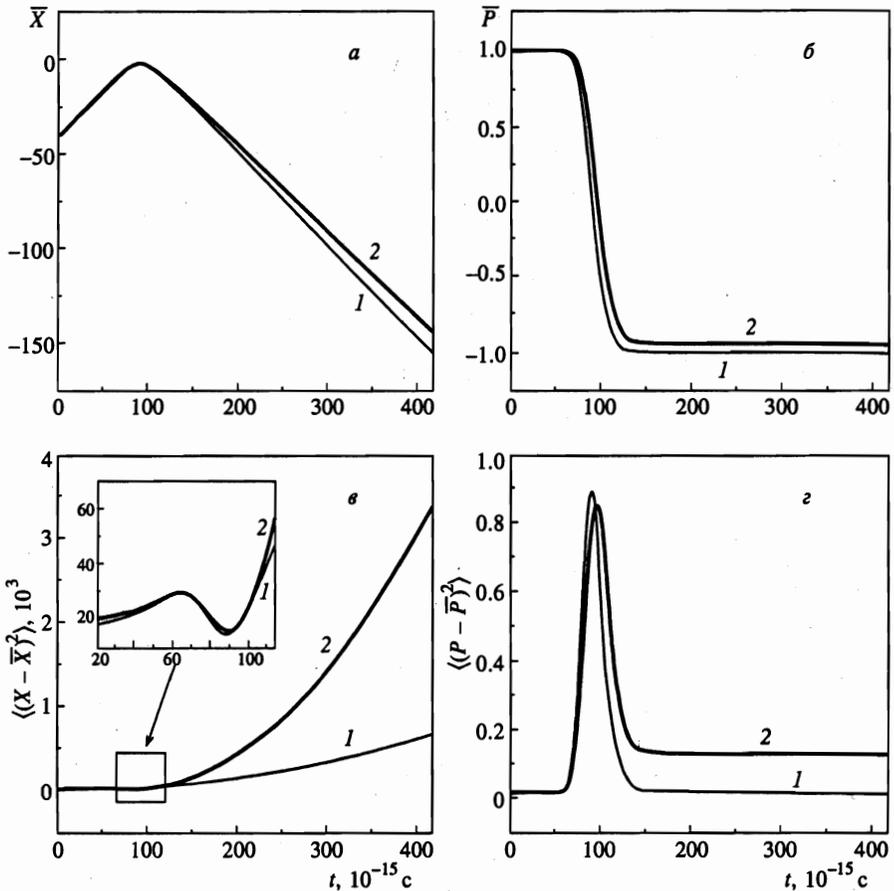


Рис. 2. Средняя координата \bar{X} (а), средний импульс \bar{P} (б), дисперсия координаты $\langle (X - \bar{X})^2 \rangle$ (в) и дисперсия импульса $\langle (P - \bar{P})^2 \rangle$ (г): 1 — расчет по классическим траекториям; 2 — по квантовым траекториям

ером. Теперь классические траектории больше не являются характеристиками и неправильно описывают эволюцию волнового пакета. На рис. 2а и б средняя координата и импульс расчета по квантовым траекториям (кривая 2) оказываются больше, чем по классическим (кривая 1). Это связано со следующими обстоятельствами. Во-первых, так как основная часть пакета отражается, то, как видно из рис. 2б, после рассеяния на барьере средний импульс меняет свой знак. Во-вторых, классические траектории (кривая 1) не учитывают туннелирования, а учитывают только незначительное надбарьерное прохождение, возникающее из-за неопределенности импульса гауссова волнового пакета. Между тем понятно, что туннелирующая часть пакета имеет положительный импульс и движется в противоположную сторону относительно отраженной части и, следовательно, ее вклад в \bar{X} и \bar{P} имеет другой знак. Именно этот факт объясняет расхождение кривых 1 и 2.

Кроме этого, движение туннелирующего и отраженного пакетов в разные стороны объясняет также более быстрый рост дисперсии координаты квантового расчета (кривая 2, рис. 2в) по сравнению с классическим (кривая 1), который учитывает только распыление волнового пакета. В верхней левой части рис. 2в более детально показано поведение ширины пакета при рассеянии на барьере.

Взаимодействие пакета с барьером приводит также к интересному поведению дисперсии импульса на рис. 2г. Постоянные значения (кривая 1) на начальном и конечном участках показывают дисперсию импульса в падающем и отраженном волновых пакетах, т. е. до и после взаимодействия с барьером. Наблюдаемый пик связан с изменением знака импульса пакета, а также с тем, что разные компоненты достигают барьера и отражаются от него в разное время. Увеличение дисперсии импульса (кривая 2) на конечном участке объясняется появлением при квантовом методе расчета туннелирующего пакета, импульс которого положителен, в то время как общий средний импульс отрицателен.

4.3. Распределение времен присутствия и появления.

Функция распределения по импульсам

На рис. 3а, б приводятся результаты расчета ненормированного распределения времен присутствия (17) в разных точках до барьера, внутри него и за ним (кривые 1–5). На рис. 4а, б представлены аналогичные результаты для ненормированного распределения времен появления (20). Кривые 1 на рис. 3а и рис. 4а показывают поведение плотности и потока вероятности, соответствующие тому, что через детектор в разные моменты времени проходят падающий и отраженный волновые пакеты. Кривая 2 на рис. 4а — это поведение потока, измеренного в некоторой точке слева от центра барьера. Через эту точку проходят туннелирующие и высокоэнергетические компоненты, присутствующие в исходном пакете и достигающие ее классически. Для потока плотности вероятности на рис. 4б (кривые 3–5) получается интересный результат. Поток, измеренный в центре барьера (кривая 3), оказывается значительно меньше, чем поток на правой границе барьера (кривая 4) и далеко справа (кривая 5). Это означает, что внутри барьера происходит интерференция туннелирующих компонент волнового пакета, движущихся в разных направлениях. Одни из этих компонент полностью проходят через барьер, а другие отражаются внутри барьера и не достигают его правой границы. Интерференция отраженных и прошедших компонент приводит к наблюдаемому уменьшению амплитуды потока в центре барьера (кривая 3) и на правой границе (ср. кривые 4 и 5). Интересно отметить, что исследование туннелирования с помощью классиче-

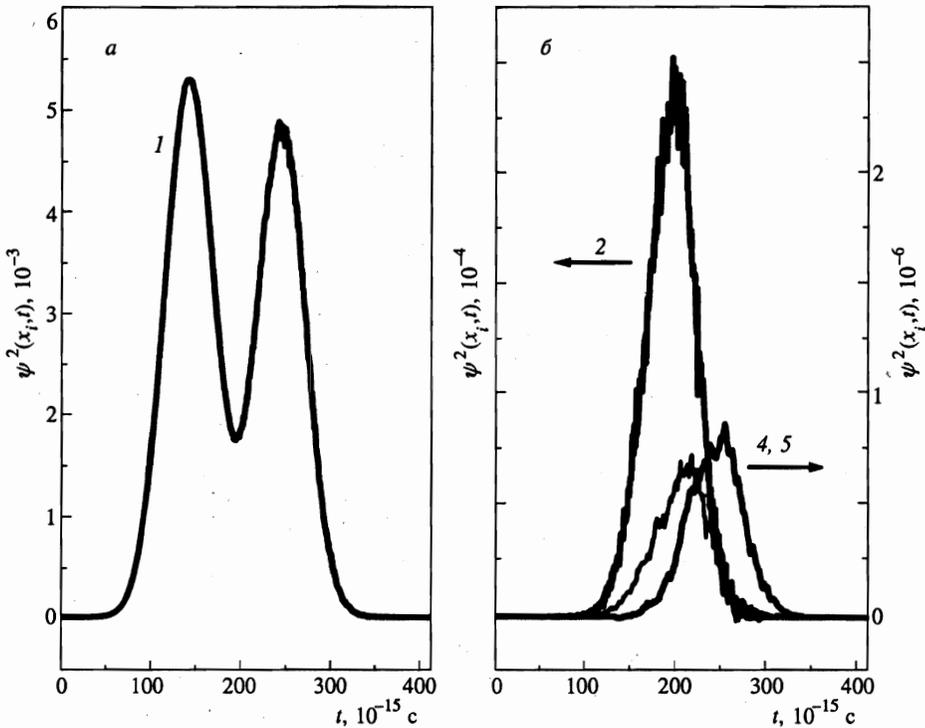


Рис. 3. Плотность вероятности или ненормированные распределения времен присутствия (17): а — $|\psi(x_i, t)|^2$ в точке $x_1 = -5\sigma$ (кривая 1); б — $|\psi(x_i, t)|^2$ в $x_2 = -0.67\sigma$ (кривая 2), в $x_4 = 0.67\sigma$ (кривая 4), в $x_5 = 5\sigma$ (кривая 5); центр барьера расположен в $x_3 = 0$, «толщина» барьера $\sigma = 5$ (2.5 нм)

ских траекторий в комплексном времени также обнаруживает подобный эффект [37]. Оказывается, что прохождение через барьер происходит как серия попыток, многие из которых оканчиваются неудачно из-за отражений в различных областях под барьером.

Сравнение распределений времен присутствия и появления на рис. 3б и 4б показывает, что они почти совпадают, совпадают и вычисленные средние времена (18) присутствия и появления (разница менее 1 фс). Как уже было сказано, распределение времен появления (20) не является истинной функцией распределения и, как видно из рис. 4а (кривая 2), непригодно для вычисления среднего времени появления пакета перед барьером. Это обстоятельство не позволяет вычислить время туннелирования как разницу средних времен появления пакета перед и за барьером (19). Тем не менее для оценки времени туннелирования можно воспользоваться формулой (19), если вместо среднего времени появления перед барьером использовать среднее время присутствия (14). В этом случае время туннелирования через потенциальный барьер оказывается равным $\tau_T(-0.67\sigma, +0.67\sigma) = 12$ фс, т.е. почти совпадает со временем движения свободного пакета через аналогичную область $\tau_T^{class}(-0.67\sigma, +0.67\sigma) = 13.4$ фс.

Временные задержки измерялись в точках $x_4 = 0.67\sigma$ (1.6 нм) и $x_5 = 5\sigma$ (12 нм) и оказались равными $\Delta\tau_{arrival}(x_4) = 8$ фс и $\Delta\tau_{arrival}(x_5) \leq 0.5$ фс. Если эти измерения проводить еще дальше справа от барьера, то величина $\Delta\tau_{arrival}(x)$ становится отрицательной. Таким образом; прослеживается интересная закономерность: несмотря на то

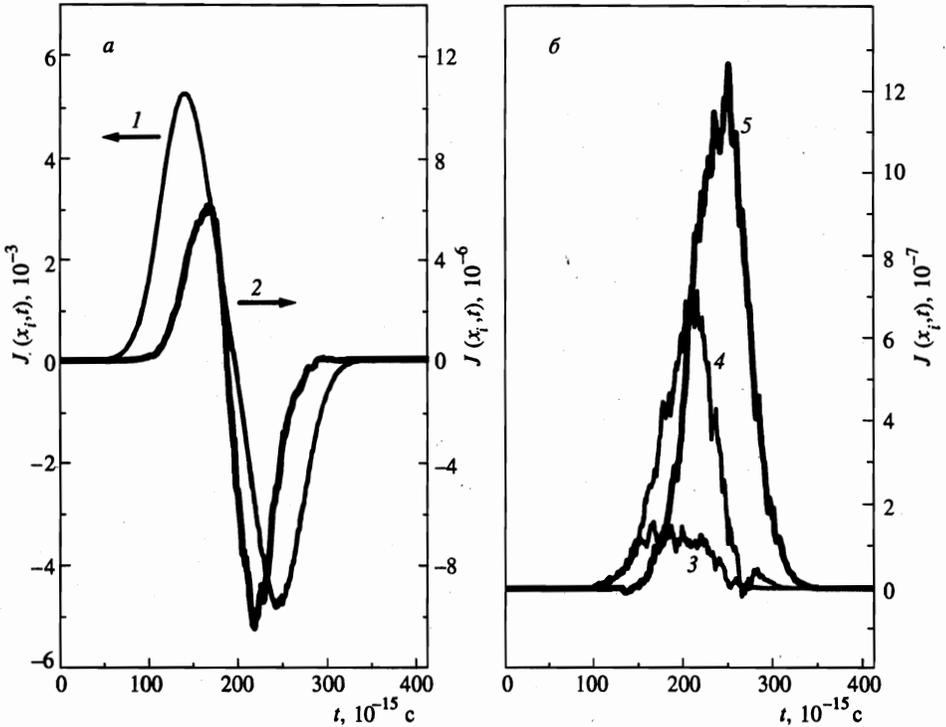


Рис. 4. Плотность потока вероятности или ненормированные распределения времен появления (20): *a* — $J(x_i, t)$ в точках $x_1 = -5\sigma$ (кривая 1) и $x_2 = -0.67\sigma$ (кривая 2); *b* — $J(x_i, t)$ в $x_3 = 0$ (кривая 3), $x_4 = 0.67\sigma$ (кривая 4) и $x_5 = 5\sigma$ (кривая 5); центр барьера расположен в $x_3 = 0$, «толщина» барьера $\sigma = 5$ (2.5 нм)

что туннелирующий волновой пакет задерживается барьером ($\Delta\tau_{arrival}(x_4) = 8$ фс) и проходит через него приблизительно за то же время, что и свободный пакет, на определенном расстоянии справа от барьера он появляется раньше. Этот эффект можно объяснить тем, что вероятность прохождения через гауссов барьер растет с энергией, поэтому компоненты пакета, имеющие больший импульс, имеют большую вероятность оказаться за барьером. Эти компоненты движутся быстрее свободного пакета и через некоторое время обгоняют его. После этого временные задержки могут быть только отрицательными. Это обстоятельство подтверждает функция распределения по импульсам

$$\frac{\langle \psi(t) | \delta(\hat{p} - p) | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle}, \tag{28}$$

вычисленная для узкого (рис. 5а) и широкого (рис. 5б) барьеров соответственно в моменты времени $t = 218$ и 385 фс. На этих характерных временах функция распределения перестает меняться, так как взаимодействие с барьером уже закончилось. Из рис. 5 видно, что средний импульс протуннелировавшего волнового пакета (кривая 2) оказывается больше, чем средний импульс волнового пакета в начальный момент времени (кривая 1). Наблюдаемый пик у функции распределения импульса (кривая 2 на рис. 5а) связан с теми компонентами пакета, которые имели достаточно большой импульс и прошли

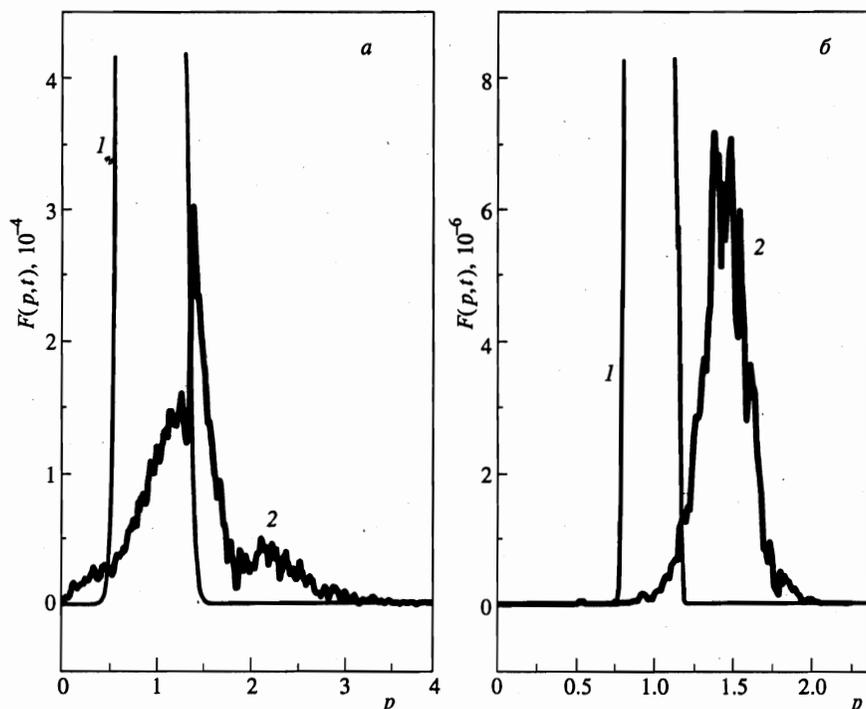


Рис. 5. Распределение импульсов в пакете при $t = 0$ (кривая 1) и в пакете, прошедшем за потенциальный барьер (кривая 2): а — $\Delta k = 0.125$, «толщина» барьера $\sigma = 1$ (0.5 нм), $t = 218$ фс; б — $\Delta k = 0.04$, «толщина» барьера $\sigma = 5$ (2.5 нм), $t = 385$ фс

поверх барьера. Видно также, что туннелирование через узкий потенциальный барьер приводит к большей дисперсии функции распределения, а туннелирование через широкий барьер значительно смещает ее центр в сторону больших импульсов (кривая 2 на рис. 5б).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В вигнеровской формулировке квантовой механики для решения интегрального уравнения Вигнера—Лиувилля использовался метод квантового обобщения классической молекулярной динамики. Обсуждаемый метод его решения не требует большого увеличения вычислительных затрат и позволяет избежать вычислительных трудностей, с которыми приходится сталкиваться при решении нестационарного уравнения Шредингера.

В рамках этого подхода решалась нестационарная задача о туннелировании конечного волнового пакета, т. е. задача, в которой важен учет экспоненциально малых квантовых эффектов. Были проанализированы эволюция волнового пакета, поведение средних и дисперсий координаты и импульса, а также распределения времен присутствия и появления волнового пакета при разных положениях идеального измерительного детектора. Были получены следующие результаты: 1) время туннелирования через

потенциальный барьер приблизительно имеет тот же порядок, что и время прохождения аналогичного расстояния свободным волновым пакетом; 2) туннелирующий волновой пакет задерживается потенциальным барьером, поэтому за барьером временная задержка должна иметь положительное значение; 3) измерение отрицательных временных задержек возможно лишь на достаточно больших расстояниях от барьера и связано со сдвигом функции распределения по импульсам; 4) гауссов барьер пропускает преимущественно высокоэнергетические компоненты пакета, взаимодействие с ним смещает центр функции распределения импульсов таким образом, что средний импульс прошедшего пакета оказывается больше начального среднего импульса всего пакета; 5) туннелирование через узкий потенциальный барьер приводит к большей дисперсии импульсов протуннелировавших компонент, а через широкий — к заметному увеличению среднего импульса; 6) результаты расчета плотности потока вероятности показали, что туннелирующий волновой пакет не полностью проходит через барьер, часть его испытывает отражение и не достигает границы барьера.

Работа частично поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований и программы «Физика твердотельных наноструктур».

Литература

1. Yu. E. Lozovik, S. P. Merkulova, D. V. Lisin et al., submitted to *Phys. Lett. A*; see also *Proceedings of International Symposium «Nanostructures '97: Physics and Technology»*, St. Petersburg (1997), p. 352.
2. L. Eisenbud, PhD Thesis, Princeton University (1948).
3. D. Bohm, *Quantum Theory*, Prentice-Hall, New York (1951), p. 257.
4. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).
5. M. Buttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982).
6. M. Buttiker and R. Landauer, *Phys. Scr.* **32**, 429 (1985).
7. R. Landauer and Th. Martin, *Sol. St. Comm.* **84**, 115 (1992).
8. D. Sokolovski and L. Baskin, *Phys. Rev. A* **36**, 4604 (1987).
9. D. Sokolovski and J. Connor, *Phys. Rev. A* **47**, 4677 (1993).
10. А. И. Базь, *ЯФ* **5**, 229 (1967).
11. В. Ф. Рыбаченко, *ЯФ* **5**, 635 (1967).
12. M. Buttiker and R. Landauer, *Phys. Rev. A* **27**, 6178 (1983).
13. C. R. Leavens and G. C. Aers, *Sol. St. Comm.* **63**, 1101 (1987).
14. M. Buttiker and R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **30**, 451 (1986).
15. Th. Martin and R. Landauer, *Phys. Rev. A* **47**, 2023 (1993).
16. C. R. Leavens and G. C. Aers, *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 305 (1988).
17. R. Landauer, *Phys. Chem.* **95**, 404 (1991).
18. R. Landauer and Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994).
19. J. Kijowski, *Rep. Math. Phys.* **6**, 362 (1974).
20. P. Busch, M. Grabowski, and P. J. Lahti, *Phys. Lett. A* **191**, 357 (1994).
21. N. Grot, C. Rovelli, and R. S. Tate, *Phys. Rev. A* **54**, 4676 (1996).
22. V. Delgado and J. G. Muga, *Phys. Rev. A* **56**, 3425 (1997).
23. Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **122**, 1649 (1961).
24. J. Leon, *J. Phys. A* **30**, 4791 (1997).
25. W. Pauli, in *Encyclopedia of Physics*, 5/1, ed. by S. Flugge, Springer, Berlin (1958), p. 60.
26. V. S. Filinov, *Mol. Phys.* **85**, 711 (1995); V. S. Filinov, *Mol. Phys.* **88**, 1517, 1529 (1996).

27. В. С. Филинов, Ю. Е. Лозовик, А. В. Филинов, И. Е. Захаров, А. М. Опарин, Изв. РАН **62**, 1179 (1998); V. S. Filinov, Y. E. Lozovik, A. V. Filinov, I. Zacharov and, A. Oparin, Phys. Scripta **58**, 297, 304 (1998).
28. V. S. Filinov, S. Bonella, Y. E. Lozovik, A. V. Filinov, and I. Zacharov, in *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*, World Scientific Publishing Company, Singapore (1998), p. 671.
29. E. P. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
30. В. И. Татарский, УФН **139**, 587 (1983).
31. E. P. Wigner, in *Aspects of Quantum Theory*, ed. by A. Salam and E. P. Wigner, Cambridge, London (1972), p. 237.
32. M. Bauer, P. A. Mello, and K. W. Mc Voy, Z. Phys. A **293**, 151 (1979).
33. V. S. Olkhovskiy, E. Recami, and A. J. Gerasimchuk, Nuovo Cimento **22**, 263 (1974).
34. R. S. Dumont and T. L. Marchioro II, Phys. Rev. A **47**, 85 (1993).
35. E. H. Hauge and J. A. Stovneng, Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989).
36. W. R. McKinnon and C. R. Leavens, Phys. Rev. A **51**, 2748 (1995).
37. D. Mugnai and A. Ranfagni, Nuovo Cimento D **14**, 541 (1992).
38. A. Ranfagni, D. Mugnai, P. Fabeni, and G. P. Pazzi, Appl. Phys. Lett. **58**, 774 (1991).
39. A. M. Steinberg, P. G. Kwiat, and R. Y. Chiao, Phys. Rev. Lett. **71**, 708 (1993).
40. A. Enders and G. Nimtz, Phys. Rev. B **47**, 9605 (1993).
41. Ch. Spielmann, R. Szipocs, A. Sting, and F. Krausz, Phys. Rev. Lett. **73**, 2308 (1994).
42. N. C. Klusdahl, A. M. Krivan, and D. K. Ferry, Phys. Rev. B **39**, 7720 (1989).