

Роль пространственной локализации частицы в процессе туннелирования

© Н.Л. Чуприков

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

(Получена 4 июля 1996 г. Принята к печати 14 ноября 1996 г.)

Теоретически исследованы коэффициент прохождения и времена туннелирования частиц, описываемых гауссовыми волновыми пакетами конечной ширины. Рассчитаны средние импульсы частиц в случае прохождения и отражения. Показано, что параметры туннелирования сильно зависят от степени пространственной локализации частиц.

Введение

Последние исследования показали, что проблема туннелирования не столь тривиальна, как это казалось вначале, даже в своей простейшей постановке. Уже в рамках одномерной одночастичной модели камнем преткновения оказался вопрос, об определении временных характеристик туннелирования [1,2]. Можно сказать, что в настоящее время ясное понимание процесса туннелирования достигнуто лишь для частиц, импульс которых задан достаточно точно. Предполагается, что такие частицы описываются волновыми пакетами, широкими по сравнению с барьерными структурами, в которых происходит туннелирование. Большинство исследователей (см. обзор [1]) сходятся на том, что динамика частиц в барьерной области характеризуется в этом случае "фазовым" временем прохождения.

Совершенно иная ситуация имеет место для частиц, которые описываются волновыми пакетами произвольной ширины. Здесь нет единого мнения (см. [1,2]) ни в том, как правильно определять времена туннелирования, ни даже в том, как правильно интерпретировать некоторые свойства динамики волновых пакетов в одномерных структурах, наблюдавшиеся при численном моделировании. Сюда относятся такие эффекты, как изменение среднего импульса волновых пакетов в процессе рассеяния, а также "преждевременное" (т.е. с "нарушением" принципа причинности) появление прошедшего пакета по другую сторону барьера.

Анализ, проведенный в работе [3], показал, что наблюдаемое поведение волновых пакетов выглядит как нефизическое в результате неверной трактовки квантово-механического описания процесса туннелирования. Действительно, обычно (явно [4,5] или неявно [2]) при оценке времен туннелирования частицы положения центров масс (т.е. средние значения координаты x) прошедшего и отраженного пакетов сравниваются по отдельности с соответствующей характеристикой падающего пакета. Однако такая процедура не имеет физического смысла, поскольку все три пакета описывают разные совокупности измерений. Детально этот вопрос рассмотрен в работе [3], где мы предложили новое определение времен

туннелирования для частиц, описываемых волновыми пакетами общего вида.

Данная статья является по существу продолжением работы [3]. Здесь мы исследуем численно параметры туннелирования частицы (коэффициент прохождения, средний импульс, а также определенные в [3] времена туннелирования), начальное состояние которой описывается гауссовым волновым пакетом

$$\psi_{\text{inc}}(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) (i(kx - E(k)t/\hbar)) dk, \quad (1)$$

где

$$A(k) = \exp(-l_0^2(k - k_0)^2);$$

c — нормировочная константа; l_0 — ширина пакета; k_0 — среднее волновое число; $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. В соответствии с [3] здесь предполагается, что левая граница барьера расположена достаточно далеко справа от начала координат, где находится в начальный момент времени максимум падающего волнового пакета.

Пусть $T(k)$ и $J(k)$ — коэффициент прохождения и фаза, характеризующие туннелирование отдельной волны с заданным значением волнового числа k (см. [6]). Тогда, согласно [3], время прохождения частицы через барьерную область, τ_{tr} , запишется в виде

$$\tau_{tr} = \frac{m \langle J' \rangle_{tr}}{\hbar \langle k \rangle_{tr}}. \quad (2)$$

Соответствующее время отражения, τ_{ref} , если ограничиться рассмотрением симметричных барьеров, определяется выражением

$$\tau_{ref} = \frac{m \langle J' \rangle_{ref}}{\hbar \langle -k \rangle_{ref}}. \quad (3)$$

Здесь и далее знак $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по прошедшему (tr), отраженному (ref) или падающему (inc) волновым пакетам (см. [3]); штрихом обозначена производная по k . Коэффициент прохождения частицы \bar{T} , определяется (см. там же) по формуле $\bar{T} = \langle T(k) \rangle_{inc}$.

Все вычисления мы проводили для безразмерных величин. Причем в качестве основной единицы измерения, d ,

в случае неперриодических структур выбиралась ширина барьерной структуры, а в случае периодических структур — ширина одного периода. Формулы, связывающие размерные и безразмерные (обозначены волной сверху) величины, запишем в виде

$$\lambda_0 = \tilde{\lambda}_0 d, \quad l_0 = \tilde{l}_0 d, \quad V = \frac{\hbar^2}{2md^2} \tilde{V}, \quad t = \frac{md^2}{\pi \hbar} \tilde{t},$$

где V — потенциал, t — время, $\lambda_0 = 2\pi/k_0$.

Прямоугольные барьеры

Основные закономерности изменения параметров туннелирования с ростом степени локализации частицы продемонстрированы на примере прямоугольных барьеров, для которых $\tilde{V} = 30$, $\tilde{\lambda} = 5$. Прежде всего заметим, что для любых барьеров при $w = 0$ ($w = 1/\tilde{l}_0$) все параметры туннелирования частицы совпадают численно с соответствующими параметрами для отдельной волны. В частности, времена туннелирования (2), (3) совпадают с фазовыми временами. Однако при $w \neq 0$, когда волновой пакет, описывающий частицу, имеет в x -пространстве конечную ширину, характер рассеяния частицы сильно изменяется. С ростом w в спектре волнового пакета увеличивается доля гармоник, для которых барьер прозрачен. Это приводит к росту коэффициента прохождения частицы (рис. 1). Причем наиболее быстрый рост наблюдается в области $0 \leq \log(w) \leq 2$. Для сложных многобарьерных структур, когда вблизи E_0 ($E_0 = E(k_0)$) имеются одноволновые резонансы, поведение $\tilde{T}(w)$ в этой области может быть немонотонным. Однако в любом случае при $w \rightarrow \infty$ независимо от k_0 и формы барьера $\tilde{T} \rightarrow 1$ для частиц, которые в начальный момент времени локализованы в точке, любой барьер прозрачен.

Характерной особенностью туннелирования частиц, описываемых волновыми пакетами конечной ширины, является то, что средние импульсы падающего, прошедшего и отраженного пакетов отличаются друг от

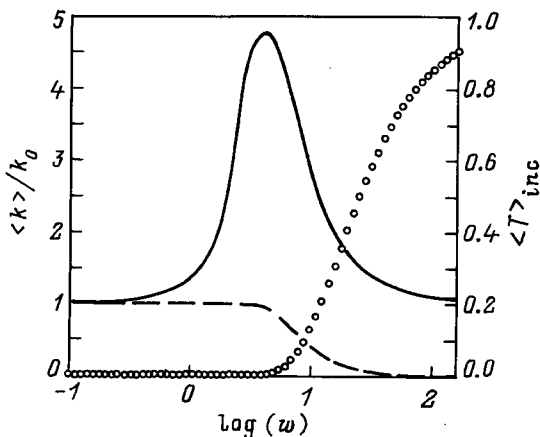


Рис. 1. Коэффициент прохождения (точки), а также $\langle k \rangle_{tr}/k_0$ (сплошная кривая) и $\langle k \rangle_{ref}/k_0$ (штриховая) для прямоугольных барьеров высотой $\tilde{V} = 30$, $\tilde{\lambda}_0 = 5$.

друга. Однако, как уже отмечалось (см. [3]), это вовсе не означает, что частица ускоряется или замедляется потенциальным барьером (хотя возможна и такая интерпретация [2]). Очевидно, при рассеянии на статическом потенциальном барьере импульс частицы не должен изменяться. В квантово-механическом описании (которое по своей сути относится ко всей совокупности измерений, включающей оба возможных варианта рассеяния) это свойство отображается в том, что средние значения импульса по начальному (падающий волновой пакет) и конечному (прошедший плюс отраженный волновой пакет) состояниям одинаковы. Таким образом, различие средних импульсов прошедшего и отраженного волновых пакетов указывает лишь на то, что средний импульс частицы по каждой (из двух) серии измерений разный. Причем в каждой серии в отдельности средний импульс частицы до и после рассеяния одинаков (см. [3]). На рис. 1 для исследуемых прямоугольных барьеров показано отношение средних импульсов обоих пакетов к импульсу падающего пакета как функция параметра w . Как видно из рисунка, для частиц с точно заданным в начальный момент времени импульсом или координатой средние импульсы падающего и прошедшего пакетов совпадают. В первом случае это обусловлено тем, что падающий пакет состоит фактически из одной гармоники. Во втором — тем, что частица проходит через барьер не отражаясь (см. выше). (Здесь нужно иметь в виду, что если в первом случае волновой пакет не меняет при рассеянии свою форму, то во втором — прошедший пакет при достаточно больших временах распадается на счетное множество (ансамбль) волновых пакетов с одним максимумом, движущихся с разными скоростями). В интервале $0 \leq \log(w) \leq 2$ реализуется ситуация, когда доли гармоник в спектре волнового пакета, для которых барьер прозрачен и непрозрачен, одинаковы. Форма волнового пакета в этом случае искажается при рассеянии наиболее сильно, а импульс прошедшего пакета максимально превышает импульс падающего пакета. Отраженный пакет в этой области замедляется (см. [3]). В общем случае, когда имеются резонансы вблизи E_0 , зависимость средних импульсов от w для обоих пакетов оказывается более сложной. В частности, импульс прошедшего пакета может быть меньше импульса отраженного.

Теперь обратим внимание на величины $\langle J' \rangle_{tr}$ и $\langle J' \rangle_{ref}$, стоящие в выражениях (2) и (3) для времен туннелирования частицы. Очевидно их можно рассматривать в качестве эффективных ширин барьера для частицы в соответствующей серии измерений. Из рис. 2 видно, что обе величины одинаковы, если импульс частиц задан достаточно точно. Во всех остальных случаях они разные. В пределе при $w \rightarrow \infty$ эффективная ширина барьера для проходящей частицы (напомним, что частица в этом случае проходит через барьер стопроцентно) равна ширине барьера d . Частицы, первоначально локализованные в точке, проходят барьерную область, не "замечая" барьер, поскольку имеют бесконечную среднюю энергию.

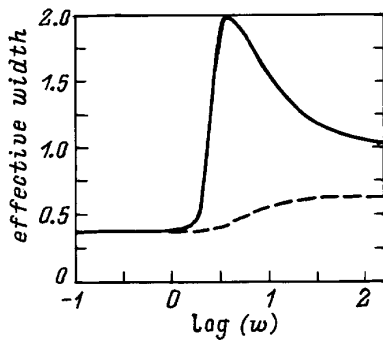


Рис. 2. Эффективная ширина барьера (J') для проходящей (сплошная кривая) и отражающейся (штриховая) частицы. Параметры барьера и частицы те же, что и для рис. 1.

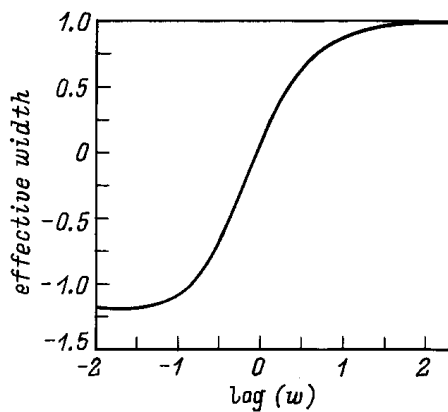


Рис. 3. $(J')_{tr}$ для прямоугольной ямы $\tilde{V} = -1$; $\tilde{\lambda}_0 = 5$.

Известно, что фазовое время туннелирования может быть отрицательным по величине. В этом случае отрицательна и соответствующая эффективная ширина барьера. Например, это имеет место для частицы с $\tilde{\lambda}_0 = 5$, проходящей через прямоугольную потенциальную яму глубиной $\tilde{V} = -1$ (см. рис. 3). На первый взгляд, этот результат нефизичен, поскольку отрицательные времена указывают на нарушение принципа причинности (заметим сразу, что данный случай "нарушения" принципа причинности принципиально отличается от рассмотренного нами в работе [3], имеющего место только для пакетов с $w \neq 0$). Однако нужно иметь в виду, что в данной случае ширина ямы много меньше ширины волнового пакета. При таких условиях туннелирование происходит существенно нелокальным образом. Кроме того, здесь очень важно помнить, что предложенный в [3] формализм позволяет определять время прохождения только для таких участков (включающих барьерную область), границы которых удалены от барьера на расстоянии, значительно превышающие ширину волнового пакета. Время туннелирования барьерного участка определяется в [3] как вклад барьерной области в полное время прохождения таких участков. В рассматриваемом случае зонды для измерения времени туннелирования

должны располагаться от барьера на расстоянии, значительно превышающем его ширину. Если же в начальный момент времени частица описывается гауссовым пакетом, ширина которого много меньше ширины барьера, то зонды могут располагаться уже в непосредственной близости к границам барьера. Если и в этом случае время (3) оказалось бы отрицательным, то тогда были бы основания говорить о нарушении принципа причинности. Однако расчеты показывают (см. рис. 3), что с ростом w эффективная ширина барьера для проходящей частицы становится положительной, а в пределе $w \rightarrow \infty$ равна d .

Периодические структуры

Особый интерес представляет исследование туннелирования частицы через ограниченные и полуограниченные (сверх)решетки. Ранее [7,8] этот вопрос был рассмотрен для частиц с достаточно точно определенным импульсом. Было показано, что в этом случае все резонансы для периодических структур расположены в энергетических областях (областях пропускания), которые являются разрешенными зонами для соответствующих неограниченных структур. В работе [7] было также показано, что внутри каждой из этих областей графики энергетической зависимости коэффициента прохождения и фазового времени прохождения одного периода расположены, при достаточно большом числе периодов решетки, между двумя огибающими. Там же был найден явный вид обеих пар огибающих. В полуограниченных решетках, когда число периодов бесконечно, обе функции имеют почти всюду в областях пропускания неограниченные производные по энергии.

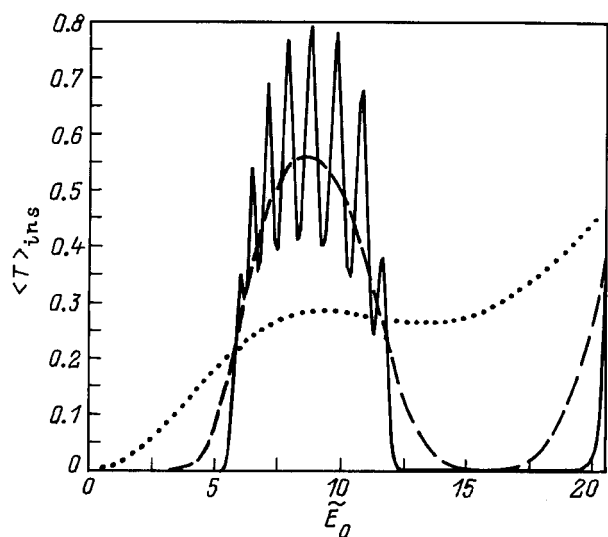


Рис. 4. Зависимость коэффициента прохождения от параметра \tilde{E}_0 (см. текст) для периодической структуры, состоящей из 10 прямоугольных барьеров высотой 13 и шириной 0.5, ширина ям — 0.5; \tilde{l}_0 равно 2 (сплошная кривая). 0.28 (штриховая) и 0.07 (точечная).

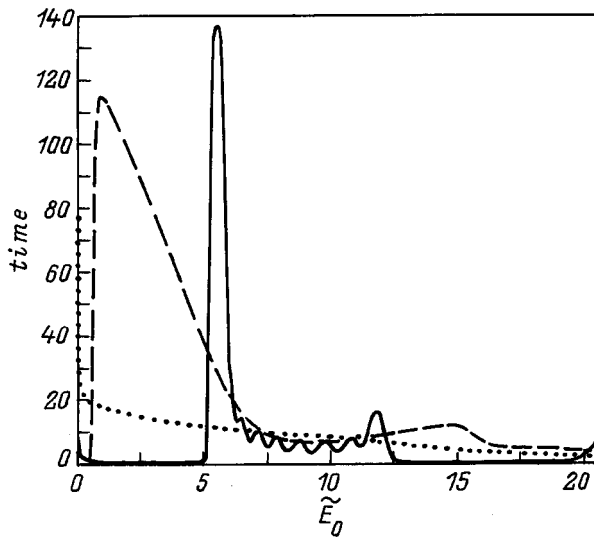


Рис. 5. Время туннелирования $\tilde{\tau}_{tr}$, приходящееся на один период, для периодической структуры (см. рис. 4).

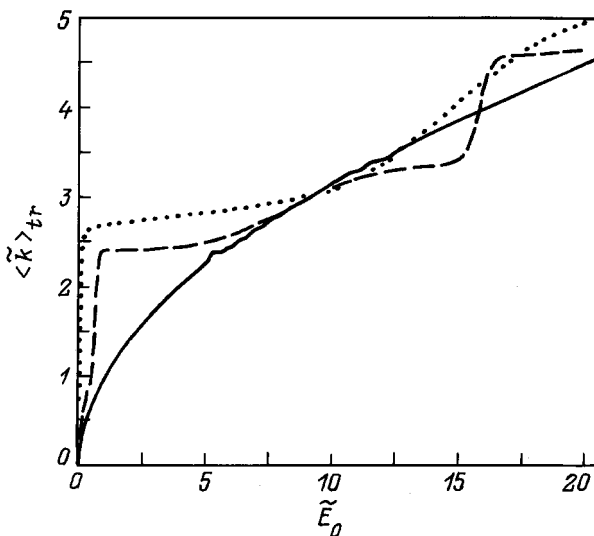


Рис. 6. $\langle \tilde{k} \rangle_{tr}$ для периодической структуры (см. рис. 4).

Для понимания столь необычных свойств важно помнить следующее. Когда речь идет о туннелировании частиц с хорошо определенным импульсом, фактически предполагается, что ширина соответствующих гауссовых волновых пакетов в x -пространстве заведомо больше ширины исследуемой периодической структуры. В этом случае роль обеих границ структуры существенна при любом как угодно большом (но конечном) числе ее периодов.

Как происходит туннелирование частицы через решетки, если ее начальное состояние описывается волновым пакетом произвольной ширины? Во-первых, здесь нужно иметь в виду, что при $w \neq 0$ решение уравнения Шредингера уже не удовлетворяет теореме Флоке в области периодичности потенциала. Таким образом, локализация

частицы приводит к разрушению зонного характера энергетического спектра (деления энергетической шкалы на области прозрачности и непрозрачности). Мы провели расчеты для структур, состоящих из 10 прямоугольных барьеров шириной 0.5 (очевидно расстояние между барьерами также равно 0.5) и высотой 13. На рис. 4 и 5 представлена зависимость коэффициента прохождения и времени прохождения одного периода от параметра \tilde{E}_0 для этих значений \tilde{l}_0 : 2, 0.28 и 0.07. Расчеты, которые проводились и для больших значений \tilde{l}_0 , показали, что наиболее чувствительны к изменению \tilde{E}_0 огибающие обеих функций в областях прозрачности. С уменьшением \tilde{l}_0 в интервале $N \leq \tilde{l}_0 \leq 1$ (N — число периодов) соответствующие пары огибающих сближаются друг с другом, а затем сливаются в одну кривую. При дальнейшем уменьшении параметра \tilde{l}_0 коэффициент прохождения уже заметно отличен от нуля и в областях непрозрачности. Причем наиболее сильно изменяется здесь временная характеристика. Если для $\tilde{l}_0 \gg 1$ время прохождения одного периода в области непрозрачности для таких структур практически равно нулю, то, как видно из рисунка, для локализованных частиц эта характеристика увеличивается настолько, что может даже превысить соответствующее время туннелирования в области прозрачности. Известная проблема "сверхсветового" распространения широких (в x -пространстве) волновых пакетов через (сверх)решетки в областях непрозрачности (см., например, [2]) не возникает для частиц, неопределенность начального положения которых не превышает ширину одного периода решетки.

Коротко остановимся на зависимости $\langle \tilde{k} \rangle_{tr}$ от \tilde{E}_0 (см. рис. 6). Как видно из рисунка, заметное отклонение этой величины от \tilde{k}_0 наблюдается в области непрозрачности, когда $\tilde{l}_0 < 1$. При $\tilde{l}_0 = 2$ средний импульс проходящих (а следовательно, и отражающихся) частиц практически совпадает со средним импульсом падающих частиц. Небольшие отклонения наблюдаются лишь вблизи границ областей прозрачности.

В заключение отметим один момент. Известно, что волновые пакеты с течением времени расплываются. Поэтому нелишне подчеркнуть, что в рамках формализма [3] параметры туннелирования зависят от ширины пакета в начальный момент времени.

Список литературы

- [1] E.H. Hauge, J.A. Stovng. Rev. Mod. Phys., **61**, 917 (1989).
- [2] R. Landauer, Th. Martin. Rev. Mod. Phys., **66**, 217 (1994).
- [3] Н.Л. Чуприков. ФТП, **3**, 443 (1996).
- [4] E.H. Hauge, J.P. Falck, T.A. Fjeldly. Phys. Rev. B, **36**, 4203 (1987).
- [5] C.R. Leavens, G.C. Aers. Phys. Rev. B, **39**, 1202 (1989).
- [6] Н.Л. Чуприков. ФТП, **26**, 2040 (1992).
- [7] Н.Л. Чуприков. ФТП, **30**, 443 (1996).
- [8] Xue-Wen Liu, A.P. Stamp. Phys. Rev. B, **50**, 1588 (1994).

Редактор В.В. Чалдышев

The role of the space localization of a particle in the tunneling process

N.L. Chuprikov

Siberian Physical Technical Institute at Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The transmission coefficient and tunneling times of particles that are described by the Gaussian wave packet have been investigated theoretically. Average momenta of a particle in the case of transmission and reflection are calculated. It was shown that the tunneling parameters strongly depend on the degree of space localization of particles.