Физика и техника полупроводников, 1997, том 31, № 4

Времена рассеяния частицы на одномерных потенциальных барьерах

© Н.Л. Чуприков

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 21 марта 1996 г. Принята к печати 13 июня 1996 г.)

В рамках пакетного анализа дано определение времен туннелирования для частиц, начальное состояние которых описывается волновыми пакетами общего вида. Показано, что "нефизичность" результатов, полученных ранее при численном моделировании движения волновых пакетов в одномерных структурах, обусловлена неправильной интерпретацией пакетного формализма. Времена туннелирования волновых пакетов, наблюдаемые в численном эксперименте, вовсе не являются временами туннелирования частиц.

1. Введение

Данная статья касается вопроса оценки временны́х параметров туннелирования электронов в полупроводниковых гетероструктурах. В настоящее время нет ясного, однозначного решения этой задачи даже в ее простейшей постановке — для туннелирования одной частицы в одномерных системах. Изучение динамики гауссовых волновых пакетов (ГП) [1–7] дало настолько необычные результаты, что их интерпретация до сих пор вызывает самые серьезные споры [7]. Так, например, для прямоугольных непрозрачных барьеров было обнаружено, что максимум прошедшего пакета может отходить от правой границы барьера раньше, чем максимум падающего пакета достигает его левой границы.

Таким образом, в рамках пакетного анализа имеется серьезная проблема корректного переноса свойств волновых пакетов на частицу. Следует признать, что эта проблема для волновых пакетов общего вида остается не решенной. Результаты работ [1,2] справедливы лишь для бесконечно узких в k-пространстве волновых пакетов. В общем случае пакетный анализ, как отмечено в обзоре [7], оставляет широкое поле для разногласий. Именно поэтому в настоящее время большое распространение получили альтернативные подходы, авторы которых отказываются от пакетного анализа при изучении туннелирования частицы. Не вдаваясь в детали этих подходов (см. [8], а также обзоры [6,7]), отметим только, что их разработка также встречает серьезные трудности.

В данной работе проблема определения временны́х параметров туннелирования частицы решается в рамках метода матрицы переноса [9,10]. Показано, что "нефизичность" результатов пакетного анализа возникает вследствие неточной интерпретации квантовой механики: времена туннелирования волновых пакетов, наблюдаемые в численном моделировании, вовсе не являются временами туннелирования частицы. В работе получены аналитические выражения для параметров туннелирования частиц, начальные состояния которых описываются произвольными волновыми пакетами. В заключение мы сравниваем наш подход с методом [3], в котором также рассматриваются волновые пакеты общего вида.

2. Волновые пакеты

Пусть электрон падает слева на статический потенциальный барьер, расположенный в интервале $[a, b]$, $a > 0$. Слева и справа от барьера частица свободна. Сшитое частное решение соответствующего временно́го уравнения Шредингера запишем в рамках метода матрицы переноса [9,10]. В области слева от барьера решением является суперпозиция падающей и отраженной волн

$$\Psi_{\text{left}} = \left[\exp(ikx) + \varphi_{\text{ref}}(k)\exp(-ikx)\right]\exp\left[-iE(k)t/\hbar\right], \tag{1а}$$

где

$$\varphi_{\text{ref}}(k) = \sqrt{R(k)}\exp\left[i(J - F + 2ka - \pi/2)\right];$$

для $x \geq b$ решением является прошедшая волна

$$\Psi_{\text{right}} = \varphi_{\text{tr}}(k)\exp\left[i(kx - E(k)t/\hbar)\right], \tag{1б}$$

где

$$\varphi_{\text{tr}}(k) = \sqrt{T(k)}\exp\left[i(J - kd)\right].$$

Здесь $R = 1 - T$, $d = b - a$, $E(k) = \hbar^2k^2/2m$; m — масса частицы; t — время; коэффициент прохождения T и фазовые параметры J и F — функции k. Рекуррентные соотношения для вычисления этих величин и их производных по энергии см. в [9,10].

Наряду с (1а) и (1б) решениями уравнения Шредингера являются также функции

$$\Psi_{\text{left}}(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{\infty}^{\infty}\left[\Psi_{\text{inc}}(k,t) + \Psi_{\text{ref}}(k,t)\right] \times \exp(ikx)dk \quad \text{для} \quad x \leq a, \tag{2а}$$

где

$$\Psi_{\text{inc}}(k,t) = cA(k)\exp\left[-iE(k)t/\hbar\right],$$

$$\Psi_{\text{ref}}(k,t) = cA(-k)\varphi_{\text{ref}}(-k)\exp\left[-iE(k)t/\hbar\right];$$

$$\Psi_{\text{right}}(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{\infty}^{\infty}\Psi_{\text{tr}}(k,t)\exp(ikx)dk \quad \text{для} \quad x \geq b, \tag{2б}$$

где

$$\Psi_{\mathrm{tr}}(k,t)=cA(k)\varphi_{\mathrm{tr}}(k)\exp\bigl[-iE(k)t/\hbar\bigr].$$

Здесь нужно иметь в виду, что $T(k)$ — четная, а $J(k)$ и $F(k)$ — нечетные функции k; $A(k)$ — комплекснозначная квадратично интегрируемая функция; c — нормировочная константа.

Решения (2а) и (2б) описывают, очевидно, движение волновых пакетов во внебарьерных областях: (2а) — суперпозиция падающего волнового пакета (индекс "inc") центр ("масс") которого в момент времени $t=0$ находится в точке $x=0$, и отраженного пакета (индекс "ref"); решение (2б) описывает прошедший волновой пакет (индекс "tr").

Поскольку параметры туннелирования отдельных волн зависят от k, анализ динамики волновых пакетов удобнее проводить в k-представлении. В общем случае получить аналитически волновую функцию в k-представлении не удается. Однако нетрудно убедиться в том, что асимптотическое поведение пакетов (т. е. в достаточно ранние и достаточно поздние моменты времени, когда пакеты еще или уже не взаимодействуют с барьером) описывается в k-представлении функциями $\Psi_{\mathrm{inc}}(k,t)$, $\Psi_{\mathrm{ref}}(k,t)$ и $\Psi_{\mathrm{tr}}(k,t)$ — см. (2а) и (2б). Конечно, в этом случае мы должны предположить, что расстояние a в начальный момент времени от волнового пакета до левой границы барьера достаточно велико. Условия того, что каждый из трех пакетов находится в "своей" x-области, запишем в виде

$$\int\limits_{-\infty}^{a}|\Psi_{\mathrm{left}}(x,t)|^2dx=\int\limits_{\infty}^{\infty}|\Psi_{\mathrm{inc}}(k,t)|^2dk=1$$

для достаточно ранних моментов времени, и

$$\int\limits_{-\infty}^{a}|\Psi_{\mathrm{left}}(x,t)|^2dx=\int\limits_{\infty}^{\infty}|\Psi_{\mathrm{ref}}(k,t)|^2dk=\bar{R},$$

$$\int\limits_{b}^{\infty}|\Psi_{\mathrm{right}}(x,t)|^2dx=\int\limits_{\infty}^{\infty}|\Psi_{\mathrm{tr}}(k,t)|^2dk=\bar{T}$$

для достаточно больших моментов времени.

Очевидно, что $\bar{T}$ и $\bar{P}$ — ни что иное как коэффициент прохождения и коэффициент отражения волнового пакета соответственно. Используя выражения (2а) и (2б), легко показать, что

$$\bar{T}=\langle T(k)\rangle_{\mathrm{inc}};\quad \bar{R}=\langle R(k)\rangle_{\mathrm{inc}}.$$

Здесь и далее среднее значение $\langle\hat{Q}(k)\rangle_{\mathrm{inc}}$ для некоторого оператора $\hat{Q}$, относящееся к падающему волновому пакету, определяется выражением

$$\langle\hat{Q}\rangle_{\mathrm{inc}}=\frac{\langle\Psi_{\mathrm{inc}}|\hat{Q}|\Psi_{\mathrm{inc}}\rangle}{\langle\Psi_{\mathrm{inc}}|\Psi_{\mathrm{inc}}\rangle}$$

(аналогично определяются средние значения оператора $\hat{Q}$ для прошедшего и отраженного волновых пакетов).

3. Время прохождения и время отражения волновых пакетов

Для определения временны́х параметров туннелирования волновых пакетов определим положения центров волновых пакетов для всех каналов рассеяния. Учитывая, что оператор координаты $\hat{x}$ равен $i\cdot d/dk$, имеем

$$\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{inc}}(t)=m^{-1}\hbar k_0t, \tag{3}$$

$$\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{tr}}(t)=m^{-1}\hbar\langle k\rangle_{\mathrm{tr}}t+d-\langle J'\rangle_{\mathrm{tr}}, \tag{4}$$

$$\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{ref}}(t)=-m^{-1}\hbar\langle -k\rangle_{\mathrm{ref}}t+2a+\langle J'-F'\rangle_{\mathrm{ref}}. \tag{5}$$

Здесь и далее штрих означает производную по k и $k_0=\langle k\rangle_{\mathrm{inc}}$.

Пусть точка Z_1 находится на расстоянии L_1 $(L_1<a)$ от левой границы барьера, а точка Z_2 — на расстоянии L_2 от правой границы. Учитывая асимптотический характер нашего подхода, мы должны предположить, что расстояния L_1 и L_2 достаточно велики. Найдем время прохождения отрезка Z_1Z_2, а также время, необходимое центру пакета для того, чтобы пройти от точки Z_1 до барьера и вернуться обратно (время отражения).

Пусть t_1 и t_2 — такие моменты времени, что

$$\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{inc}}(t_1)=a-L_1;\quad \langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{tr}}(t_2)=b+L_2. \tag{6}$$

Тогда время прохождения Δt_{tun} $(\Delta t_{\mathrm{tun}}=t_2-t_1)$ исследуемого участка с учетом (3), (4) и (6) запишется в виде

$$\Delta t_{\mathrm{tun}}=\frac{m}{\hbar}\left[\frac{\langle J'\rangle_{\mathrm{tr}}+L_2}{\langle k\rangle_{\mathrm{tr}}}+\frac{L_1}{k_0}+a\left(\frac{1}{\langle k\rangle_{\mathrm{tr}}}-\frac{1}{k_0}\right)\right]. \tag{7}$$

Для отраженного пакета пусть t_1 и t_3 — такие моменты времени, что

$$\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{inc}}(t_1)=\langle\hat{x}\rangle_{\mathrm{ref}}(t_3)=a-L_1. \tag{8}$$

Из уравнений (3), (5) и (8) следует, что для времени отражения Δt_{ref} $(\Delta t_{\mathrm{ref}}=t_3-t_1)$ справедливо выражение

$$\Delta t_{\mathrm{ref}}=\frac{m}{\hbar}\left[\frac{\langle J'-F'\rangle_{\mathrm{ref}}+L_1}{\langle -k\rangle_{\mathrm{ref}}}+\frac{L_1}{k_0}+a\left(\frac{1}{\langle -k\rangle_{\mathrm{ref}}}-\frac{1}{k_0}\right)\right]. \tag{9}$$

Заметим, что соотношения (7) и (9) содержат члены, пропорциональные a, благодаря которым временные характеристики волнового пакета имеют необычные свойства. Если, например, $\langle k\rangle_{\mathrm{tr}}>k_0$, то, увеличивая a, время Δt_{tun} можно сделать отрицательным и сколь угодно большим по модулю. Для отраженного пакета это имеет место, когда $\langle -k\rangle_{\mathrm{tr}}>k_0$ (как будет ясно из дальнейшего — см. (12), для каждой частицы выполняется только одно из этих неравенств). В обоих случаях центры прошедшего и отраженного пакетов должны отходить от барьера раньше, чем максимум падающего пакета достигнет его. Причем это опережение, в зависимости от a, может быть сколь угодно большим.

Здесь очень важно подчеркнуть, что этот эффект не исчезает для волновых пакетов с любой сколь угодно малой, но конечной шириной в k-пространстве (такие пакеты рассматривались в работе [1]). Увеличивая параметр a, выражение $a(\langle k\rangle_{\mathrm{tr}}^{-1} - k_0^{-1})$ в этом случае можно сделать сколь угодно большим по модулю.

В связи с этим можно было бы подвергнуть сомнению справедливость выражений (7) и (9). Однако, как уже было отмечено, столь необычное поведение волновых пакетов действительно наблюдается при численном моделировании [1–7]. Вызывает вопросы не само поведение волновых пакетов. (Волновой пакет с течением времени расплывается, и каким бы ни было значение a, центр прошедшего пакета появляется по другую сторону барьера не раньше того момента, как передний фронт падающего пакета достигнет его левой границы. "Лишние частицы" за барьером появиться не могут, так как нормировка волновой функции выполняется в каждый момент времени.) Проблема в том, как связать данное свойство волновых пакетов с движением туннелирующей частицы. Поскольку вопрос имеет принципиальное значение, остановимся на нем подробнее.

4. Об изменении среднего импульса волнового пакета и импульса частицы в процессе туннелирования

Заметим, что необычное поведение волновых пакетов связано с тем, что средние значения k в обоих каналах рассеяния в отдельности отличны от k_0. Например, для ГП $A(k) = \exp[-l_0^2(k - k_0)^2]$, где l_0 — ширина ГП в x-пространстве в нулевой момент времени, k_0 — среднее значение волнового числа, легко показать, что

$$\langle k\rangle_{\mathrm{tr}} = k_0 + \frac{\langle T'\rangle_{\mathrm{inc}}}{4l_0^2\langle T\rangle_{\mathrm{inc}}}, \tag{10}$$

$$\langle -k\rangle_{\mathrm{ref}} = k_0 + \frac{\langle R'\rangle_{\mathrm{inc}}}{4l_0^2\langle R\rangle_{\mathrm{inc}}}. \tag{11}$$

В случае широких ГП выражения (10), (11) совпадают (асимптотически) соответственно с выражениями (4.13) и (4.14) работы [6].

Полагая

$$\langle k\rangle_{\mathrm{tr}} = k_0 + \delta k_{\mathrm{tr}}, \quad \langle -k\rangle_{\mathrm{ref}} = k_0 + \delta k_{\mathrm{ref}},$$

соотношения (10) и (11) запишем в виде

$$\bar{T}\delta k_{\mathrm{tr}} = -\bar{R}\delta k_{\mathrm{ref}} = \frac{\langle T'\rangle_{\mathrm{inc}}}{4l_0^2}. \tag{12}$$

Здесь мы учли, что $R' = -T'$.

Первое из уравнений (12) полезно записать в виде "закона сохранения" среднего волнового числа —

$$\bar{T}\langle k\rangle_{\mathrm{tr}} + \bar{R}\langle -k\rangle_{\mathrm{ref}} = k_0. \tag{13}$$

Соотношение (13) отображает тот факт, что средние значения импульса частицы в начальном и конечном состояниях (последнее является суперпозицией прошедшего и отраженного пакетов) одинаковы. Однако мы видим, что в отдельности средние импульсы прошедшего и отраженного пакетов отличаются от $\hbar k_0$. Например, для ГП эта разница исчезает только в пределе при $l_0 \to \infty$. Это свойство волновых пакетов на первый взгляд также вступает в противоречие со здравым смыслом: импульс частицы при ее прохождении через неподвижный потенциальный барьер не должен меняться. Однако можно показать, что уточнение интерпретации пакетного формализма позволяет снять все возникающие в его рамках противоречия.

5. О необходимости выделения из падающего волнового пакета туннелирующей и отражающейся компонент

Действительно, согласно традиционной интерпретации, квантовая механика в данной задаче статистически описывает серию (строго говоря, бесконечную) экспериментов (измерений), в которых частица падает слева на потенциальный барьер и либо проходит затем через него, либо отражается. При этом падающий волновой пакет описывает всю серию измерений, а прошедший и отраженный пакеты в отдельности описывают только часть из них. Именно поэтому при определении времен туннелирования частицы бессмысленно сравнивать в отдельности положения центров прошедшего и отраженного волновых пакетов с положением центра падающего пакета. Последний можно сравнивать только с суперпозицией отраженного и прошедшего пакетов. В этом случае начальное и конечное состояния описывают одну и ту же совокупность измерений. Если же мы хотим рассматривать оба канала рассеяния в отдельности, то при определении времени прохождения (отражения) частицы нужно учитывать только ту совокупность измерений, в которых частица успешно туннелирует (отражается). Другими словами, мы должны выделить (если это возможно) из падающего волнового пакета такие две компоненты, которые описывают падающую частицу в обеих сериях измерений в отдельности. И именно с этими пакетами сравнивать затем положения центров прошедшего и отраженного пакетов.

Одно из основных условий, которому должны удовлетворять искомые пакеты, — это то, что переход из начального состояния в конечное должен происходить для каждого канала в отдельности (т. е. в каждой серии измерений) с сохранением "числа частиц".

Запишем падающий волновой пакет в виде

$$\Psi_{\mathrm{inc}}(k,t) = \Psi_{\mathrm{inc}}^{\mathrm{tr}} + \Psi_{\mathrm{inc}}^{\mathrm{ref}} + \Psi_{\mathrm{inc}}^{\mathrm{int}},$$

где

$$\Psi_{\mathrm{inc}}^{\mathrm{tr}} = \sqrt{T(k)}\Psi_{\mathrm{inc}}(k,t), \tag{14}$$

$$\Psi_{\mathrm{inc}}^{\mathrm{ref}} = \sqrt{R(k)}\Psi_{\mathrm{inc}}(k,t), \tag{15}$$

$$\Psi^{\rm int}_{\rm inc} = \left[i - \sqrt{T(k)} - \sqrt{R(k)}\right] \Psi_{\rm inc}(k,t). \qquad (16)$$

Легко проверить, что для функций $\Psi^{\rm tr}_{\rm inc}$ и $\Psi^{\rm ref}_{\rm inc}$ справедливы соотношения

$$\langle \Psi^{\rm tr}_{\rm inc}|\Psi^{\rm tr}_{\rm inc}\rangle + \langle \Psi^{\rm ref}_{\rm inc}|\Psi^{\rm ref}_{\rm inc}\rangle = \langle \Psi_{\rm inc}|\Psi_{\rm inc}\rangle. \qquad (17)$$

$$\langle \Psi^{\rm tr}_{\rm inc}|\Psi^{\rm tr}_{\rm inc}\rangle = \langle \Psi_{\rm tr}|\Psi_{\rm tr}\rangle, \quad \langle \Psi^{\rm ref}_{\rm inc}|\psi^{\rm ref}_{\rm inc}\rangle = \langle \Psi_{\rm ref}|\Psi_{\rm ref}\rangle; \quad (18)$$

$$\langle k\rangle^{\rm tr}_{\rm inc} = \langle k\rangle_{\rm tr}; \quad \langle k\rangle^{\rm ref}_{\rm inc} = \langle -k\rangle_{\rm ref}. \qquad (19)$$

$$\langle \hat{x}\rangle^{\rm tr}_{\rm inc}(t) = m^{-1}\hbar\langle k\rangle^{\rm tr}_{\rm inc}\cdot t; \qquad (20)$$

$$\langle \hat{x}\rangle^{\rm ref}_{\rm inc}(t) = m^{-1}\hbar\langle -k\rangle^{\rm ref}_{\rm inc}\cdot t. \qquad (21)$$

Мы видим, что вклады, содержащие $\Psi^{\rm int}_{\rm inc}$, и интерференционные члены не входят в соотношение (17). Таким образом, вся совокупность измерений действительно разбивается на две. Соотношения (18) дают основание полагать, что в той серии измерений, в которой частица проходит через барьер, ее состояние до рассеяния описывается функцией $\Psi^{\rm tr}_{\rm inc}(k,t)$. В другой, в которой частица отражается, — функцией $\Psi^{\rm ref}_{\rm inc}(k,t)$. В обоих случаях рассеяние частицы происходит с сохранением числа частиц (см. (18)) и импульса (см. (19)). В начальный момент времени оба пакета, согласно исходной постановке задачи, находятся в точке $x = 0$ (см. (20) и (21)).

Если учесть соотношение (13), то легко показать, что

$$\bar{T}\langle k\rangle^{\rm tr}_{\rm inc} + \bar{R}\langle k\rangle^{\rm ref}_{\rm inc} = k_0, \qquad (22)$$

т. е. средние значения k по обоим каналам рассеяния равны k_0.

Заметим, что описанная выше процедура разбиения падающего волнового пакета на две компонеты, описывающие падающую частицу в обеих сериях измерений в отдельности, не однозначна. Легко проверить, что соотношения (17)–(22) не изменятся, если $\Psi^{\rm tr}_{\rm inc}$ умножить на $\exp[iw_1(k-k_0)]$, а $\Psi^{\rm ref}_{\rm inc}$ — на $\exp[iw_2(k-k_0)]$, где $w_1(k)$ и $w_2(k)$ — произвольные нечетные вещественные функции. Однако в данном случае эта неоднозначность не существенна, поскольку далее при определении времен туннелирования частицы мы будем использовать только соотношения (17)–(22).

6. Время прохождения и время отражения частицы

С учетом вышесказанного определим время прохождения, $\tau_{\rm tun}$, участка Z_1Z_2 для частицы как разность моментов времени t_2 и t_1, которые удовлетворяют уравнениям

$$\langle \hat{x}\rangle^{\rm tr}_{\rm inc}(t_1) = a - L_1; \quad \langle \hat{x}\rangle_{\rm tr}(t_2) = b + L_2. \qquad (23)$$

Откуда следует, что

$$\tau_{\rm tun}(L_1, L_2) = \frac{m}{\hbar\langle k\rangle_{\rm tr}}\left[\langle J'\rangle_{\rm tr} + L_1 + L_2\right]. \qquad (24)$$

Время, необходимое частице для того, чтобы выйти из точки Z_1, отразиться от барьера и вернуться в исходную точку, т. е. время отражения, $\tau_{\rm ref}$, определим как разность $t_3 - t_1$ моментов времени, для которых

$$\langle \hat{x}\rangle^{\rm ref}_{\rm inc}(t_1) = \langle \hat{x}\rangle_{\rm ref}(t_3) = a - L_1. \qquad (25)$$

Нетрудно показать, что

$$\tau_{\rm ref}(L_1) = \frac{m}{\hbar\langle -k\rangle_{\rm ref}}\left[\langle J' - F'\rangle_{\rm ref} + 2L_1\right]. \qquad (26)$$

Заметим, что выражения (24) и (26), асимптотически точные для больших значений L_1 и L_2, содержат вклады барьерной области $\tau^{(0)}_{\rm tun}$ ($\tau^{(0)}_{\rm tun} = \tau_{\rm tun}(0,0)$) и $\tau^{(-)}_{\rm ref}$ ($\tau^{(-)}_{\rm ref} = \tau_{\rm ref}(0)$). Это и есть искомые время прохождения и время отражения для частицы в барьерной области.

Здесь очень важно иметь в виду, что выражения (24) и (26) теряют смысл, если $L_1 = 0$ или $L_2 = 0$. Поэтому определенные выше временны́е характеристики никоим образом не описывают измерения, в которых зонды располагаются на границах барьера. Впрочем, такое расположение зондов само по себе не имеет смысла, так как идентификация центров (или, в частном случае, максимумов) пакетов невозможна здесь из-за интерференции. Условия отсутствия влияния интерференции на измерения и условия применимости нашей модели практически совпадают: расстояния до точек Z_1 и Z_2, где располагаются зонды, должны быть достаточно велики. Таким образом, чтобы определить экспериментально, например, время прохождения барьера, сначала следует измерить время $\tau_{\rm tun}(L_1, L_2)$, а затем вычесть из него время прохождения участков $(a - L_1,\, a)$ и $(b,\, b + L_2)$, где частица свободна. Предполагается, что средние скорости частиц на свободных участках для обоих каналов рассеяния в отдельности уже определены.

В рамках метода матрицы переноса [9,10] нетрудно установить, что для волн, падающих на барьер справа, фаза F меняет знак, а коэффициент прохождения и фаза J не зависят от направления движения падающей волны. Учитывая это, легко показать, что время отражения для частицы, падающей на барьер справа, $\tau^{(+)}_{\rm ref}$, определяется выражением

$$\tau^{(+)}_{\rm ref} = \frac{m\langle J' + F'\rangle_{\rm ref}}{\hbar\langle -k\rangle_{\rm ref}}. \qquad (27)$$

Из рекуррентных соотношений для параметров туннелирования волны (см. [10]) следует, что для барьеров, симметричных относительно середины барьерного участка, $F' \equiv 0$. В этом случае время отражения частицы не зависит от того, с какой стороны она падает на барьер, $\tau^{(0)}_{\rm ref} = \tau^{(-)}_{\rm ref} = \tau^{(+)}_{\rm ref}$.

Легко проверить, что для волновых пакетов, достаточно узких в k-пространстве, определенные здесь времена туннелирования совпадают с "фазовыми" временами (см. [10]).

7. О других подходах в рамках пакетного анализа

Здесь представляется очень важным сравнить наши результаты с результатами работы [3]. В обоих случаях речь идет о пакетном анализе для частиц, описываемых произвольными волновыми пакетами. Однако между ними имеется принципиальная разница. В нашем подходе определение времен туннелирования основано на вычислениях средних значений оператора $\hat{x}$. В то же время в [3] фактически использовалось усреднение оператора $\hat{\theta}$; $\hat{\theta} = iv^{-1}\hat{x}$, $v = \hbar k/m$.

Эта процедура, на наш взгляд, имеет два серьезных недостатка. Первый связан с тем, что этот оператор неэрмитов. (Здесь было бы более уместно использовать соответствующий эрмитизированный оператор (tempus), который был рассмотрен в работе [11]). Другой, более существенный недостаток состоит в том, что среднее значение квадрата оператора $\hat{\theta}$ (и эрмитизированного оператора) и, следовательно, дисперсия этой величины в состоянии, которое описывается ГП, бесконечны. Но если дисперсия физической величины в каком-либо состоянии бесконечна, то ее среднее значение (хотя само оно конечно) в данном состоянии теряет физический смысл.

Необоснованное использование оператора $\hat{\theta}$ (а не $\hat{x}$) при определении временны́х параметров туннелирования приводит, на наш взгляд, и к другой ошибке.

Для совместного описания обоих каналов рассеяния в литературе (см. обзоры [6,7]) достаточно широко используется так называемое время пребывания частицы в барьерной области (dwell time, τ_d). Иногда (см., например, [4]) эту величину записывают как среднее значение времен туннелирования по обоим каналам рассеяния

$$\tau_d = \bar{T}\theta_{\text{tun}} + \bar{R}\theta_{\text{ref}}, \tag{28}$$

где θ_{ref} — время туннелирования, а θ_{ref} — время отражения.

Сомнения в справедливости такого усреднения по обоим каналам рассеяния высказывались и ранее [6,7]. Однако ясного ответа на вопрос о справедливости выражения (28) не дано. На наш взгляд, эта формула не верна в общем случае по той причине, что в ней неявно предполагается правомерность усреднения оператора $\hat{\theta}$, который играет в данном случае роль "оператора времени". Мы показали, что уже для ГП эта операция теряет смысл.

В нашем подходе возникает другое соотношение для временных параметров, связывающее оба канала рассеяния. Действительно, легко проверить, что справедливо тождество

$$\langle J' \rangle_{\text{inc}} \equiv \bar{T}\langle J' \rangle_{\text{tr}} + \bar{R}\langle J' \rangle_{\text{ref}}. \tag{29}$$

Учитывая выражения (24), (26), (27) и (29) и полагая, что

$$\langle J' \rangle_{\text{inc}} = v_0 \tau_d, \tag{30}$$

это тождество запишем в виде

$$\tau_d = \bar{T}\tau_{\text{tun}}^{(0)} \frac{\langle v \rangle_{\text{tr}}}{v_a} + \bar{R}\bar{\tau}_{\text{ref}} \frac{\langle -v \rangle_{\text{ref}}}{v_0}, \tag{31}$$

где $\bar{\tau} = \frac{1}{2}(\tau_{\text{ref}}^{(-)} + \tau_{\text{ref}}^{(+)})$, $v_0 = m^{-1}\hbar k_0$.

Как видим, соотношение (31) отличается от (28). И только в частном случае, для бесконечно узких в k-пространстве ГП и симметричных барьеров, оно принимает тот же вид, что и (28) —

$$\tau_d = T(k_0)\tau_{\text{tun}}^{(0)} + R(k_0)\tau_{\text{ref}}^{(0)}. \tag{32}$$

В этом случае скорости частиц в обоих каналах рассеяния одинаковы. Таким образом, если вводить время туннелирования, описывающее оба канала рассеяния одновременно, то это нужно делать, на наш взгляд, согласно выражениям (30), (31).

В заключение отметим, что в дальнейшем предполагается с помощью полученных выражений численно исследовать параметры туннелирования различных пакетов. В частности, предполагается изучить свойства гауссовых волновых пакетов различной степени локализации в x-пространстве.

Список литературы

[1] E.H. Hauge, J.P. Falck, T.A. Fjeldly. Phys. Rev. B, **36**, 4203 (1987).
[2] N.A. Teranishi, A.M. Kriman, D.K. Ferry. Superlatt. Microstr., **3**, 509 (1987).
[3] W. Jaworski, D.M. Wardlaw. Phys. Rev. A, **37**, 2843 (1988).
[4] C.R. Leavens, G.C. Aers. Phys. Rev. B, **39**, 1202 (1989).
[5] R. Landauer, Th. Martin. Sol. St. Commun., **84**, 115 (1992).
[6] E.H. Hauge, J.A. Stovneng. Rev. Mod. Phys., **61**, 917 (1989).
[7] R. Landauer, Th. Martin. Rev. Mod. Phys., **66**, 217 (1994).
[8] A.M. Steinberg. Phys. Rev. Lett., **74**, 2405 (1995).
[9] Н.Л. Чуприков. ФТП, **26**, 2040 (1992).
[10] Н.Л. Чуприков. ФТП, **27**, 799 (1993).
[11] D.H. Kobe, V.C. Aguillera-Navarro. Phys. Rev. A, **50**, 933 (1994).

Редактор Л.В. Шаронова

Times for a particle scattering by one-dimensional potential barriers

N.L. Chuprikov

Siberian Physicotechnical Institute,
634050 Tomsk, Russia

Abstract In the framework of the wave-packet analysis, tunneling times for a particle, of which the initial state is described with the general-form wave packet, are determined. It is shown that "nonconformity" of the physical significance of the results of the wave-packet transport computer modeling is induced by an improper interpretation of the wave-packet approach. The wave-packet tunneling times observed in the numerical "experiment" are not at all those for a particle.