

**ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ
В ПРОЦЕССЕ ТУННЕЛИРОВАНИЯ**

А. К. Зайченко

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

Исследовано изменение параметров волновых пакетов в процессе туннелирования.

Введение

При описании одномерного туннелирования частиц вдоль оси x волновой пакет (ВП) обычно представляют в виде суперпозиции (см., например, [1 - 4])

$$\psi(x, t) = \int_0^\infty g(k) f(k, x) \exp(-iEt/\hbar) dk \quad (1)$$

стационарных волновых функций $f(k, x)$, соответствующих частицам с волновым числом k , массой m и энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, с весами

$$g(k) = C \exp\left\{-\left[(k - k_0)/2\Delta k\right]^2\right\}, \quad (2)$$

где k_0 – среднее значение волнового числа частиц в пакете, Δk – параметр ширины пакета, а $C = [(2\pi)^{3/2} \Delta k]^{-1/2}$ – нормировочный множитель. Интеграл в формуле (1) находят численно.

В ряде работ (см., например, [5 - 10]) ВП в момент времени $t = 0$ задавался распределением

$$\psi(x, 0) = C_{in} \exp\left\{-\left[(x - x_0)/2\Delta x\right]^2 + ik_0 x_0\right\} \quad (3)$$

с центром в точке $x_0 < 0$ и с наименьшим значением произведения неопределенностей [11] $\Delta x \Delta k = 1/2$, а в последующие моменты времени определялся численным интегрированием нестационарного уравнения Шредингера.

Численное интегрирование дает только набор чисел, определяющих огибающую ВП в заданный момент времени. Для более детального описания эволюции ВП в процессе туннелирования и использования его при исследовании физических явлений, связанных с туннелированием, нужны явные выражения как для самого ВП, так и для параметров, определяющих амплитуду, положение центра и ширину ВП в различные моменты времени. Настоящая работа посвящена приближенно-аналитическому выводу этих выражений в простейшем случае туннелирования частиц через прямоугольный потенциальный барьер высотой U_0 , локализованный в интервале $[0, a]$, и исследованию с их помощью эволюции ВП в процессе туннелирования.

Приближенно-аналитическое представление волновых пакетов

В работе [12] было показано, что при описании туннелирования гауссиан (2) в ВП (1) следует заменить распределением

$$g(k) = C \exp\left\{-\left[(k - k_0)/2\Delta k\right]^2 - i(k - k_0)x_0\right\}, \quad (4)$$

где x_0 – точка приготовления (источник) ВП. Если точка x_0 выбрана достаточно далеко от барьера, чтобы взаимодействием ВП с барьером в момент времени $t = 0$ можно было пренебречь, то налетающий ВП принимает вид [12,13]

$$\psi_{in}(x, t) = C_{in} \exp\left[-\frac{(x - x_{in})^2}{2s_{in}} + ik_0 x - iE_0 t/\hbar\right], \quad (5)$$

где

$$C_{in} = C_0 s_{in}^{-1/2}, \quad s_{in} = s_0 + i\hbar t/m, \quad x_{in} = x_0 + vt, \quad (6)$$

$v = \hbar k_0/m$, $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$, а $s_0 = (\Delta k)^{-2}/2$. Центр этого ВП 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 $t_0 = -x_0/v$. При $t = 0$ ВП (5) сводится к распределению (3).

В процессе взаимодействия с барьером ВП, оставаясь целым, расплывается на составляющие [1, 14], которые рассматриваются как отраженный ВП слева от барьера, затухающая и возрастающая волны под барьером и прошедший ВП справа от барьера. При $t \rightarrow \infty$ остаются только отраженный и прошедший волновые пакеты, расходящиеся в противоположные стороны на больших расстояниях от барьера. Эти ВП можно найти следующим образом.

Используя известные выражения для стационарных волновых функций, отраженный ВП можно представить в виде

$$\psi_R(x, t) = \int_0^\infty g(k) A_R(k) \exp(-ikx - iEt/\hbar) dk, \quad (7)$$

а прошедший ВП – в виде

$$\psi_T(x, t) = \int_0^\infty g(k) A_T(k) \exp(ikx - iEt/\hbar) dk, \quad (8)$$

где $A_R(k)$ и $A_T(k)$ – амплитуды отраженной и прошедшей волн соответственно. При учете только подбарьерных составляющих ВП эти амплитуды равны (см., например, [2])

$$A_R(k) = V_0 \operatorname{sh}(qa) / d, \quad (9)$$

$$A_T(k) = 2ikq \exp(-ika) / d,$$

где $V_0 = 2mU_0/\hbar^2$, $q = [2m(U_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ и $d = (k^2 - q^2) \operatorname{sh}(qa) + 2ikq \operatorname{ch}(qa)$.

Из определений (9) следует, что амплитуды $A_R(k)$ и $A_T(k)$ – гладкие функции энергии. Представим их в виде

$$A_n = \exp(2i\delta_n(k)), \quad n = R, T. \quad (10)$$

Из формул (4) и (9) видно, что основной вклад в интегралы в формулах (7) и (8) дает область $k_0 - 2\Delta k \leq k \leq k_0 + 2\Delta k$. Будем считать, что сдвиги фаз δ_n в этой области достаточно хорошо аппроксимируются разложением

$$\delta_n(k) \cong \delta_n(k_0) + \delta'_n(k_0)(k - k_0) + \frac{1}{2} \delta''_n(k_0)(k - k_0)^2, \\ n = R, T$$

(здесь и далее штрих обозначает дифференцирование по k). Это разложение применимо, если $|\delta''_n| \Delta k \ll |\delta'_n|$. Интегрирование в формуле (7) в этом случае приводит к выражению

$$\psi_R(x, t) \cong C_R \exp\left[-\frac{(x - x_R)^2}{2s_R} - ik_0x - i\frac{E_0}{\hbar}t\right], \quad (11)$$

а интегрирование в формуле (8) – к выражению

$$\psi_T(x, t) \cong C_T \exp\left[-\frac{(x - x_T)^2}{2s_T} + ik_0x - i\frac{E_0}{\hbar}t\right], \quad (12)$$

где

$$C_R = C_0 A_R(k_0) s_R^{-1/2}, \quad x_R = -x_{in} + 2\delta'_R(k_0), \quad (13)$$

$$s_R = s_{in} - 2i\delta''_R(k_0),$$

$$C_T = C_0 A_T(k_0) s_T^{-1/2}, \quad x_T = x_{in} - 2\delta'_T(k_0), \quad (14)$$

$$s_T = s_{in} - 2i\delta''_T(k_0).$$

Из формул (6), (13) и (14) следует, что взаимодействие ВП с барьером приводит к смещению центров и изменению ширины отраженного и прошедшего ВП. Смещения центров этих ВП равны

$$\Delta x_R = 2\delta'_R(k_0) \quad \text{и} \quad \Delta x_T = -2\delta'_T(k_0)$$

соответственно, а изменения ширины определяются выражениями

$$\Delta s_n = -2i\delta''_n, \quad n = R, T.$$

Используя формулы (9) и (10), нетрудно получить и явные выражения для этих величин:

$$\Delta x_R = i \left(\frac{d'}{d} + \frac{k_0 a}{q_0} \operatorname{cth}(q_0 a) \right),$$

$$\Delta x_T = a - i \left(\frac{d'}{d} + \frac{k_0^2 - q_0^2}{k_0 q_0^2} \right),$$

$$\Delta s_R = \frac{d''}{d} - \left(\frac{d'}{d} \right)^2 +$$

$$+ \frac{a}{q_0^3 \operatorname{sh}^2(q_0 a)} (V_0 \operatorname{ch}(q_0 a) \operatorname{sh}(q_0 a) + k_0^2 q_0 a) \quad (15)$$

$$\Delta s_T = \frac{d''}{d} - \left(\frac{d'}{d} \right)^2 + \frac{1}{q_0^2} \left(2 \frac{k_0^2}{q_0^2} + \frac{V_0}{k_0^2} \right), \quad (16)$$

где

$$q_0 = [2m(U_0 - E_0)/\hbar^2]^{1/2},$$

$$\frac{d'}{d} = -i \frac{(2 - ik_0 a)}{|d|^2 q_0} [V_0^2 \operatorname{ch}(q_0 a) \operatorname{sh}(q_0 a) - 2ik_0 q_0 (k_0^2 - q_0^2)],$$

$$\frac{d''}{d} = \frac{2k_0 - iV_0 a}{(2 - ik_0 a) q_0^2} \frac{d'}{d} - \frac{1}{q_0^2} (2 - ik_0 a)^2,$$

$$|d|^2 = 4k_0^2 q_0^2 + V_0^2 \operatorname{sh}^2(q_0 a).$$

Смещения центров можно представить и в более удобном для вычислений виде:

$$\operatorname{Re} \Delta x_R = -\frac{2}{|d|^2 q_0} [V_0^2 \operatorname{ch}(q_0 a) \operatorname{sh}(q_0 a) - k_0^2 q_0 (k_0^2 - q_0^2)], \quad (17)$$

$$\operatorname{Re} \Delta x_T = a - \operatorname{Re} \Delta x_R,$$

$$\operatorname{Im} \Delta x_R = \frac{4k_0}{|d|^2} [k_0^2 q_0 a \operatorname{cth}(q_0 a) - (k_0^2 - q_0^2)], \quad (18)$$

$$\operatorname{Im} \Delta x_T = \frac{V_0^2 \operatorname{sh}^2(q_0 a)}{4k_0^2 q_0^2} \operatorname{Im} \Delta x_R.$$

Из определений (15 - 18) видно, что изменения параметров ВП, обусловленные взаимодействием ВП с барьером, не зависят от выбора положения источника ВП x_0 и определяются только волновым числом частиц и высотой и шириной барьера.

В качестве примера в табл. 1 представлены значения величин Δx_n и Δs_n , вычисленные по формулам (15 - 18) для случая туннелирования электронов с энергией 5 эВ через барьер шириной 5 Å и высотой 10 эВ при $\Delta k = 0,05 \text{ Å}^{-1}$.

Таблица 1. Значения величин Δx_n и Δs_n для случая туннелирования электронов с энергией 5 эВ через барьер шириной 5 Å и высотой 10 эВ

n	$\operatorname{Re} \Delta x_n, \text{ Å}$	$\operatorname{Im} \Delta x_n, \text{ Å}$	$\operatorname{Re} \Delta s_n, \text{ Å}^2$	$\operatorname{Im} \Delta s_n, \text{ Å}^2$
R	1,746	$2,118 \times 10^{-4}$	$2,358 \times 10^{-3}$	-1,523
T	3,254	5,0	-5,68	-1,523

При таких значениях этих величин условие $|\delta_n''| \Delta k \ll |\delta_n'|$ выполняется.

Амплитуды, смещения центров и изменения параметров ширины отраженного и прошедшего ВП комплексны, что затрудняет интерпретацию эволюции ВП. Для более детального описания туннелирования ВП необходимо перейти к исследованию эволюции распределений плотности вероятности.

Эволюция плотности вероятности волновых пакетов

Отраженному ВП соответствует плотность вероятности

$$|\psi_R(x, t)|^2 = |C_R|^2 \exp \frac{\operatorname{Im}^2 \Delta x_R}{\operatorname{Re} s_R} \exp \left\{ -\frac{s_0 + \operatorname{Re} \Delta s_R}{|s_R|^2} [x + (x_0 - \Delta x_R^0) + (v - \Delta v_R) t]^2 \right\}, \quad (19)$$

а прошедшему ВП – плотность вероятности

$$|\psi_T(x, t)|^2 = |C_T|^2 \exp \frac{\operatorname{Im}^2 \Delta x_T}{\operatorname{Re} s_T} \exp \left\{ -\frac{s_0 + \operatorname{Re} \Delta s_T}{|s_T|^2} [x - (x_0 + \Delta x_T^0) - (v + \Delta v_T) t]^2 \right\}, \quad (20)$$

где

$$\Delta x_n^0 = \operatorname{Re} \Delta x_n + \frac{\operatorname{Im} \Delta s_n}{s_0 + \operatorname{Re} \Delta s_n} \operatorname{Im} \Delta x_n, \quad \Delta v_n = \frac{\hbar}{m} \frac{\operatorname{Im} \Delta x_n}{s_0 + \operatorname{Re} \Delta s_n}.$$

Величины Δx_n^0 определяют смещения центров, а величины Δv_n – изменения скорости ВП. Значения этих величин, вычисленные при значениях параметров Δx_n и Δs_n из табл. 1, приведены в первой строке табл. 2.

Таблица 2. Значения величин Δx_n^0 и $\Delta v_n / v$ при различных значениях ширины барьера

$a, \text{ Å}$	$\Delta x_R^0, \text{ Å}$	$\Delta x_T^0, \text{ Å}$	$\Delta v_R / v$	$\Delta v_T / v$
5	1,746	3,215	$9,243 \times 10^{-6}$	$2,246 \times 10^{-2}$
10	1,746	8,172	$1,957 \times 10^{-11}$	$4,703 \times 10^{-2}$

Из формул (19) и (20) следует, что при таких значениях величин Δx_n^0 и Δv_n центр отраженного ВП смещается к хвосту этого пакета, т. е. задерживается, центр прошедшего ВП смещается к переднему фронту этого пакета, т. е. ускоряется, скорость отраженного ВП несколько меньше, а скорость прошедшего ВП – больше скорости налетающего ВП. При этом смещение и изменение скорости движения центра прошедшего ВП значительно больше соответствующих величин отраженного ВП. Вычисления показали, что с увеличением ширины барьера это различие увеличивается. В качестве примера во второй строке табл. 2 приведены значения величин Δx_n^0 и Δv_n в случае, когда ширина барьера a равна 10 \AA . Из таблицы также видно, что с увеличением ширины барьера скорость обоих пакетов возрастает.

Параметры ширины плотности вероятности отраженного и прошедшего волновых пакетов можно представить в виде

$$|s_n|^2 / \text{Re } s_n = s_0 + \text{Re } \Delta s_n + \\ + (\text{Im } \Delta s_n + \hbar t / m)^2 / (s_0 + \text{Re } \Delta s_n)$$

Отсюда видно, что при значениях параметров $\text{Im } \Delta s_n$, приведенных в табл. 1, расплывание обоих пакетов замедляется ($\text{Im } \Delta s_n < 0$).

Заключение

В работе исследовано изменение параметров волновых пакетов в процессе туннелирования, обусловленное взаимодействием ВП с барьером. В качестве примера рассмотрено туннелирование электронов. Полученные результаты можно использовать и для анализа туннелирования нуклонов.

Выражения, описывающие смещение центров, изменение скорости и расплывания ВП, можно использовать для объяснения характера зависимости времени туннелирования частиц от ширины барьера, предсказанной в работе [13]. Экспериментальное исследование туннелирования электронов уже начато [15 - 17]. В работе [18] исследовалось и туннелирование ультрахолодных нейтронов, но барьер в этой работе был двойной. Туннелирование через два барьера имеет ярко выраженный резонансный характер, и метод анализа, использованный в настоящей работе, в этом случае неприменим.

Туннелирование играет важную роль и при слиянии и делении ядер. Но в этих процессах оно диссипативно (см., например, [19]), поэтому для их анализа нужно сначала исследовать особенности туннелирования частиц при наличии диссипации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Zakhariev B. N., Olkhovsky V. S., Shilov V. M.* Surprises of quantum tunneling // *Operator Theory: Advances and Applications*. - 1990. - Vol. 46. - P. 159 - 168.
2. *Olkhovsky V. S., Recami E.* Recent development in the time analysis of tunneling processes // *Phys. Rep.* - 1992. - Vol. 214, No. 6. - P. 339 - 356.
3. *Olkhovsky V. S., Recami E., Zaichenko A. K.* Reply to the comment by Leavens on Olkhovsky-Recami's approach to the "Tunneling time problem" // *Solid State Commun.* - 1994. - Vol. 89. - P. 31 - 35.
4. *Olkhovsky V. S., Recami E., Raciti F., Zaichenko A.K.* More about tunneling times, the dwell time and the "Hartman effect" // *J. de Physique-I (France)*. - 1995. - Vol. 5. - P. 1351 - 1365.
5. *Goldberg A., Schey H.M., Schwartz J.L.* Computer-generated motion pictures of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena // *Amer. J. Phys.* - 1967. - Vol. 35. - P. 177 - 186.
6. *Schnupp P.* // *Thin Solid Film*. - 1968. - Vol. 2. - P. 177.
7. *Collins S., Lowe D., Barker J. R.* A dynamic analysis of resonant tunneling // *J. Phys.* - 1987. - Vol. C 20. - P. 6233 - 6243.
8. *Huang Z. H., Cutler P. H., Feuchtwang T. E. et al.* Computer simulation of a wave packet tunneling through a square barrier // *IEEE Trans. Electron Devices*. - 1989. - Vol. 36. - P. 2665 - 2670.
9. *Leavens C. R.* Response to the preceding paper by Olkhovsky, Recami, and Zaichenko // *Solid State Commun.* - 1995. - Vol. 94. - P. 37 - 39.
10. *Misicu S., Rizea M., Greiner W.* Emission of electromagnetic radiation in α -decay // *J. Phys.* - 2001. - Vol. G 27. - P. 993 - 1003.
11. *Шуфл Л.* Квантовая механика. - М.: ИЛ, 1957. - С. 61 - 64.
12. *Зайченко А.К.* Выбор начальных условий в определении времени туннелирования // *Зб. наук. праць Ін-ту ядерних досл.* - 2004. - № 1(12). - С. 43 - 49.
13. *Olkhovsky V.S., Petrillo V., Zaichenko A. K.* Decrease of the tunneling time and violation of the Hartman effect for large barriers // *Phys. Rev.* - 2004. - Vol. A70. - 102409.
14. *De Carvalho C. A. A., Nussenzweig H. N.* Time delay // *Phys. Rep.* - 2002. - Vol. 364. - P. 83 - 174.
15. *Cutler P.H., Feuchtwang T.E., Huang Z. et al.* Use of an STM to define and measure an operational tunneling time // *J. de Phys.* - 1987. - Vol. 48. - No. C6. - P. 101 - 106.

16. *Querret P., Baratoff A., Marclay E.* Effect of a transverse magnetic field on the tunnel current through thick and low semiconductor barriers // *Europhys. Lett.* - 1987. - Vol. 3, No. 3. - P. 367 - 372.
17. *Sekatskii S. K., Letokhov V. S.* Electron tunneling time measurement by field-emission microscopy // *Phys. Rev.* - 2001. - Vol. B64, No. 23. – P. 233311.
18. *Франк А. И., Бондаренко И. В., Васильев В.В. и др.* Измерение времени взаимодействия нейтрона с квантовыми объектами // *Письма в ЖЭТФ.* - 2002. - Т. 75, № 2. - С. 729 – 732.
19. Материалы 7-й международной школы-семинара по физике тяжелых ионов // *Ядерная физика.* - 2003. - Т. 66, № 6.

ЗМІНА ПАРАМЕТРІВ ХВИЛЬОВИХ ПАКЕТІВ У ПРОЦЕСІ ТУНЕЛЮВАННЯ

О. К. Зайченко

Досліджено зміну параметрів хвильових пакетів у процесі тунелювання.

CHANGE IN PARAMETERS OF WAVE POCKETS IN TUNNELING PROCESS

A. K. Zaichenko

The change of the wave packet parameters in tunneling process is investigated.

Поступила в редакцию 15.02.06,
после доработки – 28.04.06.