УДК 530.145

ВЫБОР НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ В ОПРЕДЕЛЕНИИ ВРЕМЕНИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ

А. К. Зайченко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

Обоснована необходимость изменения начальных условий в определении времени туннелирования Ольховского - Реками. Предложены новые начальные условия, адекватно учитывающие необратимость расплывания волновых пакетов. Выражение для времени туннелирования с новыми начальными условиями приведено к виду, удобному для проведения и контроля точности вычислений.

Введение

Проблема времени туннелирования частиц интенсивно исследуется на протяжении нескольких десятилетий, но окончательного решения ее все еще нет. К настоящему времени предложено много различных определений времени туннелирования. Они детально рассмотрены в обзорах [1 - 5]. Согласно [6], наиболее обоснованными определениями, предложенными в рамках стандартной квантовой механики, являются определение Ольховского - Реками (ОР) [2] и близкое к нему определение, предложенное авторами работы [7]. В определении ОР движение частицы к барьеру, под барьером и после барьера описывается соответствующими волновыми пакетами. В этой работе показано, что при начальных условиях, используемых в [2], налетающий волновой пакет по мере приближения к барьеру должен сжиматься, что не соответствует действительности. Предложены новые начальные условия, при которых налетающий волновой пакет с течением времени только расширяется. Получен также ряд соотношений, позволяющих упростить вычисление времени туннелирования и контролировать его точность.

Определение Ольховского - Реками

Рассмотрим, для определенности, туннелирование частицы с массой m и энергией E вдоль оси x через прямоугольный потенциальный барьер высотой $U_0 > E$, локализованный в интервале $[0, a]$. Стационарная волновая функция частицы в этом случае известна (см., например, [8]). В [2] из стационарных волновых функций частиц $f(k, x)$ с различными значениями волнового числа $k = (2mE)^{1/2} / \hbar$ формируется волновой пакет $\psi(x, t)$, по нему определяется плотность потока вероятности (ток) $j(x, t)$, а по значениям тока в точках $x = a$ и $x = 0$ находится время туннелирования.

Волновой пакет обычно представляют в виде суперпозиции стационарных волновых функций

$$\psi(x,t) = \int_0^\infty g_0(k) f(k,x) \exp(-iEt/\hbar) dk \tag{1}$$

с весами

$$g_0(k) = C \exp\{-[(k-k_0)/2\Delta k]^2\}, \tag{2}$$

где $C = [(2\pi)^{3/2} \Delta k]^{-1/2}$ – коэффициент нормировки. В [2] учитывается только подбарьерная часть пакета. В этом случае интегрирование по k в формуле (1) должно осуществляться в пределах от 0 до $(2mU_0)^{1/2} / \hbar$ [9].

Ток в [2] определяется стандартным соотношением

$$j(x,t) = \mathrm{Re}[(i\hbar/2m)\psi(x,t)\partial\psi^*(x,t)/\partial x], \tag{3}$$

где $\psi(x,t)$ - волновой пакет (1). Этот ток можно рассматривать как функцию распределения времени прохождения частицы через точку x [9]. Среднее значение времени прохождения частицы через точку x в этом случае равно

$$t_x = \int_{-\infty}^{\infty} t\, j(x,t)dt \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} j(x,t)dt\,. \tag{4}$$

В соответствии с этим время туннелирования τ в [2] определяется разностью

$$\tau = t_a - t_0\,, \tag{5}$$

где t_a – среднее значение времени прохождения частицы через точку $x = a$ (среднее значение времени выхода частицы из барьера), а t_0 – среднее значение времени прохождения частицы через точку $x = 0$ (среднее значение времени входа частицы в барьер).

Выбор начальных условий

Если в качестве $g_0(k)$ в формуле (1) выбрать гауссиан (2), то волновой пакет, отвечающий падающим волнам $f_{in} = \exp(ikx)$, примет вид

$$\psi_{in}(x,t) = C\exp\left[-\frac{(x-vt)^2}{2s_{in}} + ik_0x - iE_0t/\hbar\right]\int_0^{\infty}\exp\left\{-\frac{s_{in}}{2}\left[k-k_0-i\frac{x-vt}{s_{in}}\right]^2\right\}dk, \tag{6}$$

где

$$s_{in} = s_0 + i\hbar t/m\,, \tag{7}$$

$v = \hbar k_0/m$, $E_0 = \hbar^2k_0^2/2m$, а $s_0 = (\Delta k)^{-2}/2$. Интеграл, входящий в (6), равен $(2\pi/s_{in})^{1/2}$, если вклад в (2) от области $k < 0$ можно считать пренебрежимо малым [10]. В этом случае

$$\psi_{in}(x,t) \cong C_0 s_{in}^{-1/2}\exp\left[-\frac{(x-vt)^2}{2s_{in}} + ik_0x - iE_0t/\hbar\right], \tag{8}$$

где $C_0 = (s_0/\pi)^{1/4}$. Центр определенного таким образом волнового пакета выходит из точки $x = -\infty$ в момент времени $t = -\infty$ и в отсутствие барьера приходит в точку $x = 0$ в момент времени $t = 0$.

Волновому пакету (8) соответствует плотность вероятности

$$|\psi_{in}(x,t)|^2 = C_0^2[s_0^2 + (\hbar t/m)^2]^{-1/2}\exp\left\{-s_0(x-vt)^2/[s_0^2 + (\hbar t/m)^2]\right\}. \tag{9}$$

Из формул (7) и (9) видно, что параметр ширины распределения плотности вероятности $s_{in}(t) = [s_0^2 + (\hbar t/m)^2]^{1/2}$ становится наименьшим в момент времени $t = 0$, поэтому волновой пакет $\psi_{in}(x,\,t)$ по мере приближения к точке $x = 0$ будет сжиматься, тогда как в действительности он может только расплываться (см., например, [11]). Следовательно, необходимо так изменить начальные условия, накладываемые на волновой пакет $\psi_{in}(x,t)$, чтобы центр его в момент времени $t = 0$ выходил из точки $x = x_0$, $x_0 < 0$ и в отсутствие барьера приходил в точку $x = 0$ в момент времени $t = -x_0/v$. Для этого распределение $g_0(k)$ в формуле (1) необходимо заменить распределением

$$g(k) = g_0(k)\exp[-i(k-k_0)x_0]. \tag{10}$$

Действительно, после такой замены волновой пакет $\psi_{in}(x,t)$ примет вид

$$\psi_{in}(x,t) \cong C_0 s_{in}^{-1/2} \exp\left\{-\frac{[x-(x_0+vt)]^2}{2s_{in}} + ik_0 x - iE_0 t/\hbar\right\}. \tag{11}$$

Центр определенного таким образом волнового пакета выходит из точки $x = x_0$ в момент времени $t = 0$, движется, расплываясь, вдоль оси x слева направо со скоростью v и в отсутствие барьера приходит в точку $x = 0$ в момент времени $t_0 = -x_0/v$.

После такой замены весового множителя в формуле (1) интегрирование по времени в формуле (4) следует проводить в пределах от нуля до ∞. Интегрирование по k в формуле (1) также следует проводить в пределах от 0 до ∞, используя при $k > (2mU_0)^{1/2}/\hbar$ аналитическое продолжение волновой функции $f(k,x)$ в надбарьерную область. Точка x_0 должна выбираться достаточно далеко от барьера, чтобы перекрытием волнового пакета $\psi_{in}(x,\ t)$ с барьером в момент времени $t = 0$ можно было пренебречь.

Вычисление момента времени t_a

В соответствии с новыми начальными условиями

$$t_a = \int_0^\infty t\, j(a,t)dt \Big/ \int_0^\infty j(a,t)dt. \tag{12}$$

Ток $j(a,t)$ в этой формуле выражается через волновой пакет

$$\psi(a,t) = \int_0^\infty g(k) f_T(ka)\exp(-iEt/\hbar)dk, \tag{13}$$

где $f_T(k,a)$ - значение стационарной волновой функции $f(k,x)$ в точке $x = a$, соответствующее прошедшей волне. Используя известное выражение для амплитуды прошедшей волны (см., например, [2]), $f_T(k,\ a)$ можно представить в виде

$$f_T(k,a) = \begin{cases} 2ik\kappa / D_<, & E < U_0, \\ 2ikq / D_>, & E > U_0, \end{cases} \tag{14}$$

где $\kappa = [2m(U_0 - E)]^{1/2}/\hbar$, $q = [2m(E-U_0)]^{1/2}/\hbar$,

$$\begin{aligned} D_< &= (k^2 - \kappa^2)sh(\kappa a) + 2ik\kappa\, ch(\kappa a), \\ D_> &= (k^2 + q^2)\sin(qa) + 2ikq\cos(qa). \end{aligned} \tag{15}$$

Рассмотрим нормировочный интеграл в формуле (12)

$$N_a = \int_0^\infty j(a,t)dt. \tag{16}$$

Из формул (3), (13) и (14) следует, что

$$N_a = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Re}\left\{\int_0^\infty dk g(k) f_T(k,a)\int_0^\infty dk'k'g(k')f_T(k',a)\int_0^\infty \exp\left[-i\frac{\hbar}{2m}(k^2 - k'^2)t\right]dt\right\}. \tag{17}$$

С учетом формул (10), (14) и (15) это выражение выглядит довольно сложно, однако его можно значительно упростить. Если точка x_0 выбрана достаточно далеко слева от барьера, вклад тока $j(a,t)$ в интеграл (16) при $t \le 0$ будет пренебрежимо мал. Нижний предел интегрирования по t в (17) в этом случае можно перенести в $-\infty$. Тогда интегрирование по времени даст $2\pi(m/\hbar k)\delta(k-k')$, и интеграл (17) примет вид

$$N_a = 2\pi \int_0^\infty g_0^2(k) \left| f_T(k,a) \right|^2 dk, \tag{18}$$

где

$$\left| f_T(k,a) \right|^2 = \begin{Bmatrix} 4k^2\kappa^2/(4k^2\kappa^2 + V_0^2 sh^2(\kappa a) \\ 4k^2q^2/(4k^2q^2 + V_0^2 \sin^2(qa)) \end{Bmatrix}, \quad \begin{matrix} E < U_0, \\ E > U_0. \end{matrix} \tag{19}$$

Перейдем теперь к интегралу

$$I_a = \int_0^\infty t\, j(a,t)dt . \tag{20}$$

Из формул (16), (17) и (20) следует:

$$I_a = \frac{\hbar}{m} \mathrm{Re} \left\{ \int_0^\infty dk g(k) f_T(k,a) \int_0^\infty dk g(k') f_T(k',a) \int_0^\infty k't \exp\left[-i \frac{\hbar}{2m}(k^2 - k'^2)t \right] dt \right\}.$$

Заменив умножение на $k't$ в последнем интеграле дифференцированием экспоненты по k' и проинтегрировав затем по частям по k', получим

$$I_a = \frac{1}{2} \mathrm{Re} \left\{ i \int_0^\infty dk g(k) f_T(k,a) \int_0^\infty dk' \frac{d}{dk'} \left[g^*(k') f_T^*(k',a) \right] \int_0^\infty \exp\left[-i \frac{\hbar}{2m}(k^2 - k'^2)t \right] dt \right\}.$$

Интегрирование по времени в этой формуле осуществляется аналогично интегрированию в (17). Результат имеет вид

$$I_a = \pi \frac{\hbar}{m} \mathrm{Re} \left\{ i \int_0^\infty \frac{1}{k} G(k) f_T(k,a) \frac{d}{dk} \left[G^*(k) f_T^*(k,a) \right] dk \right\}.$$

Отсюда, после дифференцирования по k, получаем выражение

$$I_a = 2\pi \frac{m}{\hbar} \int_0^\infty G_0^2(k) \frac{1}{k} \left\{ f_1(k,a) f_2'(k,a) - f_2(k,a) f_1'(k,a) - x_0 \left| f_T(k,a) \right|^2 \right\} dk , \tag{21}$$

где $f_1(k,a) \equiv \mathrm{Re}\, f_T(k,a)$, $f_2(k,a) \equiv \mathrm{Im}\, f_T(k,a)$. Продифференцировав (14) по k, нетрудно убедиться, что

$$f_1 f_2' - f_1' f_2 = \begin{cases} -8k^2\kappa \left[k^2(k^2 - \kappa^2)\kappa a - V_0^2 ch(\kappa a) sh(\kappa a) \right] / \left[4k^2\kappa^2 + V_0^2 sh^2(\kappa a) \right]^2, & E < U_0, \\ 8k^2 q \left[k^2(k^2 + q^2) qa - V_0^2 \cos(qa) \sin(qa) \right] / \left[4k^2 q^2 + V_0^2 \sin^2(qa) \right]^2, & E > U_0. \end{cases} \tag{22}$$

Из формул (18) и (21) следует, что при подходящем выборе значения x_0 момент времени t_a определяется достаточно простым выражением

$$t_a = \frac{m}{\hbar}\int_0^\infty G_0^2 \frac{1}{k}\left[f_1 f_2' - f_2 f_1' - x_0 |f_T|^2\right] dk \Big/ \int_0^\infty G_0^2 |f_T|^2 dk$$

и формулами (19) и (22).

Вычисление момента времени t_0

В соответствии с новыми начальными условиями

$$t_0 = \int_0^\infty t j_+(0,t)dt \Big/ \int_0^\infty j_+(0,t)dt\,, \qquad (23)$$

где $j_+(0,t)$ - положительное значение тока $j(0,t)$, соответствующее частицам, движущимся в точке $x=0$ слева направо (входящим в барьер). Ток $j_+(0,t)$ в этой формуле выражается через волновой пакет

$$\psi(0,t) = \int_0^\infty g(k)\left[1 + A_R(k)\right]\exp(-iEt/\hbar)dk\,,$$

где A_R – амплитуда отраженной волны

$$A_R(k) = \begin{cases} V_0 sh(\kappa a)/D_<, & E < U_0, \\ V_0 \sin(qa)/D_>, & E > U_0. \end{cases}$$

Так как при определении момента времени t_0 учитываются только положительные значения тока, интегралы $I_+ = \int_{-\infty}^\infty t j_+(0,t)dt$ и $N_+ = \int_{-\infty}^\infty j_+(0,t)dt$ в (21) приходится находить численно. Для контроля точности вычислений удобно использовать следующий метод.

Для определения знака тока он должен быть вычислен. Это позволяет без больших дополнительных усилий наряду с интегралами I_+ и N_+ вычислять и интегралы $I_- = \int_{-\infty}^\infty t j_-(0,t)dt$ и $N_- = \int_{-\infty}^\infty j_-(0,t)dt$, где $j_-(0,t)$ - отрицательное значение тока $j(0,t)$. Воспользуемся, далее, тем, что интегрирование уравнения непрерывности по области локализации барьера приводит к уравнению [12]

$$j(0,t) = j(a,t) + \frac{d}{dt}\int_0^a |\psi_B(x,t)|^2 dx\,, \qquad (24)$$

где

$$\psi_B(x,t) = \int_0^\infty g(k) f_B(k,x)\exp(-iEt/\hbar)dk\,, \qquad (25)$$

$f_B(k,x)$ - стационарная волновая функция частицы в области локализации барьера

$$f_B(k,x) = \begin{cases} A_< \exp(-\kappa a) + B_< \exp(\kappa a), & E < U_0, \\ A_> \exp(iqa) + A_> \exp(qa), & E > U_0, \end{cases} \qquad (26)$$

а амплитуды в (26) определяются соотношениями

$$A_< = k(k+i\kappa)\exp(\kappa a)/D_<\,, \qquad B_< = -k(k-i\kappa)\exp(-\kappa a)/D_<\,,$$

$$A_> = ik(k+q)\exp(-iqa)/D_>\,, \qquad B_> = -ik(k-q)\exp(iqa)/D_>\,.$$

Проинтегрировав уравнение (24) по времени в пределах от 0 до ∞, учитывая при этом, что при $t = 0$ и $t = \infty$ волновой пакет находится далеко от барьера, получим уравнение

$$N_+ + N_- = N_a .$$

Это уравнение можно использовать для контроля точности вычисления интеграла N_+.

Умножив (24) на t и проинтегрировав его затем по времени, получим уравнение

$$I_+ + I_- = I_a + I_p , \qquad (27)$$

где

$$I_p = \int_0^\infty dt \int_0^a |\psi_B(x,t)|^2 dx . \qquad (28)$$

Подставив формулу (25) в (28) и проинтегрировав затем по времени, найдем, что

$$I_p = 2\frac{m}{\hbar}\int_0^\infty dk g_0^2(k)\frac{1}{k}\int_0^a |f_B(k,x)|^2 dx . \qquad (29)$$

Подстановка формулы (26) в (29) и интегрирование по x приводят к выражению

$$I_p = 4\frac{m}{\hbar}\int_0^\infty dk g_0^2 \begin{cases} (k/\kappa)\left[(k^2+\kappa^2)sh(\kappa a)ch(\kappa a)-(k^2-\kappa^2)\kappa a\right]/D_<, & E<U_0, \\ (k/q)\left[(k^2+q^2)qa-(k^2-q^2)\sin(qa)\cos(qa)\right]/D_>, & E>U_0. \end{cases} \qquad (30)$$

Уравнения (27) и (30) позволяют контролировать точность вычисления интеграла I_+.

Заключение

В работе обоснована необходимость изменения начальных условий в определении времени туннелирования Ольховского - Реками. Предложены новые начальные условия, адекватно учитывающие необратимость расплывания волновых пакетов. При новых начальных условиях точка приготовления волнового пакета расположена на конечном расстоянии от барьера. В этом случае центр волнового пакета приходит к барьеру за конечный промежуток времени. В процессе движения волновой пакет расплывается, однако ширина его остается конечной. Предложенный в этой работе метод расчета времени туннелирования упрощает вычисления и позволяет контролировать их точность.

Определение Ольховского - Реками с новыми начальными условиями можно использовать для исследования времени туннелирования частиц и в том случае, когда барьер находится в диссипативной среде.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hauge E. H., Stovneng J. A.* Tunneling times: a critical review // Rev. Mod. Phys. - 1989. - Vol. 61. - P. 917.
2. *Olkhovsky V. S., Recami E.* Recent development in the time analysis of tunneling processes // Phys. Rep. - 1992. - Vol. 214. - P. 339.
3. *Landauer R., Martin Th.* Barrier interaction time in tunneling // Rev. Mod. Phys. - 1994. - Vol. 66. - P. 217.
4. *Olkhovsky V. S., Agresti A.* Developments in time analysis of particle and photon tunneling: Proc. of the Adriatico Research Conf. on Tunnelling and Its Implications (ICTP, Trieste, Italy, 30 July - 2 August, 1996). Trieste: World Sci., 1996. - P. 327.
5. *Olkhovsky V. S., Recami E., Jakiel J.* Unified time analysis of photon and particle tunneling. Preprint of the Abdus Salam int. centre for theor. phys. - To be published in Phys. Rep.
6. *Abolhasani M., Golshani M.* Tunneling times in theCopenhagen interpretation of quantum mechanics // Phys. Rev. - 2000. - Vol. A62, Third series, 012106. - 7 p.

7. *Muga J. G., Brouard S., Sala R.* // Phys. Letters. - 1992. - Vol. A167. - P. 24.
8. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* // Квантовая механика. - М.: Наука, 1963. - С. 103.
9. *Olkhovsky V. S., Recami.E., Raciti F., Zaichenko A. K.* More about tunneling times: the dwell time and the "Hartman Effect" // J. Phys. I (France). - 1995. - Vol. 5. - P. 1351.
10. *Ву Т. Ю., Омура Т.* // Квантовая теория рассеяния. - М.: Наука, 1969. - С. 35 - 36.
11. *Lamb W. E. Jr.* An operational interpretation of nonrelativistic quantum mechanics // Physics today. - 1969. - Vol. 22. - P. 23.
12. *Hauge E. H., Falk J. P., Fjeldly T. A.* Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers // Phys. Rev. - 1987. - Vol. B36. - P. 4203.

ВИБІР ПОЧАТКОВИХ УМОВ У ВИЗНАЧЕННІ ЧАСУ ТУНЕЛЮВАННЯ

О. К. Зайченко

Обгрунтовано необхідність зміни початкових умов у визначенні часу тунелювання Ольховського - Рекамі. Запропоновано нові початкові умови, які адекватно враховують незворотність розпливання хвильових пакетів. Вираз для часу тунелювання з новими початковими умовами приведено до вигляду, зручному для проведення та контролю точності обчислень.

SELECTION OF THE INITIAL CONDITIONS IN THE TUNNELING TIME DEFINITION

A. K. Zaichenko

The necessity of changing of the initial conditions in the Olkhovsky - Recami definition of the tunneling time is justified. The new initial conditions are proposed which adequately taking into account the irreversibility of the wave packets spreading. The expression for the tunneling time with the new initial conditions is reduced to the form which is convenient for the performing and controlling the accuracy of calculations.

Поступила в редакцию 09.02.04,
после доработки – 09.04.04.