Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Ф. Лось, Н. В. Лось, Точное решение одномерного, зависящего от времени уравнения Шредингера с прямоугольной потенциальной ямой (барьером) и его применения, *ТМФ*, 2013, том 177, номер 3, 497–517

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8528>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.87.193.239

26 апреля 2023 г., 12:43:16

© 2013 г.

В. Ф. Лось*, Н. В. Лось*

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО, ЗАВИСЯЩЕГО ОТ ВРЕМЕНИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМОЙ (БАРЬЕРОМ) И ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ

Получено точное одномерное, зависящее от времени решение для волновой функции $\psi(x, t)$ движущейся частицы в присутствии прямоугольной ямы (барьера). Решение, справедливое как для ямы, так и для барьера, определяется в терминах интегралов от элементарных функций и представляет собой сумму компонент волнового пакета, движущихся в прямом и обратном направлениях. Рассмотрены и численно визуализированы относительный вклад этих компонент и их интерференции в плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$, время прибытия и время пребывания частиц для узкого и широкого распределений по энергии (импульсу) в исходном гауссовом волновом пакете. Показано, что в случае широкого исходного волнового пакета существенным становится интуитивно неочевидный квантово-механический эффект влияния компонент, движущихся в обратном направлении, на рассматриваемые величины.

Ключевые слова: зависящее от времени уравнение Шредингера, прямоугольная потенциальная яма/барьер, движущиеся в обратном направлении компоненты волнового пакета, время пребывания, время прибытия.

DOI: 10.4213/tmf8528

1. ВВЕДЕНИЕ

Прямоугольные одномерные потенциалы представляют собой простейшие потенциалы, для которых можно исследовать некоторые необычные квантово-механические эффекты, такие как туннелирование частицы через потенциальный барьер или ее отражение от потенциальной ямы. Для стационарных состояний эти эффекты просто следуют из сложения плоских волн и их производных на потенциальных ступеньках. Однако гораздо чаще имеет место более реалистичный случай, когда данные процессы зависят от времени, при этом частица, исходно локализованная вне потенциальной ямы (барьера), движется по направлению к потенциальной ступеньке и претерпевает рассеяние на потенциальных ступеньках. Для описания этих

*Институт магнетизма НАН Украины, Киев, Украина. E-mail: victorlos@mail.ru

зависящих от времени процессов нужно решить соответствующее зависящее от времени уравнение Шредингера с прямоугольным потенциалом, что представляет собой достаточно непростую задачу.

Имеется еще один противоречащий интуиции (и часто упускаемый из виду) эффект даже в случае простейших одномерных, зависящих от времени задач. Волновой пакет, представляющий собой ансамбль частиц, исходно (при $t = t_0$) находящихся, скажем, где-то в области $x < 0$, состоит как из положительных, так и из отрицательных компонент импульса, поскольку частица не может быть полностью локализована в области $x < 0$, если волновой пакет содержит только компоненты с $p > 0$. Можно было бы ожидать, что лишь частицы с положительными импульсами p смогут достичь области с положительными координатами $x > 0$ при $t > t_0$. Однако компоненты волнового пакета с отрицательными импульсами (ограниченные на полупрямую в импульсном пространстве) обязательно должны быть отличны от нуля во всем x -пространстве $(-\infty \div \infty)$. Они выражают присутствие частиц в области $x > 0$ в начальный момент времени t_0 и поэтому могут давать вклад, например, в распределение времени прибытия частицы в область $x > 0$ [1], [2]. Нелишнее отметить, что вклад компонент, движущихся в обратном направлении (с отрицательным импульсом), в задаче с начальным значением в некотором смысле эквивалентен вкладу (быстро затухающих) компонент с отрицательной энергией в исходное решение [1]. Таким образом, корректная трактовка некоторых аспектов кинетики волнового пакета (даже в одномерном случае и даже для “свободного” движения) становится нетривиальной задачей и тесно связана с фундаментальной проблемой измерения времен в квантовой механике, таких как время прибытия, время пребывания и время туннелирования (см. [3]).

С другой стороны, связанные с зависимостью от времени аспекты прохождения через потенциальную ступеньку (барьер, яму) и отражения от нее приобрели актуальность и имеют важные практические применения во вновь возникших областях нанонауки и нанотехнологии. Прямоугольные потенциальные барьеры (ямы) часто могут служить удовлетворительным приближением для одномерных потенциальных профилей в слоистых магнитных наноструктурах, в которых имеют место эффекты гигантского магнитосопротивления [4] и туннельного магнитосопротивления [5]. Эти эффекты, которые проистекают, в частности, из квантово-механического рассеяния на потенциальных ямах (барьерах), привели к очень важным коммерческим приложениям. Таким образом, понимание аспектов, связанных с зависимостью от времени в рассеянии на прямоугольном потенциале, необходимо для развития кинетической теории наноструктур.

Решение зависящего от времени уравнения Шредингера можно получить с помощью пространственно-временного пропагатора (функции Грина), который удобно вычислять методом интегралов по траекториям. Список точных решений для такого пропагатора очень невелик. Например, в работе [6] с помощью метода интегралов по траекториям было получено точное решение для пространственно-временного пропагатора для случая одномерного прямоугольного барьера, однако это решение является очень сложным, неявным и с трудом поддается анализу.

Недавно нами был предложен метод [7]–[9] для вычисления пространственно-временного пропагатора, основанный на интегрировании по энергии матрицы спектральной плотности (разрыва зависящей от энергии функции Грина на веществен-

ной оси энергии). Зависящую от энергии функцию Грина нетрудно при этом получить для потенциальной ступеньки (барьера, ямы) с помощью теории многократного рассеяния, используя найденные в работе [7] эффективные зависящие от энергии потенциалы, ответственные за отражение от потенциальной ступеньки и прохождение через нее. Эти потенциалы, которые определяются через различные скорости частицы по обеим сторонам ступеньчатых потенциалов, составляющих барьер или яму, позволяют рассматривать процессы отражения и прохождения как рассеяние частицы на скачке потенциала, в отличие от общепринятой волновой картины. Важное преимущество нашего подхода к вычислению пропагатора состоит в том, что он допускает естественное разложение эволюции во времени общей исходной волновой функции на компоненты, движущиеся как в прямом ($p = \hbar k > 0$), так и в обратном (с отрицательным импульсом $p < 0$) направлении, и позволяет анализировать вклады обоих этих слагаемых и их интерференции в отражение и прохождение частицы. Кроме того, использование процедуры с разрешением по энергии автоматически устраняет все нефизические энергетические области, например отрицательные энергии.

В настоящей работе мы применяем наш подход к решению зависящего от времени уравнения Шредингера в случае, когда частица движется в направлении одномерного прямоугольного потенциала, амплитуда которого может изменяться от положительных энергий (яма) до отрицательных (барьер). Получено простое точное решение для зависящего от времени пропагатора в терминах интегралов от элементарных функций, справедливое как для ямы, так и для барьера. Показано, что связанные состояния в яме не дают вклада в решение. Полученный результат дает полное решение зависящего от времени уравнения Шредингера, а также точные аналитические выражения для волновой функции $\psi(x, t)$ в пространственных областях левее, внутри и правее потенциальной ямы (барьера) с учетом слагаемых, соответствующих движению в обратном направлении, обусловленных компонентами с отрицательными импульсами исходной волновой функции. Соответствующие плотности вероятности $|\psi(x, t)|^2$ анализируются и численно визуализируются для исходного волнового пакета гауссовой формы, при этом особое внимание уделяется слагаемым, соответствующим движению в обратном направлении, и интерференционным слагаемым. Также получены аналитические выражения для времени прибытия и времени пребывания в различных пространственных областях относительно области потенциальной ямы (барьера). Время пребывания в области потенциальной ямы (барьера) приведено как функция амплитуды потенциала, которая меняется от положительных значений (яма) до отрицательных (барьер).

2. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАВИСЯЩЕГО ОТ ВРЕМЕНИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Рассмотрим частицу, движущуюся вдоль оси x по направлению к потенциалу

$$V(x) = -[\theta(x) - \theta(x - d)]U, \quad (1)$$

соответствующему прямоугольной яме (барьеру), локализованному в области $0 < x < d$, где $d > 0$ – ширина ямы (барьера), причем $U > 0$ – глубина ямы, а $U < 0$ – высота барьера.

Волновую функцию отдельной частицы, движущейся в возмущающем потенциале $V(x)$, можно выразить как [10]

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0). \quad (2)$$

Пропагатор $K(x, t; x', t_0)$ представляет собой амплитуду вероятности перехода частицы из начальной пространственно-временной точки (x', t_0) в конечную точку (x, t) по всем возможным путям. Он дает полную информацию о динамике частицы и решает соответствующее зависящее от времени уравнение Шредингера.

Согласно [7] зависящий от времени запаздывающий пропагатор

$$K(t - t') = \theta(t - t') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t') \right],$$

где H – не зависящий от времени гамильтониан рассматриваемой системы, нетрудно вычислить в пространственном представлении с использованием следующего определения:

$$K(x, t; x', t_0) = \theta(t - t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right] A(x, x'; E) dE. \quad (3)$$

Здесь $A(x, x'; E)$ – матрица спектральной плотности

$$\begin{aligned} A(x, x'; E) &= \frac{i}{2\pi} [G^+(x, x'; E) - G^-(x, x'; E)], \\ G^+(x, x'; E) &= \left\langle x \left| \frac{1}{E - H + i\varepsilon} \right| x' \right\rangle, \quad \varepsilon \rightarrow +0, \\ G^-(x, x'; E) &= [G^+(x', x; E)]^*, \end{aligned} \quad (4)$$

определяемая матричными элементами запаздывающей $G^+(E)$ и опережающей $G^-(E)$ зависящих от энергии операторных функций Грина $G^\pm = (E - H \pm i\varepsilon)^{-1}$, аналитических соответственно в верхней и нижней полуплоскостях комплексной энергии E .

В работе [9] мы получили выражения для запаздывающей функции Грина $G^+(x, x'; E)$ для частицы, движущейся из области $x' < 0$ по направлению к прямоугольному барьеру, локализованному в области $0 < x < d$, которые также справедливы для потенциальной ямы, если изменить знак у потенциала U , соответствующего высоте барьера, т. е. заменить U на $-U$ (в соответствии с потенциалом (1)). Таким образом, в рассматриваемых пространственных областях имеем

$$G^+(x, x'; E) =$$

$$= \begin{cases} \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik(x-d)} t(E) e^{-ikx'}, & x' < 0, x > d, \\ \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{-ikx} t(E) e^{ik(x'-d)}, & x' > d, x < 0, \\ \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k k_{-u}}} [e^{ik_{-u} x} t'(E) e^{-ikx'} + e^{-ik_{-u} x} r'(E) e^{-ikx'}], & x' < 0, 0 < x < d, \\ \frac{m}{i\hbar^2 \sqrt{k k_{-u}}} [e^{-ikx} t'(E) e^{ik_{-u} x'} + e^{-ikx} r'(E) e^{-ik_{-u} x'}], & x < 0, 0 < x' < d, \\ \frac{m}{i\hbar^2 k} [e^{ik|x-x'|} + r(E) e^{-ik(x+x')}], & x < 0, x' < 0, \end{cases} \quad (5)$$

где амплитуды прохождения и отражения определяются как

$$\begin{aligned} t(E) &= \frac{4kk_{-u}e^{ik_{-u}d}}{d(E)}, & t'(E) &= \frac{2\sqrt{kk_{-u}}(k+k_{-u})}{d(E)}, \\ r'(E) &= \frac{2\sqrt{kk_{-u}}(k_{-u}-k)e^{2ik_{-u}d}}{d(E)}, & r(E) &= \frac{(k^2-k_{-u}^2)(1-e^{2ik_{-u}d})}{d(E)}, \\ d(E) &= (k+k_{-u})^2 - (k-k_{-u})^2 e^{2ik_{-u}d}. \end{aligned} \quad (6)$$

Волновые числа частицы k и k_{-u} связаны с пространственными областями соответственно снаружи и внутри потенциальной ямы (барьера) и зависят от энергии E следующим образом:

$$k(E) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, \quad k_{-u}(E) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E+U)}. \quad (7)$$

Из соотношений (5) мы видим, что $G^+(x, x'; E) = G^+(x', x; E)$, и поэтому опережающая функция Грина $G^-(x, x'; E) = [G^+(x, x'; E)]^*$ (см. (4)). Таким образом, амплитуду перехода (3), которая определяется мнимой частью функции Грина, можно записать как

$$K(x, t; x', t_0) = -\theta(t - t_0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right] \text{Im } G^+(x, x'; E). \quad (8)$$

Формулы (5)–(8) представляют точное решение для пропагатора частицы в потенциале (1) в терминах интегралов от элементарных функций. Следует иметь в виду, что скорость $v(E) = \hbar k(E)/m$, поэтому величины $t(E)$, $t'(E)$, $r'(E)$ и $r(E)$ в (6) различны для различных областей интегрирования по энергии $-\infty < E < 0$ и $0 < E < \infty$: в первом случае $k(E)$ нужно заменить на $i\bar{k}(E)$, где $\bar{k}(E) = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$. Отсюда следует, что “свободная” функция Грина

$$G_0^+(x, x'; E) = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{ik|x-x'|}$$

является вещественной в энергетическом интервале $(-\infty \div 0)$, и поэтому на данном интервале она не дает вклада в соответствующий “свободный” пропагатор $K_0(x, t; x', t_0)$, определяемый выражением (8). Следует также заметить, что для отрицательных энергий $E < 0$ мнимые части функций Грина (5) обращаются в нуль во всех пространственных областях, как видно из определений (6) и (7) (например, $\text{Im } t(E) = 0$ и $\text{Im } r(E) = 0$ при $E < 0$). Поэтому энергетический интервал $(-\infty \div 0)$ не дает вклада в распространение частиц (энергия которых, естественно, больше нуля) через область потенциальной ямы (барьера).

Таким образом, пространственно-временной пропагатор имеет вид

$$\begin{aligned}
 K(x, t; x', t_0) &= \theta(t - t_0) \frac{1}{\pi \hbar} \int_0^\infty dE \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right] \frac{1}{v(E)} \times \\
 &\times \operatorname{Re} [t(E) e^{ik(x-x'-d)}], \quad x' < 0, \quad x > d, \\
 K(x, t; x', t_0) &= \theta(t - t_0) \frac{1}{\pi \hbar} \int_0^\infty dE \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right] \frac{1}{\sqrt{v(E)}} \times \\
 &\times \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{-ikx'}}{\sqrt{v_{-u}(E)}} [t'(E) e^{ik_{-u}x} + r'(E) e^{-ik_{-u}x}] \right\}, \quad x' < 0, \quad 0 < x < d, \\
 K(x, t; x', t_0) &= \theta(t - t_0) \frac{1}{\pi \hbar} \int_0^\infty dE \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right] \frac{1}{v(E)} \times \\
 &\times \operatorname{Re} [e^{ik|x-x'|} + r(E) e^{-ik(x+x')}], \quad x' < 0, \quad x < 0,
 \end{aligned} \tag{9}$$

где $v_{-u}(E) = \hbar k_{-u}(E)/m$. Заметим, что соотношения (9) справедливы как для ямы ($U \geq 0$), так и для барьера ($U \leq 0$). Во втором случае скорость $v_{-u}(E)$ и, соответственно, волновое число $k_{-u}(E)$ следует заменить на $v_u(E) = \hbar k_u(E)/m$, $k_u(E) = \sqrt{2m(E - |U|)}/\hbar$. В области энергий $0 \leq E < |U|$ скорость $v_u(E)$ является мнимой и равна $i\bar{v}_u(E) = i\hbar \bar{k}_u(E)/m$, $\bar{k}_u(E) = \sqrt{2m(|U| - E)}/\hbar$. Легко проверить, что интегрирование по E первого слагаемого в последнем соотношении в (9) дает известную формулу для пространственно-временного пропагатора свободно движущейся частицы:

$$K_0(x, t; x', t_0) = \theta(t - t_0) \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im(x - x')^2}{2\hbar t} \right], \quad x < 0, \quad x' < 0. \tag{10}$$

Полученные результаты для пропагатора частицы полностью решают (с помощью формулы (2)) зависящее от времени уравнение Шредингера для частицы, движущейся в прямоугольном потенциале (1).

3. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ И ПЛОТНОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ

Используя формулы (2), (5) и (8), можно представить волновую функцию в различных пространственных областях при $t > t_0$ как

$$\psi(x, t) = \psi_{>}(x, t) + \psi_{<}(x, t). \tag{11}$$

Здесь

$$\begin{aligned}
 \psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \int_0^\infty dE \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E(t - t_0) \right] \times \\
 &\times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} t(E) e^{ik(x-d)} \psi_{>}(E), \quad x > d,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} t^*(E) e^{-ik(x-d)} \psi_{<}(E), \quad x > d, \\
\psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{v_{-u}(E)}} [t'(E) e^{ik_{-u}x} + r'(E) e^{-ik_{-u}x}] \psi_{>}(E), \quad 0 < x < d, \\
\psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{v_{-u}^*(E)}} [t'^*(E) e^{-ik_{-u}^*x} + r'^*(E) e^{ik_{-u}^*x}] \psi_{<}(E), \quad 0 < x < d, \\
\psi_{>}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} [e^{ikx} + r(E) e^{-ikx}] \psi_{>}(E), \quad x < 0, \\
\psi_{<}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^\infty dE \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)\right] \times \\
&\quad \times \frac{1}{\sqrt{v(E)}} [e^{-ikx} + r^*(E) e^{ikx}] \psi_{<}(E), \quad x < 0,
\end{aligned} \tag{12}$$

где, как уже отмечалось, величина скорости $v_{-u}(E)$ может быть мнимой для потенциального барьера ($U < 0$). Исходная волновая функция в E -представлении $\psi_{>(<)}(E)$ связана с соответствующей волновой функцией в k -представлении $\psi_{>(<)}(k)$ как

$$\psi_{>}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v(E)}} \psi_{>}[k(E)], \quad \psi_{<}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar v(E)}} \psi_{<}[k(E)] \tag{13}$$

и

$$\psi_{>}[k(E)] = \int dx' e^{-ikx'} \psi(x', t_0), \quad \psi_{<}[k(E)] = \int dx' e^{ikx'} \psi(x', t_0).$$

Можно проверить, что волновые функции (12) и их производные непрерывны при $x = 0$ и $x = d$. Для определенности будем предполагать, что при положительных энергиях $k(E) = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$, поэтому $\psi_{>}(k)$ является компонентой исходной волновой функции, соответствующей распространению направо, а $\psi_{<}(k)$ – компонентой, соответствующей распространению налево. Если $U \neq 0$, то интегрирование по x' ограничено отрицательным полупространством ($x' < 0$), как следует из выражений (9) для пропагатора частицы.

Результат, выражаемый формулами (11) и (12), указывает, что, вообще говоря, вклад волновой функции, исходно существующей при $t = t_0$ слева от потенциала (1) ($x' < 0$), в волновую функцию в области потенциала ($0 < x < d$) и правее ($x > d$) дается при $t > t_0$ компонентами, движущимися как направо ($\psi_{>}(k)$), так и налево ($\psi_{<}(k)$). Этот довольно парадоксальный результат следует из того факта, что если исходный волновой пакет обладает компонентами с отрицательным импульсом (при ограничении на полупрямую в импульсном пространстве), которыми нельзя пренебречь, то соответствующая пространственная волновая функция отлична от нуля

во всей области $(-\infty, \infty)$ и, взаимодействуя с барьером даже при $t < t_0$, модифицируется этим взаимодействием (см. также [11], [1]). Таким образом, компоненты, движущиеся в обратном направлении, дают вклад в поведение волновой функции при $t > t_0$ в пространственных областях справа от области локализации исходного волнового пакета. Соответственно, плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$ нахождения частицы в точке пространства-времени (x, t) определяется членами, соответствующими движению в прямом и обратном направлениях, а также интерференционными членами:

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi_>(x, t)|^2 + |\psi_<(x, t)|^2 + 2 \operatorname{Re} \psi_>(x, t) \psi_<^*(x, t). \quad (14)$$

Соотношения (12) и (14) можно использовать для численного моделирования плотности вероятности в различных пространственно-временных областях (см. ниже) и для нахождения некоторых характеристик динамики частицы в потенциале (1).

Чтобы оценить вклад слагаемых, соответствующих движению в прямом и обратном направлениях, в полученные общие формулы, нужно рассмотреть физически актуальную ситуацию относительно исходного волнового пакета. Рассмотрим случай, когда движущиеся частицы связаны с волновым пакетом, который исходно достаточно хорошо локализован в области $x' < 0$. Таким образом, мы теперь рассматриваем задачу в частном случае начального состояния, соответствующего волновому пакету

$$\psi(x', t_0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x' - x_i)^2}{4\sigma^2} + ik_i x'\right], \quad x_i < 0, \quad k_i > 0, \quad (15)$$

локализованному в окрестности $x_i < 0$ и движущемуся в направлении положительных x со средним импульсом $p_i = \hbar k_i > 0$. Фурье-преобразование функции (15) с учетом (13) дает следующий результат для всего диапазона энергий $(0 \div \infty)$:

$$\begin{aligned} \psi_>(E) &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar v(E)}} (2\pi\sigma^2)^{1/4} \exp[i[k_i - k(E)]x_i] \exp[-[k_i - k(E)]^2\sigma^2], \\ \psi_<(E) &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar v(E)}} (2\pi\sigma^2)^{1/4} \exp[i[k_i + k(E)]x_i] \exp[-[k_i + k(E)]^2\sigma^2]. \end{aligned} \quad (16)$$

Физически актуальная ситуация имеет место, когда исходная волновая функция обращается в нуль при $x > 0$ (хорошо локализована в пределах полупрямой $x < 0$), поскольку пропагатор (9) переводит эту функцию из области $x' < 0$ в области $x > 0$ или $x < 0$. Этого можно достичь, если определить исходную волновую функцию в виде (15) при $x' < 0$ и положить ее равной нулю при $x' > 0$. Можно показать, что если выполнено условие

$$\left| \frac{x_i}{2\sigma} \right| \gg 1 \quad (17)$$

(т. е. если хвост исходного волнового пакета (15) очень мал вблизи точки прибытия $x = 0$), то фурье-преобразование исходного волнового пакета совпадает с фурье-преобразованием обрезанного гауссова волнового пакета, определяемого как (15) при $x' < 0$ и равного нулю при $x' > 0$ (см. [12]).

Вообще говоря, как $\psi_>(x, t)$ -компоненты, так и $\psi_<(x, t)$ -компоненты дают вклад в плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$ (см. (14)). Если также предположить, что

$$k_i \sigma \gg 1, \quad (18)$$

откуда следует, что дисперсия импульса $\hbar/2\sigma$ много меньше характеристического импульса $p_i = \hbar k_i$, или, эквивалентно,

$$\frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} \ll E_i, \quad (19)$$

т.е. дисперсия энергии $\hbar^2/8m\sigma^2$ много меньше характеристической энергии $E_i = \hbar^2 k_i^2/2m$, то из (12) и (16) можно видеть, что вклад в плотность вероятности члена $\psi_<(x, t)$, соответствующего движению в обратном направлении, значительно меньше, чем вклад члена $\psi_>(x, t)$, соответствующего движению в прямом направлении, поэтому вкладом $\psi_<(x, t)$ можно пренебречь в первом приближении.

Удобно (например, при численной визуализации полученных результатов) перейти к безразмерным переменным. Как видно из (12), имеются естественный пространственный масштаб d , энергетический масштаб $E_d = \hbar^2/2md^2$ (энергетическая неопределенность вследствие локализации частицы в области потенциальной ямы (барьера) шириной d) и соответствующий временной масштаб $t_d = \hbar/E_d$. Тогда, используя (12) и (16), можно получить волновую функцию в различных пространственных областях из эволюции исходного гауссова волнового пакета (15) в присутствии потенциальной ямы (1). Таким образом, волновая функция (12) в безразмерных переменных имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \psi_>(\tilde{x}, \tilde{t}) + \psi_<(\tilde{x}, \tilde{t}), \quad \tilde{t} > \tilde{t}_0, \\ \psi_>(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \times \\ &\quad \times \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\sqrt{\tilde{E}}} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \tilde{t}(\tilde{E}) e^{-(\sqrt{\tilde{E}}-\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{i\sqrt{\tilde{E}}(\tilde{x}-\tilde{x}_i-1)}, \quad \tilde{x} > 1, \\ \psi_<(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \times \\ &\quad \times \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\sqrt{\tilde{E}}} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \tilde{t}^*(\tilde{E}) e^{-(\sqrt{\tilde{E}}+\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{-i\sqrt{\tilde{E}}(\tilde{x}-\tilde{x}_i-1)}, \quad \tilde{x} > 1, \\ \psi_>(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\tilde{E}^{1/4}(\tilde{E}+\tilde{U})^{1/4}} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \left[\tilde{t}'(\tilde{E}) e^{i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}\tilde{x}} + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{r}'(\tilde{E}) e^{-i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}\tilde{x}} \right] e^{-(\sqrt{\tilde{E}}-\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{-i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}_i}, \quad 0 < \tilde{x} < 1, \\ \psi_<(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\tilde{E}^{1/4}[(\tilde{E}+\tilde{U})^{1/4}]^*} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \times \\ &\quad \times \left[\tilde{t}^{*'}(\tilde{E}) e^{-i(\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}})^* \tilde{x}} + \tilde{r}^{*'}(\tilde{E}) e^{i(\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}})^* \tilde{x}} \right] e^{-(\sqrt{\tilde{E}}+\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}_i}, \\ &\quad 0 < \tilde{x} < 1, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned}
\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\sqrt{\tilde{E}}} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \left[e^{i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}} + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{r}(\tilde{E}) e^{-i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}} \right] e^{-(\sqrt{\tilde{E}}-\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{-i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}_i}, \quad \tilde{x} < 0, \\
\psi_{<}(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{3/4}} \frac{\tilde{\sigma}^{1/2}}{d^{1/2}} e^{ik_i x_i} \int_0^\infty \frac{d\tilde{E}}{\sqrt{\tilde{E}}} e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} \left[e^{-i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}} + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{r}^*(\tilde{E}) e^{i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}} \right] e^{-(\sqrt{\tilde{E}}+\sqrt{\tilde{E}_i})^2 \tilde{\sigma}^2} e^{i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}_i}, \quad \tilde{x} < 0,
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\tilde{t}(\tilde{E}) &= \frac{4\sqrt{\tilde{E}}\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}e^{i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}}}{\tilde{d}(\tilde{E})}, \\
\tilde{t}'(\tilde{E}) &= \frac{2\tilde{E}^{1/4}(\tilde{E}+\tilde{U})^{1/4}(\sqrt{\tilde{E}}+\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}})}{\tilde{d}(\tilde{E})}, \\
\tilde{r}'(\tilde{E}) &= \frac{2\tilde{E}^{1/4}(\tilde{E}+\tilde{U})^{1/4}(\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}-\sqrt{\tilde{E}})e^{2i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}}}{\tilde{d}(\tilde{E})}, \\
\tilde{r}(\tilde{E}) &= -\frac{\tilde{U}(1-e^{2i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}})}{\tilde{d}(\tilde{E})}, \\
\tilde{d}(\tilde{E}) &= \left(\sqrt{\tilde{E}}+\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}\right)^2 - \left(\sqrt{\tilde{E}}-\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}\right)^2 e^{2i\sqrt{\tilde{E}+\tilde{U}}}
\end{aligned} \tag{21}$$

и $\tilde{E} = E/E_d$, $\tilde{U} = U/E_d$, $\tilde{E}_i = E_i/E_d$, $E_i = \hbar^2 k_i^2/2m$, $\tilde{t} = t/t_d$, $\tilde{t}_0 = t_0/t_d$, $\tilde{\sigma} = \sigma/d$, $\tilde{x} = x/d$, $\tilde{x}_i = x_i/d$. Условия (17) и (19), записанные в безразмерных переменных, соответственно имеют вид

$$|\tilde{x}_i| \gg 2\tilde{\sigma}, \quad \tilde{E}_i \gg \frac{1}{\tilde{\sigma}^2}. \tag{22}$$

Почувительно рассмотреть сначала предельный случай, определяемый вторым неравенством (22). В этом случае члены $\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})$, соответствующие движению в прямом направлении в формулах (20), дают основной вклад в полную волновую функцию, т. е. $\psi(\tilde{x}, \tilde{t}) \approx \psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})$. Кроме того, интегралы по энергии в $\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})$ (20) можно асимптотически вычислить при $\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \gg 1$ в силу того, что основной вклад в эти интегралы главным образом происходит из области энергии $\tilde{E} \approx \tilde{E}_i$. В этом случае волновые функции $\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})$ сводятся (в первом приближении по $1/\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \ll 1$) к стационарным (при $\tilde{E} = \tilde{E}_i$) результатам, осциллирующим во времени по закону $e^{-i\tilde{E}_i(\tilde{t}-\tilde{t}_0)}$. Таким образом, если представить соотношения (20) для $\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})$ как

$$\begin{aligned}
\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t}) &= \int_0^\infty \varphi(\tilde{x}, \tilde{x}_i; \tilde{E}) e^{-i\tilde{E}(\tilde{t}-\tilde{t}_0)} e^{\lambda f(\tilde{E})} d\tilde{E}, \\
\lambda &= \tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \gg 1, \quad f(\tilde{E}) = -\frac{(\sqrt{\tilde{E}}-\sqrt{\tilde{E}_i})^2}{\tilde{E}_i},
\end{aligned} \tag{23}$$

где $\varphi(\tilde{x}, \tilde{x}_i; \tilde{E})$ обозначает любое подынтегральное выражение из (20), умноженное на экспоненты из (23), то асимптотическое значение выражения (23) будет равно

$$\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\tilde{\sigma}} \sqrt{\tilde{E}_i} \varphi(\tilde{x}, \tilde{x}_i; \tilde{E}_i) e^{-i\tilde{E}_i(\tilde{t}-\tilde{t}_0)}. \quad (24)$$

Соответственно, квадрат модуля $|\psi_{>}(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ волновых функций, определяемых формулами (20) и (21), в этом асимптотическом случае не зависит от времени. Как в случае потенциальной ямы ($U > 0$), так и в случае потенциального барьера при $E_i > |U|$ ($U < 0$) имеем (в исходных немасштабированных переменных)

$$\begin{aligned} |\psi_{>}(x, t)|^2 &= \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{16E_i(E_i \pm |U|)}{|d(E_i)|^2}, & x > d, \\ \frac{16}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{E_i}{|d(E_i)|^2} \left\{ E_i \pm |U| \cos^2 \left[\sqrt{\frac{2m(E_i \pm |U|)}{\hbar^2}} (x - d) \right] \right\}, & 0 < x < d, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \left\{ 1 + \frac{4U^2 \sin^2(\sqrt{2m(E_i \pm |U|)/\hbar^2} d)}{|d(E_i)|^2} \pm \frac{8|U|}{|d(E_i)|^2} \times \right. \\ \quad \times \left[2\sqrt{E_i} \sqrt{E_i \pm |U|} \sin \left(2\sqrt{\frac{2m(E_i \pm |U|)}{\hbar^2}} d \right) \sin \left(2\sqrt{\frac{2mE_i}{\hbar^2}} x \right) - \right. \\ \quad \left. \left. - (2E_i \pm |U|) \sin^2 \left(\sqrt{\frac{2m(E_i \pm |U|)}{\hbar^2}} d \right) \cos \left(2\sqrt{\frac{2mE_i}{\hbar^2}} x \right) \right] \right\}, & x < 0, \end{cases} \quad (25) \\ |d(E_i)|^2 &= 16E_i(E_i \pm |U|) + 4U^2 \sin^2 \left[\sqrt{\frac{2m(E_i \pm |U|)}{\hbar^2}} d \right], \quad E_i \gg \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2}. \end{aligned}$$

Здесь выбор знака плюс соответствует потенциальной яме, а знака минус – потенциальному барьеру. Формулы (25) определяют пространственную зависимость квадрата модуля волновой функции в различных пространственных областях по отношению к области потенциала в стационарном случае, когда для исходного волнового пакета (15) характерно особенно узкое распределение в энергетическом (импульсном) пространстве. Например, в данном приближении перенесенная сквозь яму (барьер) плотность вероятности ($x > d$) постоянна в пространстве, в то время как интерференционная картина в области потенциальной ямы (барьера) ($0 < x < d$) представляет собой зависимость типа квадрата косинуса, а в области левее потенциальной ямы (барьера) ($x < 0$) картина более сложная и представляет собой результат интерференции падающих и отраженных волн. Для резонансных состояний, когда $\sqrt{2m(E_i \pm |U|)/\hbar^2} d = \pi n$ (n – целое число), соотношения (25) упрощаются: слагаемые, обусловленные отражением в область $x < 0$, обращаются в нуль, т.е. имеется только плотность вероятности $1/\sqrt{2\pi}\sigma$, соответствующая падающей волне, и, соответственно, эта плотность вероятности полностью проходит в область $x > d$.

Зависимость $|\psi(x, t)|^2$ от времени проявляется, только если имеется достаточная дисперсия импульса, как следует из формул (20). Пространственно-временную зависимость плотности вероятности можно визуализировать путем численного моделирования. Сосредоточимся на плотности вероятности $|\psi(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ нахождения частицы в точке масштабированного пространства-времени $(\tilde{x}, \tilde{t})$ внутри потенциальной ямы

Рис. 1. Распределение плотности вероятности $|\psi(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ внутри области потенциальной ямы для узкого распределения по энергиям исходного волнового пакета ($\tilde{\sigma} = 1/3$).

в области $\tilde{x} = 0 \div 1$ и построим ее график, предвосхищая рассмотрение в следующем разделе, касающееся времени пребывания частицы в данной области. Чтобы сделать динамику волнового пакета больше похожей на динамику частицы, будем считать волновой пакет узким, $\tilde{\sigma} < 1$, и положим $\tilde{t}_0 = 0$. Для электрона и ямы шириной $d = 10^{-7}$ см (1 нм) характерная энергия $E_d \sim 3 \cdot 10^{-2}$ эВ, а характерное время $t_d \sim 2 \cdot 10^{-14}$ с. В соответствии с принятыми условиями положим $\tilde{\sigma} = 1/3$ и $\tilde{\sigma} = 0.05$, $\tilde{x}_i = -10$, $\tilde{E}_i = 10^2$ и $\tilde{U} = 2\tilde{E}_i$. Сравним два случая: $\tilde{\sigma} = 1/3$, когда второе неравенство (22) выполнено и компоненты исходного волнового пакета с положительной энергией, движущиеся в обратном направлении, несущественны, и $\tilde{\sigma} = 0.05$, когда их вклад имеет значение. Безразмерный временной интервал $\tilde{t} = 0.1 \div 1.5$ выбран из простой оценки для среднего масштабированного времени t_i/t_d , которое требуется частице с начальной энергией $\tilde{E}_i = 10^2$, чтобы достичь потенциала, если она стартует из точки $\tilde{x}_i = -10$:

$$\frac{t_i}{t_d} = \frac{|x_i|m}{\hbar k_i t_d} = \frac{|\tilde{x}_i|}{2\sqrt{\tilde{E}_i}} = \frac{1}{2}.$$

Поведение плотности вероятности $|\psi(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ в пространстве и во времени внутри области потенциальной ямы $\tilde{x} = 0 \div 1$, определяемое соотношениями (20), показано на рис. 1 и рис. 2. На рис. 1 ($\tilde{\sigma} = 1/3$) показана интерференционная картина – ожидаемая зависимость типа квадрата косинуса в фиксированный момент времени (см. (25)). Однако амплитуда этой интерференционной картины увеличивается со временем от нуля до максимального значения (которого она достигает приблизительно при $\tilde{t} = 0.5$), после чего она снова уменьшается до нуля, тем самым демонстрируя конечное время, в течение которого частица существует в области потенциальной ямы до того, как покинуть ее и переместиться в область левее ($\tilde{x} < 0$) или

Рис. 2. Распределение плотности вероятности $|\psi(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ внутри области потенциальной ямы для широкого распределения по энергиям исходного волнового пакета ($\tilde{\sigma} = 0.05$).

правее ($\tilde{x} > 1$) ямы. На рис. 2 ($\tilde{\sigma} = 0.05$) видно, что интерференционная картина $|\psi(\tilde{x}, \tilde{t})|^2$ является более структурированной в пространстве и во времени. В частности, распределение плотности вероятности во времени является немонотонным и более широким (что указывает на большую величину времени пребывания) по сравнению с предыдущим случаем. Эти изменения в распределении плотности вероятности обусловлены влиянием компонент волновой функции $\psi_{<}(\tilde{x}, \tilde{t})$, движущихся в обратном направлении.

4. ВРЕМЯ ПРИБЫТИЯ И ВРЕМЯ ПРЕБЫВАНИЯ

Формулы (12) и (14) можно использовать для нахождения некоторых характеристик динамики частицы в потенциале (1). Например, можно определить полную вероятность прибытия частицы в пространственную область правее ямы (барьера) $x > d$ и в пространственную область левее ямы (барьера) $x < 0$ как (см. [13], [8])

$$\begin{aligned} P_{>}(\infty) &= \lim_{t \rightarrow t_0 \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_d^{\infty} e^{-\varepsilon x} |\psi(x, t)|^2 dx, \\ P_{<}(\infty) &= \lim_{t \rightarrow t_0 \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^0 e^{\varepsilon x} |\psi(x, t)|^2 dx. \end{aligned} \quad (26)$$

Учитывая соотношения (12) для соответствующих пространственных областей (первая, вторая, пятая и шестая формулы в (12)) и интегрируя по комплексной энергетической плоскости (или используя теорему Абеля), получаем

$$\begin{aligned} P_{>}(\infty) &= \int_0^{\infty} |t(E)|^2 |\psi_{>}(E)|^2 dE, \\ P_{<}(\infty) &= \int_0^{\infty} |r(E) \psi_{>}(E) + \psi_{<}(E)|^2 dE. \end{aligned} \quad (27)$$

Видно, что хотя члены, соответствующие движению в обратном направлении, и интерференционные члены в общем случае дают вклад в плотность вероятности (14), они не дают вклада в асимптотику времени прибытия (27) в область правее ямы (барьера) и дают вклад в область слева от ямы (барьера). Поэтому парадоксальный вклад компонент, движущихся в обратном направлении, во время прибытия в область $x > d$ представляет собой переходный во времени эффект, который асимптотически исчезает. В отсутствие потенциала ($U = 0$), $|t(E)|^2 = 1$, $r(E) = 0$ (см. (6)), соотношения (27) сводятся к естественным результатам для свободного движения (см. также работы [14] и [8], где обсуждаются “идеальное” время прибытия (26) и связь между членами, соответствующими движению в обратном направлении, и вкладом, обусловленным отрицательными энергиями). Нетрудно показать, что для конечного пространственного интервала прибытия из определения (26) естественно получается нулевой результат, поскольку частица покидает данную конечную область за достаточно большой интервал времени ($t - t_0 \rightarrow \infty$).

Для конечного пространственного интервала традиционно используется так называемое время пребывания, т. е. среднее время, потраченное в данном интервале частицей, описываемой пакетом $\psi(x, t)$. Время пребывания в области потенциала $(0, d)$ определяется как

$$\tau(0, d) = \lim_{t-t_0 \rightarrow \infty} \int_{t_0}^t dt \int_0^d dx |\psi(x, t)|^2. \quad (28)$$

Подставляя третье и четвертое соотношения из (12) в определение (28), получаем

$$\begin{aligned} \tau(0, d) &= \tau_{>}(0, d) + \tau_{<}(0, d) + 2 \operatorname{Re} \tau_{><}(0, d), \\ \tau_{>}(0, d) &= \int_0^\infty dE \int_0^d dx \left| \frac{\varphi(x, E)}{\sqrt{v_{-u}(E)}} \psi_{>}(E) \right|^2, \\ \tau_{<}(0, d) &= \int_0^\infty dE \int_0^d dx \left| \frac{\varphi(x, E)}{\sqrt{v_{-u}(E)}} \psi_{<}(E) \right|^2, \\ \tau_{><}(0, d) &= \int_0^\infty dE \int_0^d dx \left[\frac{\varphi(x, E)}{\sqrt{v_{-u}(E)}} \right]^2 \psi_{>}(E) \psi_{<}^*(E), \\ \varphi(x, E) &= t'(E) e^{ik_{-u}x} + r'(E) e^{-ik_{-u}x}. \end{aligned} \quad (29)$$

Мы снова видим, что время пребывания определяется компонентами исходного волнового пакета, движущимися в прямом и обратном направлениях, а также их интерференцией. Весь диапазон энергий ($0 \div \infty$) дает вклад во время пребывания. Из (29) и (12) нетрудно получить, что составляющие времени пребывания, соответствующие движению в прямом и обратном направлениях, равны

$$\tau_{>(<)}(0, d) = \int_0^\infty dE \tau_{>(<)}(E; d). \quad (30)$$

Зависящее от энергии время пребывания на единичный интервал энергий $\tau_{>(<)}(E; d)$, обусловленное компонентами исходного волнового пакета, движущимися в прямом

(обратном) направлении $\psi_{>(<)}(E)$, имеет вид

$$\begin{aligned} \tau_{>(<)}(E; d) &= t(E; d) |\psi_{>(<)}(E)|^2, \\ t(E; d) &= \frac{k}{v_{-u}} \frac{2k_{-u}d(k_{-u}^2 + k^2) + k_0^2 \sin(2k_{-u}d)}{4k^2k_{-u}^2 + k_0^4 \sin^2(k_{-u}d)}, \end{aligned} \quad (31)$$

где $k_0^2 = k_{-u}^2 - k^2 = (2m/\hbar^2)U$. Заметим, что $\psi_{>(<)}(E)$ имеет размерность обратного квадратного корня из энергии (см. (16)), поэтому выражение для $t(E; d)$ имеет размерность времени и совпадает с зависящим от энергии временем пребывания, полученным ранее в работе [15].

Как следует из (29) и (12), обусловленное интерференцией время пребывания на единичный интервал энергий можно записать как

$$\begin{aligned} \tau_{>(<)}(E; d) &= \text{Re} \left\{ \frac{4k}{v_{-u}} \times \right. \\ &\quad \times \frac{(k^2 + k_{-u}^2) \sin(2k_{-u}d) + 2k_{-u}k_0^2d - 4ikk_{-u} \sin^2(k_{-u}d)}{[i(k^2 + k_{-u}^2) \sin(k_{-u}d) - 2kk_{-u} \cos(k_{-u}d)]^2} \psi_{>}(E) \psi_{<}^*(E) \left. \right\}, \quad (32) \\ 2 \text{Re } \tau_{>(<)}(0, d) &= \int_0^\infty dE \tau_{>(<)}(E; d). \end{aligned}$$

Заметим, что и соотношения (31), и соотношения (32) справедливы как для ямы ($U > 0$), так и для барьера ($U < 0$). Во втором случае нужно выполнить подстановку $U \rightarrow -U$ ($k_{-u} \rightarrow k_u = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E - |U|)}$), а интегрирование по энергии $0 < E < \infty$ включает область $E < |U|$, в которой k_u заменяется на $i\bar{k}_u$, $\bar{k}_u = \sqrt{(2m/\hbar^2)(|U| - E)}$. Таким образом, полученные результаты можно использовать для вычисления времени пребывания как для прямоугольной ямы, так и для прямоугольного барьера, а также для рассмотрения его эволюции, когда яма преобразуется в барьер ($U \rightarrow -U$).

Таким образом, полное время пребывания на единичную энергию

$$\begin{aligned} \tau(E; d) &= t(E; d) [|\psi_{>}(E)|^2 + |\psi_{<}(E)|^2] + \tau_{>(<)}(E; d), \\ \tau(0, d) &= \int_0^\infty \tau(E; d) dE, \end{aligned} \quad (33)$$

в общем случае определяется компонентами исходного волнового пакета, движущимися как в прямом, так и в обратном направлении, а также их интерференцией. Для резонансных энергий, удовлетворяющих условию $k_{-u}d = \pi n$ (n – целое число, k_{-u} – вещественное число), которые имеют место в случаях $U > 0$ и $U < 0$ (однако только при $E > |U|$) и для которых $t(E) = \pm 1$, $r(E) = 0$ (см. (6)), формула (33) принимает вид

$$\tau(E; d) = \frac{d}{v} \left\{ \frac{1}{2} \frac{k_{-u}^2 + k^2}{k_{-u}^2} [|\psi_{>}(E)|^2 + |\psi_{<}(E)|^2] + \frac{k_0^2}{k_{-u}^2} 2 \text{Re}[\psi_{>}(E) \psi_{<}^*(E)] \right\}, \quad (34)$$

где $d/v(E)$ – время, за которое частица с энергией E проходит пространственную область размера d в отсутствие потенциала. Таким образом, выражение в фигурных скобках в (34) показывает разницу между временем пребывания в области потенциальной ямы (барьера) и “свободным” временем пребывания $d/v(E)$.

Из сказанного выше следует, что в общем случае время пребывания зависит энергетического спектра исходного волнового пакета $\psi_{>(<)}(E)$ и его нереально определить, например, просто через $t(E; d)$ (31) (то же самое, разумеется, справедливо для времени прибытия). Интересно рассмотреть энергетическую зависимость времени пребывания (33) и влияние на него компонент исходного волнового пакета $\psi_{<}(E)$, движущихся в обратном направлении. Для этого используем гауссов исходный волновой пакет, задаваемый формулами (15) и (16), и перейдем к безразмерным переменным, определенным в предыдущем разделе. В результате из (30)–(32) получаем

$$\begin{aligned} \tau(0, d) &= \int_0^\infty d\tilde{E} \tilde{\tau}(\tilde{E}; d), \quad \tilde{\tau}(\tilde{E}; d) = \tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d) + \tilde{\tau}_{<}(\tilde{E}; d) + \tilde{\tau}_{><}(\tilde{E}; d), \\ \tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d) + \tilde{\tau}_{<}(\tilde{E}; d) &= \frac{t_d \tilde{\sigma}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}}} \frac{2\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}} (2\tilde{E} + \tilde{U}) + \tilde{U} \sin(2\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}})}{4\tilde{E}(\tilde{E} + \tilde{U}) + \tilde{U}^2 \sin^2(\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}})} \times \\ &\times \left\{ \exp\left[-2\left(\sqrt{\tilde{E}_i} - \sqrt{\tilde{E}}\right)^2 \tilde{\sigma}^2\right] + \exp\left[-2\left(\sqrt{\tilde{E}_i} + \sqrt{\tilde{E}}\right)^2 \tilde{\sigma}^2\right] \right\}, \\ \tilde{\tau}_{><}(\tilde{E}; d) &= \frac{2t_d \tilde{\sigma}}{\sqrt{2\pi}} \times \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{-2i\sqrt{\tilde{E}}\tilde{x}_i}}{\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}}} \times \right. \\ &\times \frac{(2\tilde{E} + \tilde{U}) \sin(2\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}}) + 2\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}} \tilde{U} - 4i\sqrt{\tilde{E}} \sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}} \sin^2(\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}})}{\left[i(2\tilde{E} + \tilde{U}) \sin(\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}}) - 2\sqrt{\tilde{E}} \sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}} \cos(\sqrt{\tilde{E} + \tilde{U}}) \right]^2} \times \\ &\times \exp\left[-\left(\sqrt{\tilde{E}_i} - \sqrt{\tilde{E}}\right)^2 \tilde{\sigma}^2\right] \exp\left[-\left(\sqrt{\tilde{E}_i} + \sqrt{\tilde{E}}\right)^2 \tilde{\sigma}^2\right] \Big\}, \end{aligned} \quad (35)$$

где характеристическое время

$$\frac{t_d}{2} = \frac{\hbar}{2E_d} = \frac{d}{v(E)} \sqrt{\tilde{E}} = \frac{d}{v(E_i)} \sqrt{\tilde{E}_i},$$

т.е. оно равно времени, проведенному “свободной” частицей с энергией $E = E_d$ ($\tilde{E} = 1$) в области потенциальной ямы (барьера) шириной d , поэтому $\tilde{\tau}(\tilde{E}; d)$ имеет размерность времени. Относительные вклады компонент $\tilde{\tau}_{>(<) }(\tilde{E}; d)$, движущихся в прямом (обратном) направлении, и интерференционного члена $\tilde{\tau}_{><}(\tilde{E}; d)$ во время пребывания $\tau(0, d)$ (35) зависят от значения параметра $\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2$. Если выполнено второе неравенство (22), т.е. $\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \gg 1$, то вклады во время пребывания (35) компонент, движущихся в обратном направлении, и интерференционных слагаемых много меньше, чем вклады компонент $\tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d)$, движущихся в прямом направлении, поэтому в первом приближении в пределе, задаваемом условиями (22), членами первого типа можно пренебречь. Более того, интеграл от $\tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d)$ по $\tilde{E}$ можно оценить асимптотически, поскольку при $\tilde{E} = \tilde{E}_i$ подынтегральное выражение имеет острый максимум. В результате получим

$$\tau(0, d) \sim \tau_{>}(0, d) = \frac{d}{v(E_i)} \frac{\tilde{E}_i}{\sqrt{\tilde{E}_i + \tilde{U}}} \frac{2\sqrt{\tilde{E}_i + \tilde{U}} (2\tilde{E}_i + \tilde{U}) + \tilde{U} \sin(2\sqrt{\tilde{E}_i + \tilde{U}})}{4\tilde{E}_i(\tilde{E}_i + \tilde{U}) + \tilde{U}^2 \sin^2(\sqrt{\tilde{E}_i + \tilde{U}})}, \quad (36)$$

что совпадает с выражением (31) для $t(E_i; d)$, записанным в безразмерных переменных. Следует подчеркнуть, что этот результат представляет только первый член

асимптотического разложения выражения $\int_0^\infty d\tilde{E} \tau_{>}(\tilde{E}; d)$ при малом значении параметра $1/\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2$, т. е. для исходного волнового пакета с узким распределением импульсов.

Для резонансных энергий, удовлетворяющих условию $k_{-u}d = \pi n$ (n – целое число, отличное от нуля, k_{-u} – вещественное число), которое в безразмерных переменных записывается как $\tilde{E}_i + \tilde{U} = \pi^2 n^2$, выражение (36) принимает вид

$$\frac{\tau_{>}^r(0, d)v(E_i)}{d} = \frac{2\tilde{E}_i + \tilde{U}}{2(\tilde{E}_i + \tilde{U})} = \frac{\tilde{E}_i + \pi^2 n^2}{2\pi^2 n^2}. \quad (37)$$

При $\tilde{U} > 0$ (яма) должно удовлетворяться неравенство $\tilde{U} = \pi^2 n^2 - \tilde{E}_i > 0$ (n ограничено снизу), и при $\pi^2 n^2 \gg \tilde{E}_i$, что имеет место при достаточно больших $\tilde{U}$, асимптотическое относительное резонансное время пребывания (37) стремится к $1/2$. При $\tilde{U} < 0$ (барьер) должно удовлетворяться условие $|\tilde{U}| = \tilde{E}_i - \pi^2 n^2 > 0$ ($\tilde{E}_i > |\tilde{U}|$, n ограничено малыми значениями, определяемыми $\tilde{E}_i$), и при $\pi^2 n^2 \ll \tilde{E}_i$ время пребывания (37) изменяется как $\tilde{E}_i/2\pi^2 n^2$.

Если $\tilde{E}_i + \tilde{U} \rightarrow 0$ (точки поворота в классической физике), что может иметь место только при $\tilde{U} < 0$, асимптотическое относительное время пребывания $\tau_{>}(0, d)v(E_i)/d$ (36) сводится к

$$\frac{\tau_{>}(0, d)v(E_i)}{d} = \frac{4\tilde{E}_i}{4\tilde{E}_i + \tilde{U}^2} < 1, \quad \tilde{E}_i - |\tilde{U}| \rightarrow 0. \quad (38)$$

В отсутствие потенциала ($U = 0$) время пребывания равно “свободному” времени пребывания $d/v(E_i)$.

Интересно рассмотреть график зависимости относительного времени пребывания (36) от амплитуды потенциала $\tilde{U}$, меняющейся от положительных значений (яма) до отрицательных (барьер). Формула (36) справедлива как для $\tilde{U} > 0$, так и для $\tilde{U} < 0$, причем во втором случае при $\tilde{E}_i - |\tilde{U}| < 0$ соотношение (31) принимает вид

$$\frac{\tau_{>}(0, d)v(E_i)}{d} = \frac{\tilde{E}_i}{\sqrt{|\tilde{U}| - \tilde{E}_i}} \frac{2\sqrt{|\tilde{U}| - \tilde{E}_i} (|\tilde{U}| - 2\tilde{E}_i) + |\tilde{U}| \operatorname{sh} \left(2\sqrt{|\tilde{U}| - \tilde{E}_i} \right)}{4\tilde{E}_i (|\tilde{U}| - \tilde{E}_i) + \tilde{U}^2 \operatorname{sh}^2 \left(\sqrt{|\tilde{U}| - \tilde{E}_i} \right)}. \quad (39)$$

На рис. 3 показана зависимость $\tau_{>}(0, d)v(E_i)/d$ (36) от $\tilde{U}$ для широкого диапазона изменения $\tilde{U} = -5 \cdot 10^2 \div 10^3$ и $\tilde{E}_i = 10^2$. Можно видеть последовательность резонансов при $\tilde{U} > 0$, амплитуды которых стремятся к $1/2$ при достаточно больших n , $n^2 \gg \tilde{E}_i/\pi^2$, в то время как при $\tilde{U} < 0$ имеется ограниченная последовательность резонансов с $n^2 < \tilde{E}_i/\pi^2$ (для $\tilde{E}_i > |\tilde{U}|$) с большими амплитудами, поскольку в области потенциального барьера частица движется медленнее, чем в области потенциальной ямы. Такое поведение соответствует приведенному выше анализу.

Рис. 3. Зависимость асимптотического времени пребывания от амплитуды потенциальной ямы (барьера) для сверхузкого распределения по энергии исходного волнового пакета ($\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \rightarrow \infty$).

Для более реалистичной оценки времени $\tau(0, d)$, задаваемого в (35), и влияния на него компонент начальной волновой функции численно проинтегрируем по $\tilde{E}$ безразмерное время пребывания $\tau(0, d)v(E_i)/d = 2\sqrt{\tilde{E}_i} \tau(0, d)/t_d$ при $\tilde{E}_i = 10^2$ и $\tilde{U} = -200 \div 10^3$. Заметим, что выражение (35) имеет особенность при $\tilde{E} = 0$ в отсутствие потенциала ($\tilde{U} = 0$). Чтобы избежать этой особенности, исключим точку $\tilde{U} = 0$ из области изменения $\tilde{U}$. На рис. 4 показана зависимость от $\tilde{U}$ безразмерного времени пребывания при $\tilde{\sigma} = 1/3$, т. е. когда вклад слагаемых $\tilde{\tau}_{<}(\tilde{E}; d)$ и $\tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d)$ во время пребывания мал. Как и ожидалось, эта зависимость аналогична представленной на рис. 3, она демонстрирует последовательность резонансов (некоторые различия можно объяснить тем фактом, что на рис. 3 представлены результаты, полученные из асимптотического выражения (36) для времени пребывания при $\tilde{E}_i \tilde{\sigma}^2 \rightarrow \infty$). При $\tilde{\sigma} = 0.05$ вклады компонент $\tilde{\tau}_{<}(\tilde{E}; d)$, движущихся в обратном направлении, и интерференционных членов $\tilde{\tau}_{>}(\tilde{E}; d)$ являются существенными, что можно видеть на рис. 5, значительно отличающемся от рис. 4. В этом случае зависимость от $\tilde{U}$ времени пребывания характеризуется увеличением числа резонансов с большими амплитудами (однако значения амплитуд этих острых пиков не очень надежны вследствие ограниченной точности графика вблизи соответствующих значений $\tilde{U}$). Такая картина может быть обусловлена увеличением области энергии (для рассматриваемого волнового пакета с широким распределением по энергии), которая вносит вклад в интеграл по $\tilde{E}$ (случай $\tilde{\sigma} = 1/3$ соответствует ситуации, когда энергия практически равна $\tilde{E}_i$), а также влиянием компонент исходного волнового пакета, движущихся в обратном направлении. Такая картина соответствует представленной на рис. 2 зависимости, где показаны более сложная интерференционная картина в пространстве и более широкое распределение по времени в случае широкого (по распределению энергии) исходного волнового пакета в сравнении со случаем $\tilde{\sigma} = 1/3$ (см. рис. 1).

Рис. 4. Зависимость времени пребывания от амплитуды потенциальной ямы (барьера) для случая узкого распределения по энергии исходного волнового пакета ($\tilde{\sigma} = 1/3$).

Рис. 5. Зависимость времени пребывания от амплитуды потенциальной ямы (барьера) для случая широкого распределения по энергии исходного волнового пакета ($\tilde{\sigma} = 0.05$).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы решили точно зависящее от времени уравнение Шредингера для частицы в присутствии одномерной прямоугольной потенциальной ямы (барьера). Решение (волновая функция частицы) представляет собой сумму слагаемых, соответствующих движению в прямом и обратном направлениях, при этом учитывается, что в общем случае исходный волновой пакет, заключенный в ограниченной области пространства и представляющий частицу, содержит как положительные, так и отрицательные компоненты импульса. Обе компоненты волновой функции выражаются в терминах интегралов от элементарных функций по полуограниченной области изменения энергии $E = 0 \div \infty$ (в случае ямы связанные состояния не дают вклада в решение). Таким образом, плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$ нахождения частицы в точке (x, t) пространства-времени, если исходно она была локализована в некоторой пространственной области и двигалась в некотором направлении, вообще говоря, определяется плотностью вероятности, соответствующей компоненте волнового пакета, движущейся в данном направлении $|\psi_>(x, t)|^2$, а также плотностями вероятности, связанными с компонентой, движущейся в противоположном направлении $|\psi_<(x, t)|^2$, и их интерференцией $2 \operatorname{Re}[\psi_>(x, t)\psi_<^*(x, t)]$. В случае, когда исходный волновой пакет является гауссовым, мы показали, что вклад компонент, движущихся в обратном направлении, в плотность вероятности $|\psi(x, t)|^2$ мал, если исходный волновой пакет имеет узкое распределение по энергии (импульсу), и получили асимптотические значения $|\psi_>(x, t)|^2$ в различных пространственных областях относительно области потенциальной ямы (барьера). Мы численно построили график точного результата для $|\psi(x, t)|^2$ в пространственной области ямы ($U > 0$) и показали, что компоненты волнового пакета, движущиеся в обратном направлении, существенно меняют плотность вероятности, если исходный волновой пакет является достаточно широким в энергетическом (импульсном) пространстве. Этот довольно парадоксальный квантово-механический результат проявляется в проблемах, связанных с измерением времени в квантово-механических эффектах.

Полученное решение применяется для вычисления времени прибытия и времени пребывания частицы в различных пространственных областях относительно области потенциальной ямы (барьера). Как и прежде, для узкого распределения по импульсам исходного волнового пакета аналитическое асимптотическое значение главного (в данном случае) члена, вносящего вклад во время пребывания в области потенциальной ямы (барьера), обусловлено компонентами плотности вероятности $|\psi_>(x, t)|^2$, соответствующими движению в прямом направлении. Оно было получено и представлено графически как функция амплитуды потенциала U , которая меняется от положительного значения (яма) до отрицательного (барьер). Чтобы показать, как компоненты, движущиеся в обратном направлении, и интерференционные компоненты плотности вероятности влияют на время пребывания, мы численно визуализировали точное выражение для этой величины как функцию амплитуды U (значения которой меняются от положительных до отрицательных) как для узкого (когда вклад компонент, движущихся в обратном направлении, мал), так и для широкого (в энергетическом пространстве) исходного волнового пакета. В последнем случае наблюдается существенное изменение зависимости времени пребывания от амплитуды потенциала U .

Кроме связи с фундаментальными проблемами квантовой механики, полученные результаты также могут быть важны для кинетической теории наноструктур, где рассмотренный нами прямоугольный потенциал (1) часто используется для моделирования потенциального профиля в многослойных структурах, например в приборах спинтроники. Полученные результаты для времени пребывания также могут представлять интерес в связи с проведенным недавно экспериментом, в котором исследуется время пересечения барьера, а также его интерпретацией, представленной в работе [16].

Список литературы

- [1] A. D. Baute, I. L. Egusquiza, J. G. Muga, *J. Phys. A*, **34**:20 (2001), 4289–4299.
- [2] A. D. Baute, I. L. Egusquiza, J. G. Muga, *Int. J. Theor. Phys. Group Theory Nonlinear Opt.*, **8**:1 (2002), 1–17, arXiv: quant-ph/0007079.
- [3] J. G. Muga, R. Sala Mayato, I. L. Egusquiza (eds.), *Time in Quantum Mechanics*, v. 1, Lecture Notes in Physycs, **734**, Springer, Berlin, 2008; J. G. Muga, A. Ruschhaupt, A. del Campo (eds.), *Time in Quantum Mechanics*, v. 2, Lecture Notes in Physycs, **789**, Springer, Berlin, 2009.
- [4] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.*, **61**:21 (1988), 2472–2475.
- [5] R. Julliere, *Phys. Lett. A*, **54**:3 (1975), 225–226; P. LeClair, J. S. Moodera, R. Meservay, *J. Appl. Phys.*, **76**:10 (1994), 6546–6548.
- [6] A. O. Barut, I. H. Duru, *Phys. Rev. A*, **38**:11 (1988), 5906–5909.
- [7] V. F. Los, A. V. Los, *J. Phys. A*, **43**:5 (2010), 055304, 12 pp.
- [8] V. F. Los, A. V. Los, *J. Phys. A*, **44**:21 (2011), 215301, 16 pp.
- [9] V. F. Los, M. V. Los, *J. Phys. A*, **45**:9 (2012), 095302, 16 pp.
- [10] Р. Фейнман, А. Хибс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, М., 1968.
- [11] J. G. Muga, S. Brouard, R. F. Snider, *Phys. Rev. A*, **46**:9 (1992), 6075–6078.
- [12] S. Cordero, G. Garcia-Calderón, *J. Phys. A*, **43**:18 (2010), 185301, 18 pp.
- [13] G. R. Allcock, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **53**:2 (1969), 253–285; 286–310; 311–348.
- [14] J. G. Muga, C. R. Leavens, *Phys. Rep.*, **338**:4 (2000), 353–438.
- [15] M. Buttiker, *Phys. Rev. B*, **27**:10 (1983), 6178–6188.
- [16] E. A. Galapon, *Phys. Rev. Lett.*, **108**:17 (2012), 170402, 5 pp.

Поступила в редакцию 10.03.2013