

# КВАНТОВАЯ ТОМОГРАФИЯ КАК НОВЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ КВАНТОВЫХ ПРОЦЕССОВ

А. С. Архипов, Ю. Е. Лозовик\*

Институт спектроскопии Российской академии наук  
142190, Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 10 июля 2003 г.

Предложен новый метод расчетов *ab initio* нестационарных квантовых процессов, основанный на формулировке квантовой механики в вероятностном представлении, с помощью неотрицательно определенной функции (квантовой томограммы). Суть метода состоит в том, что в пространстве, где определена квантовая томограмма, рассматривается ансамбль траекторий, связанных с характеристиками эволюционного уравнения для квантовой томограммы. Этот метод применен для детального изучения нестационарного туннелирования волнового пакета. Наблюдается хорошее соответствие результатов точному численному решению уравнения Шредингера для этой системы. Получены распределения плотности вероятности в пространстве координат и импульсов в последовательные моменты времени. Для нестационарного туннелирования волнового пакета рассчитаны вероятность проникновения за барьер и время туннелирования в зависимости от начальной энергии.

PACS: 03.65.Wj, 02.70.-Ns, 03.65.Xp

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из важнейших направлений в современной квантовой физике является компьютерное моделирование квантовых процессов. В последнее время в этом направлении были достигнуты значительные успехи, однако имеются и существенные трудности. В частности, в большинстве методов моделирования используются величины, не являющиеся положительно определенными, такие как волновая функция, функция Вигнера и т. д. (см., например, обзоры [1, 2]). В результате возникают проблемы, связанные со сходимостью интегралов, и это особенно актуально для ферми-систем («проблема знака»). Возможно, выходом из такого положения было бы использование неотрицательно определенной функции, описывающей квантовое состояние системы.

Действительно, существуют представления квантовой механики, в которых состояние системы описывается с помощью неотрицательно определенных функций в фазовом пространстве ([3–5], см. также [1]) или в пространстве растянутых и повернутых систем координат. Соответствующая функция назы-

вается маргинальным распределением, или квантовой томограммой [6–11] и замечательна тем, что она является распределением вероятности, полностью описывающим квантовое состояние [12, 13]. Квантовая томограмма — это функция, зависящая от переменных  $\{X, \mu, \nu\}$ , где  $X = \mu q + \nu p$ ,  $q$  и  $p$  — соответственно координаты и импульсы системы,  $\mu$  и  $\nu$  — параметры поворота и растяжения системы координат в фазовом пространстве. Квантовая томограмма неотрицательно определена и нормирована по  $X$  и, следовательно, является функцией распределения величины  $X$ .

В данной работе мы предлагаем новый метод компьютерного моделирования нестационарных квантовых процессов, основанный на томографической формулировке квантовой механики. В рамках этого метода для описания эволюции системы вводится ансамбль траекторий в пространстве  $\{X, \mu, \nu\}$ , подчиняющихся динамическим уравнениям, полученным из эволюционного уравнения для квантовой томограммы. В отличие от методов моделирования, основанных на численном решении уравнения Шредингера на сетке, методы, использующие траектории (в частности, в фазовом пространстве), позволяют рассматривать относи-

\*E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

тельно большое число степеней свободы, поскольку в этом случае не требуется хранить в памяти компьютера огромные массивы чисел, представляющие, например, волновую функцию. Так, метод «вигнеровских траекторий» в фазовом пространстве, использующий вигнеровскую формулировку квантовой механики [14], был недавно успешно применен для изучения туннелирования волнового пакета [15–17], а также нескольких тождественных взаимодействующих частиц [17].

С помощью предложенного метода рассматривается задача о нестационарном туннелировании волнового пакета через потенциальный барьер. Найдена эволюция распределения плотности вероятности в координатном и импульсном пространствах. Для анализа нестационарного туннелирования рассчитаны вероятность прохождения волнового пакета за барьер и время туннелирования. Результаты сравниваются с точным численным решением уравнения Шредингера. Метод протестирован также сравнением с точным решением для волнового пакета в гармоническом потенциале, в частности, для когерентного состояния. Описание метода представлено в разд. 2. Основные результаты приведены в разд. 3 (движение в осцилляторе) и разд. 4 (нестационарное туннелирование). Выводы изложены в разд. 5.

## 2. МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

### 2.1. Описание квантовой эволюции с помощью траекторий в пространстве $\{X, \mu, \nu\}$

Квантовая томограмма  $w(X, \mu, \nu)$  связана с матрицей плотности  $\rho(q, q')$  соотношением [18, 19]

$$\rho(q, q') = \frac{1}{2\pi} \int w(X, \mu, q - q') \times \exp \left[ i \left( X - \frac{\mu(q + q')}{2} \right) \right] d\mu dX, \quad (1)$$

$$w(X, \mu, \nu) = \frac{1}{4\pi^2} \times \int \exp \{ -i [k(X - \mu q - \nu p) + p(q - q')] \} \times \rho(q, q') dp dk dq dq'. \quad (2)$$

Рассмотрим частицу массой  $m$  в одномерном пространстве. Если гамильтониан системы

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad (3)$$

то, применив интегральное преобразование (2) к нестационарному уравнению, описывающему эволюцию матрицы плотности, имеем [6]

$$\dot{w} - \frac{\mu}{m} \frac{\partial w}{\partial \nu} - 2 \frac{\partial V(\tilde{q})}{\partial q} \left( \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial X} \right) w + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{(2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} V(\tilde{q})}{\partial q^{2n+1}} \left( \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial X} \right)^{2n+1} w = 0, \quad (4)$$

где мы приняли  $\hbar = 1$ , а  $\tilde{q}$  выражается следующим образом:

$$\tilde{q} = - \left( \frac{\partial}{\partial X} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu}. \quad (5)$$

Уравнение (4) можно переписать в виде

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w}{\partial X} G_X(X, \mu, \nu) + \frac{\partial w}{\partial \mu} G_\mu(X, \mu, \nu) + \frac{\partial w}{\partial \nu} G_\nu(X, \mu, \nu) = 0, \quad (6)$$

где функции  $G$  зависят от квантовой томограммы, ее производных и первообразных (первообразные соответствуют членам, содержащим  $(\partial/\partial X)^{-1}$ , в (4)). Для рассмотренной нами задачи функции  $G$  в явном виде приведены ниже. Эволюционное уравнение (6) имеет вид уравнения непрерывности для квантовой томограммы:

$$\frac{dw}{dt} = \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w}{\partial X} \dot{X} + \frac{\partial w}{\partial \mu} \dot{\mu} + \frac{\partial w}{\partial \nu} \dot{\nu} = 0. \quad (7)$$

Это уравнение аналогично уравнению непрерывности для классической функции распределения или уравнению Лиувилля, характеристики которого — классические траектории в фазовом пространстве, подчиняющиеся гамильтоновым уравнениям движения. Квантовая томограмма неотрицательно определена, и мы используем ее как функцию распределения траекторий в пространстве  $\{X, \mu, \nu\}$ . Из сравнения уравнений (6) и (7) видно, что в данном случае уравнения движения для траекторий имеют вид

$$\begin{aligned} \dot{X} &= G_X(X, \mu, \nu), & \dot{\mu} &= G_\mu(X, \mu, \nu), \\ \dot{\nu} &= G_\nu(X, \mu, \nu). \end{aligned} \quad (8)$$

Ансамбль траекторий вводится, чтобы избежать прямого вычисления функции распределения. Так, методы конечных разностей используют сетку, на которой задается, например, волновая функция при численном решении уравнения Шредингера. Такой подход зачастую позволяет добиться высокой точности, однако число элементов массива, представляющего волновую функцию, и число элементарных

операций, соответствующих переходу на очередной временной «слой», растет экспоненциально с увеличением числа степеней свободы. Из-за этого сеточные методы моделирования трудно применять уже для изучения систем с четырьмя-пятью степенями свободы. В то же время методы, использующие траектории, позволяют рассматривать системы, состоящие из тысяч и более частиц, например, в классической молекулярной динамике. При моделировании методом классической молекулярной динамики используются независимые траектории в фазовом пространстве. Мы же рассматриваем квантовомеханические задачи, поэтому в правой части уравнений движения (8) для квантовых траекторий стоит функция, зависящая от функции их распределения, т. е. от плотности траекторий в данной точке. Поэтому в данном методе траектории, вообще говоря, не являются независимыми. Ансамбль траекторий используется, чтобы избежать прямого вычисления квантовой томограммы на сетке. Однако квантовая томограмма входит в уравнения движения для траекторий. Поскольку мы отказываемся от вычисления квантовой томограммы в явном виде, для получения правой части уравнений движения (8) придется использовать некоторую аппроксимацию этой функции. Мы используем локальную экспоненциальную аппроксимацию (см. также аналогичную аппроксимацию для функции Вигнера в [17] и цитируемую там литературу)

$$w(X, \mu, \nu) = w_0 \exp \left\{ -[(y - y_a(t))A_a(t)(y - y_a(t)) + b_a(t)(y - y_a(t))] \right\}, \quad (9)$$

где  $y = \{X, \mu, \nu\}$ ,  $y_a$  — рассматриваемая точка; матрица  $A_a$  и вектор  $b_a$  — параметры этой аппроксимации. Вместо производных и первообразных квантовой томограммы в эволюционное уравнение (4) теперь входят некоторые комбинации этих параметров. Матрицу  $A_a$  и вектор  $b_a$  можно найти, вычислив средние величины  $X, \mu, \nu$  и их средние произведения в окрестности рассматриваемой точки. После этого функции  $G$  становятся известными и уравнения (8) можно решить численно.

Аппроксимация (9) не универсальна, но она дает хорошие результаты, если среднее расстояние между траекториями не очень велико и соответствующая квантовая томограмма (функция распределения) достаточно гладкая. Например, эта аппроксимация может оказаться неприменимой, если рассматривать плоскую волну с волновым вектором  $k$ , при этом

$$w(X, \mu = 0, \nu = 1) = \delta(X - k).$$

Эту аппроксимацию следует использовать с осторожностью также при изучении инфинитного движения, поскольку в этом случае расстояние между траекториями увеличивается со временем. Если в окрестности точки, где применяется аппроксимация (9), имеется слишком мало траекторий, то она не будет адекватно восстанавливать квантовую томограмму из-за недостаточной статистики.

Мы рассматриваем движение волнового пакета в гармоническом осцилляторе и туннелирование из потенциальной ямы через барьер. Сравнивая результаты моделирования в представлении квантовой томографии с точным численным расчетом, убедимся, что аппроксимация (9) подходит для данных задач (см. разд. 3 и 4). В случае туннелирования имеется как область финитного движения (в потенциальной яме), так и область инфинитного движения (за барьером), и все же аппроксимацию можно использовать. Для достаточно высокой начальной энергии пакет почти полностью проходит за барьер, поэтому эволюция большей части траекторий соответствует неограниченному движению, и аппроксимация (9) уже не так хорошо подходит для решения квантовых уравнений движений (см. конец разд. 4). Но в целом локальная аппроксимация (9) оказывается вполне удовлетворительной даже для достаточно больших промежутков времени (см. рис. 5).

## 2.2. Вычисление средних значений

Для изучения рассматриваемых задач вычислим средние значения некоторых величин. В представлении квантовой томографии среднее значение  $\langle A \rangle$  физической величины (соответствующий оператор  $A(\hat{q}, \hat{p})$ ) вычисляется по формуле [20]

$$\langle A \rangle = \int A(\mu, \nu) e^{iX} w(X, \mu, \nu) dX d\mu d\nu, \quad (10)$$

где  $A(\mu, \nu)$  — фурье-образ символа Вейля  $A^W(q, p)$  оператора  $A(\hat{q}, \hat{p})$ :

$$A(\mu, \nu) = \int A^W(q, p) \exp[-i(\mu q + \nu p)] \frac{dq dp}{4\pi^2}. \quad (11)$$

Символ Вейля оператора  $A(\hat{q}, \hat{p})$  выражается следующим образом:

$$A^W(q, p) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d\xi d\eta \text{Tr} [A(\hat{q}, \hat{p}) e^{i\xi\hat{q} + i\eta\hat{p}}] e^{-i\xi q - i\eta p}. \quad (12)$$

Для вычисления средних значений мы используем следующую аппроксимацию квантовой томограммы:

$$w(X, \mu, \nu, t) = \sum_{j=1}^J \delta(X - X_j(t))\delta(\mu - \mu_j(t))\delta(\nu - \nu_j(t)), \quad (13)$$

где суммирование проводится по всем  $J$  траекториям;  $X_j(t)$ ,  $\mu_j(t)$ ,  $\nu_j(t)$  — координаты  $j$ -й траектории в пространстве  $\{X, \mu, \nu\}$  в момент времени  $t$ . Такая аппроксимация как раз и соответствует использованию ансамбля траекторий: в областях, где функция  $w(X, \mu, \nu)$  мала, траектории разрежены, а где функция  $w(X, \mu, \nu)$  велика, плотность траекторий выше. Чем больше траекторий используется, тем лучше применима аппроксимация (13). Если в процессе моделирования волновая функция частицы имеет вид компактного волнового пакета, пусть даже состоящего из нескольких отдельных частей, аппроксимацию (13) можно использовать, поскольку в этом случае имеются компактные наборы траекторий в пространстве  $\{X, \mu, \nu\}$  и можно набрать хорошую статистику. Такая ситуация имеет место для рассмотренных нами задач, поэтому использование данной аппроксимации не сильно искажает результаты по сравнению с точным квантовым расчетом (см. разд. 3 и 4).

Мы рассматриваем величины, зависящие либо только от  $q$ , либо только от  $p$  (см. разд. 4). В случае, если оператор  $A(\hat{q})$  зависит только от  $\hat{q}$ , выражение для  $\langle A \rangle$  принимает вид

$$\langle A \rangle = \int A(X)w(X, \mu = 1, \nu = 0) dX, \quad (14)$$

где  $A(X)$  — функция, соответствующая оператору  $A(\hat{q})$  в координатном представлении,  $A(X) = A(q = X)$ . Аналогично для операторов  $B(\hat{p})$  средние значения соответствующих физических величин даются формулой

$$\langle B \rangle = \int B(X)w(X, \mu = 0, \nu = 1) dX. \quad (15)$$

Так, плотности вероятности в координатном и импульсном пространствах соответственно выражаются как  $w(X, \mu = 1, \nu = 0)$  и  $w(X, \mu = 0, \nu = 1)$ . Для изучения туннелирования используем вероятность реакции и время туннелирования. Вероятность реакции определим как

$$\int_{q_a}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx, \quad (16)$$

где  $q_a = 0.6709$  (точка максимума потенциала). Максимальное значение вероятности реакции в соответ-

ствии с этим определением равно единице. Вероятность реакции показывает, какая часть пакета в данный момент находится за барьером. Пусть в начальный момент времени волновой пакет локализован слева от барьера и движется по направлению к нему. Тогда начальное значение вероятности реакции равно нулю, а впоследствии, в связи с прохождением над барьером и туннелированием, некоторые компоненты пакета оказываются справа от барьера и вероятность реакции возрастает.

Используемый метод позволяет найти время туннелирования волнового пакета, что является важной характеристикой туннелирования. Существует множество теоретических определений времени туннелирования [21–32]. Мы вычисляем время туннелирования как разность времен появления (см. [16, 33]) частиц в точках  $x_a$  и  $x_b$ , расположенных по разные стороны барьера:

$$t_T(x_a, x_b) = \langle t(x_b) \rangle - \langle t(x_a) \rangle. \quad (17)$$

Время появления в точке  $x_0$  определяется формулой

$$\langle t(x_0) \rangle = \frac{\int_0^{\infty} t |\psi(x_0, t)|^2 dt}{\int_0^{\infty} |\psi(x_0, t)|^2 dt}. \quad (18)$$

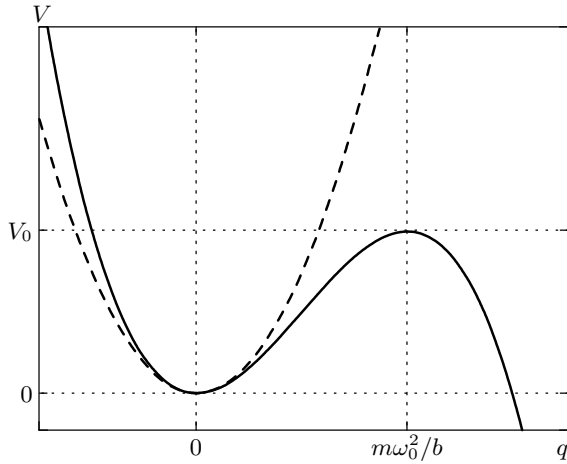
### 2.3. Модельная физическая задача

Далее (см. также разд. 3 и 4) мы рассматриваем движение волнового пакета в одномерном пространстве во внешнем потенциале

$$V(q) = \frac{m\omega_0^2 q^2}{2} - \frac{bq^3}{3}. \quad (19)$$

При  $b = 0$  этот потенциал соответствует гармоническому осциллятору. Если  $b > 0$ , то имеем потенциальную яму со стенкой бесконечной высоты слева и потенциальным барьером справа (рис. 1). Поскольку в формуле (19) имеются только вторая и третья степени координаты, все производные потенциала более чем третьего порядка равны нулю и эволюционное уравнение имеет вид ( $\hbar = 1$ ):

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\mu}{m} \frac{\partial w}{\partial \nu} + 2 \left[ -\frac{\partial V(\tilde{q})}{\partial q} \left( \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial X} \right) + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 V(\tilde{q})}{\partial q^3} \left( \frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial X} \right)^3 \right] w = 0. \quad (20)$$



**Рис. 1.** Внешний потенциал  $V(q)$  (19): штриховая линия — гармонический осциллятор,  $b = 0$ ; сплошная —  $b > 0$ . Высота барьера  $V_0 = m^3\omega_0^3/(6b^2)$

Для потенциала (19) уравнение эволюции записывается как

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\mu}{m} \frac{\partial w}{\partial \nu} + m\omega_0^2 \nu \frac{\partial w}{\partial \mu} - \frac{b\nu^3}{12} \frac{\partial^3 w}{\partial X^3} + b\nu \left( \frac{\partial}{\partial X} \right)^{-1} \frac{\partial^2 w}{\partial \mu^2} = 0. \quad (21)$$

Динамические уравнения (8) приобретают вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} &= \frac{b\nu^3}{12} \frac{1}{w} \frac{\partial^2 w}{\partial X^2}, \\ \frac{\partial \mu}{\partial t} &= m\omega_0^2 \nu - \frac{b\nu}{w} \left( \frac{\partial}{\partial X} \right)^{-1} \frac{\partial w}{\partial \mu}, \\ \frac{\partial \nu}{\partial t} &= -\frac{\mu}{m}. \end{aligned} \quad (22)$$

### 3. ВОЛНОВОЙ ПАКЕТ В ГАРМОНИЧЕСКОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ

Рассмотрим движение волнового пакета в гармоническом осцилляторе. Внешний потенциал описывается формулой (19) с  $b = 0$ . Используем систему единиц  $\hbar = m = \omega_0 = 1$ .

Для квадратичного потенциала динамические уравнения (22) не содержат членов с квантовой томограммой  $w$ . Это существенно упрощает моделирование и уменьшает временные затраты. В результате можно увеличить число динамических траекторий (по сравнению с моделированием движения в потенциале, где  $b \neq 0$ ) и добиться большой точности.

На рис. 2, 3 аналитическое решение задачи о движении волнового пакета в гармоническом осцилляторе (штриховые линии) сравнивается с результатами моделирования в представлении квантовой томографии (будем называть этот метод моделирования методом квантово-томографической динамики, КТД) — сплошные линии. Рассматривается движение гауссова волнового пакета с начальными средними координатой  $q_0 = -1$  и импульсом  $p_0 = 0$ , дисперсией в координатном пространстве  $\sigma_x = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 0.5$  (рис. 2). Для гауссова волнового пакета дисперсия в импульсном пространстве  $\sigma_p = 0.5/\sigma_x$ . Волновой пакет колеблется в осцилляторе с периодом  $T = 2\pi$ , расширяется в координатном пространстве и снова сжимается до начальной ширины за промежуток времени  $T/2$ . В импульсном пространстве расширение и сжатие происходят в противофазе этому процессу в координатном пространстве. На рис. 3 представлена эволюция когерентного состояния. Дисперсия в координатном пространстве примерно равна 0.7. Ширина такого пакета не изменяется при движении в осцилляторе.

Результаты КТД и аналитического решения очень близки (рис. 2, 3). Небольшие различия возникают лишь в результате того, что число траекторий и шаг по времени для КТД конечны. Это хорошее согласование говорит о том, что КТД для ряда задач может оказаться хорошим методом, дающим результат с высокой точностью. Оказывается, что этот метод можно применять для решения и более сложных задач, например, нестационарного туннелирования. Пример такого моделирования рассмотрен в следующем разделе.

### 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУННЕЛИРОВАНИЯ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА

Изучим туннелирование волнового пакета через барьер  $V(q)$ , описываемый формулой (19). Теперь используются атомные единицы измерения,  $\hbar = m_e = |e| = 1$ , где  $m_e$  и  $e$  — масса и заряд свободного электрона. Рассматривается частица с массой  $m = 2000$ . Параметры потенциала следующие:  $\omega_0 = 0.01$ ,  $b = 0.2981$ . У такого потенциала имеется минимум в точке  $q = 0$  ( $V(0) = 0$ ) и максимум в точке  $q = 0.6709$  ( $V(0.6709) = 0.015$ ). Следовательно, частица движется в потенциальной яме с бесконечной левой стенкой и барьером высотой 0.015 в точке  $q = 0.6709$ . Эта модель упрощенно описывает, например, нестационарное туннелирование ато-

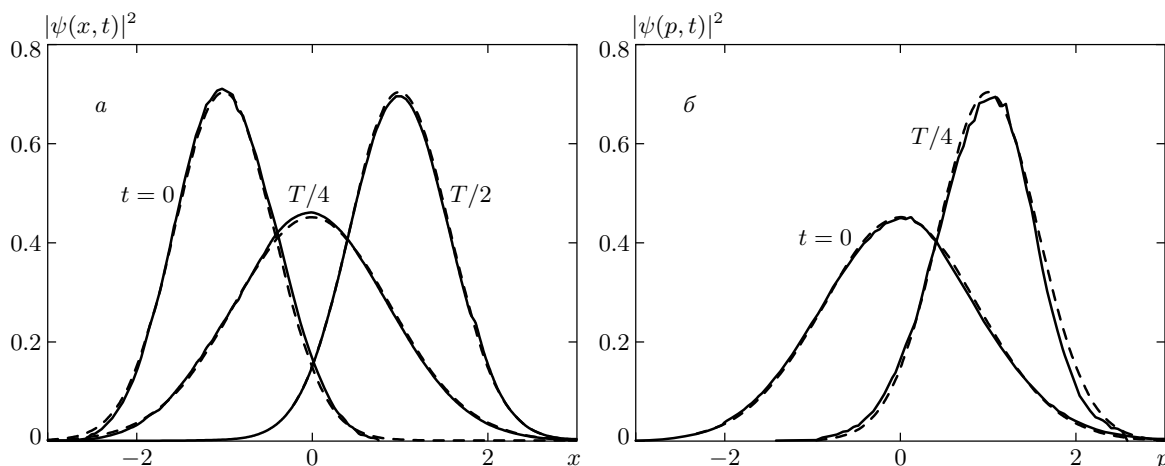


Рис. 2. Движение волнового пакета в гармоническом осцилляторе. Плотность вероятности в координатном (а) и импульсном (б) пространствах в моменты времени  $t = 0$ ,  $t = T/4$  и  $t = T/2$ : сплошные линии — моделирование методом КТД; штриховые — аналитическое решение ( $\hbar = m = \omega_0 = 1$ )

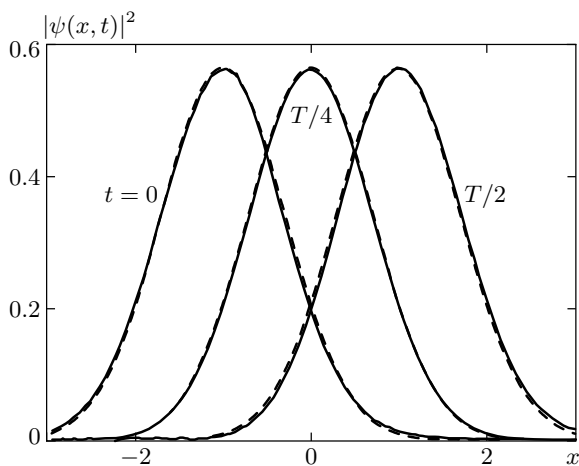


Рис. 3. Эволюция когерентного состояния гармонического осциллятора. Плотность вероятности в координатном пространстве в моменты времени  $t = 0$ ,  $t = T/4$  и  $t = T/2$ : сплошные линии — моделирование методом КТД; штриховые — аналитическое решение ( $\hbar = m = \omega_0 = 1$ )

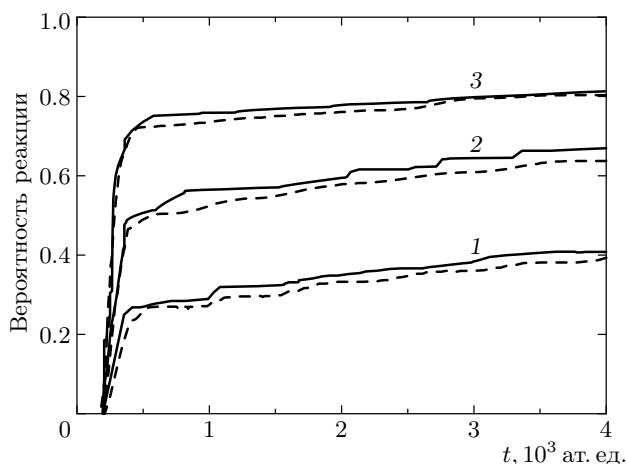
ма водорода из ловушки. Подобные задачи актуальны в связи с исследованиями в области атомной оптики. Так, чтобы получить когерентные пучки атомов (атомный лазер) можно попытаться использовать бозе-конденсат атомов. Существуют экспериментальные способы получения бозе-конденсата в ловушках. Переход от покоящегося бозе-конденсата к движущемуся в принципе возможен, если атомы конденсата туннелируют за границу ловушки. Для теоретического описания соответствующих явлений

необходимо научиться решать задачу о нестационарном туннелировании атомов.

В начальный момент времени волновой пакет находится слева от точки  $q = 0$ , его средний импульс равен нулю. Частица может либо колебаться в потенциальной яме, либо оказаться за барьером, протуннелировав или пройдя над ним. Вероятности этих процессов зависят от начальной энергии волнового пакета. Мы рассматриваем задачу, в которой все параметры фиксированы, кроме начальной средней координаты  $q_0$  волнового пакета (начальный средний импульс равен нулю, дисперсии волнового пакета в координатном и импульсном пространствах приблизительно равны соответственно 0.15 и 3.3).

#### 4.1. Вероятность реакции

На рис. 4 представлены временные зависимости вероятностей реакции, определяемых формулой (16), для трех значений начальной средней координаты волнового пакета  $q_0 = -0.2, -0.3, -0.4$ , с начальной средней энергией соответственно  $0.75V_0, 1.25V_0, 2.0V_0$ . Сплошные линии представляют результаты моделирования методом КТД, штриховые линии соответствуют численному решению уравнения Шредингера (точные квантовые вычисления). Из-за увеличения средней энергии с ростом  $|q_0|$  в волновом пакете растет число компонент с высокой энергией. Это приводит к тому, что больше компонент проходит за барьер — либо над барьером, либо туннелируют через него. Поэтому с ростом  $|q_0|$  возрастает и вероятность реакции (кривые, соответ-



**Рис. 4.** Безразмерные вероятности реакции, определяемые формулой (16), для трех значений начальной средней координаты волнового пакета: кривые 1, 2, 3 соответствуют  $q_0 = -0.2, -0.3, -0.4$  ат. ед. Сплошные кривые — моделирование методом КТД, штриховые — точное численное решение

ствующие различным  $q_0$ , располагаются друг над другом на рис. 4). Качественно вероятность реакции меняется со временем одинаково для всех рассмотренных здесь значений  $q_0$ . Компоненты, прошедшие за барьер, назад вернуться не могут, поскольку для  $q > 0.6709$  потенциал уменьшается с ростом координаты, так что вероятность реакции не может уменьшаться со временем. Сначала она быстро возрастает из-за прохождения над барьером компонент с энергией, большей его высоты (в этом можно убедиться, если рассмотреть классическое решение этой задачи, когда возможно лишь прохождение над барьером). Затем вероятность реакции продолжает медленно расти из-за туннелирования. Все эти характерные черты заметны на кривых, соответствующих как КТД, так и численному решению уравнения Шредингера.

Вероятность реакции для КТД получается немного больше, чем для точного численного решения. Также заметна некоторая разница в характере возрастания вероятности реакции для КТД и для точного решения: в первом случае кривые получаются менее гладкими. Эти различия связаны с конечным числом траекторий, используемых в КТД: для меньшего числа траекторий (не показано на рисунке) вероятность реакции еще сильнее напоминает ступени лестницы (что связано с некоторым завышением роли осцилляций волнового пакета в квантовой яме при использовании конечного числа

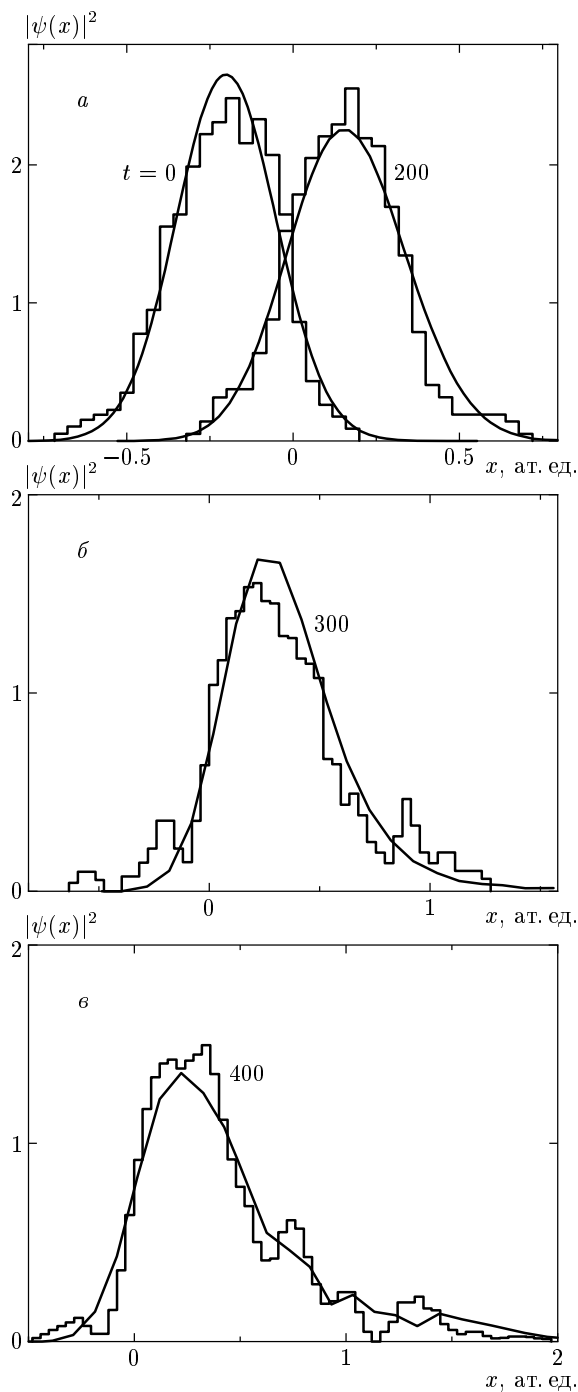
траекторий); количественное различие с точным расчетом также становится более сильным. Но для достаточно большого числа траекторий, как в случае, показанном на рис. 4, результаты КТД оказываются довольно близкими к результатам точного квантового вычисления (также получается хорошее согласие с результатами, полученными методом вignerовских траекторий [15]).

#### 4.2. Эволюция волнового пакета и время туннелирования

Кроме вероятности реакции мы получили и ряд новых качественных и количественных результатов, которые подробно описывают поведение волнового пакета в процессе туннелирования.

Здесь и далее мы рассматриваем туннелирование волнового пакета с начальным средним значением координаты  $q_0 = -0.2$ . Нормированные плотности вероятности в координатном пространстве,  $(|\psi(x)|^2)$ , представлены на рис. 5, в пространстве импульсов,  $(|\psi(p)|^2)$ , — на рис. 6. Рассмотрено несколько последовательных моментов времени. Сплошные непрерывные линии показывают форму волнового пакета, полученную с помощью точного квантового расчета. Гистограммы соответствуют результатам одного запуска КТД. Для одного и того числа траекторий можно провести несколько таких запусков и усреднить по ним плотность вероятности — тогда графики получатся более гладкими. Здесь мы хотим показать, что можно получить за один запуск КТД по сравнению с точным квантовым расчетом. Из-за этого соответствие между гистограммами (КТД) и сплошными линиями (точное решение) на рис. 5 не идеальное, но все же сходство очевидно.

Рассмотрим сначала эволюцию пакета в пространстве координат (рис. 5). Сначала волновой пакет имеет гауссовский вид (рис. 5а). Он движется как целое по направлению к минимуму потенциала в точке  $x = 0$  (начальный средний импульс равен нулю, но потенциал уменьшается в направлении  $x = 0$ ), проходит эту точку и сталкивается с барьером. В процессе движения волновой пакет расширяется (из-за дисперсии в пространстве импульсов, ср. правые и левые кривые на рис. 5а), а при взаимодействии с барьером его форма изменяется еще сильнее ( $t = 300$  на рис. 5б и  $t = 400$  на рис. 5в). Волновой пакет немного сжимается, некоторые его компоненты проходят через барьер, и прошедшая часть пакета появляется справа от барьера ( $x = 0.6709$ ). Поскольку вероятность преодолеть барьер тем выше, чем больше энергия налетающей частицы, то



**Рис. 5.** Плотность вероятности в координатном пространстве для КТД (гистограммы) и точного решения (сплошные линии), в моменты времени  $t = 0, 200$  ат. ед. (а),  $t = 300$  ат. ед. (б) и  $t = 400$  ат. ед. (в). Вершина барьера находится в точке  $0.6709$  ат. ед.,  $q_0 = -0.2$  ат. ед.

должно присутствовать обогащение прошедшей части волнового пакета высокоэнергетическими компонентами (см. ниже).

Все характерные детали, описанные выше, присутствуют как для точного решения, так и для КТД. Гистограммы на рис. 5 лучше соответствуют сплошным линиям, представляющим точное решение, для более ранних времен, но даже после взаимодействия с барьером (рис. 5в) сходство остается достаточно очевидным. Это свидетельствует о том, что аппроксимации (9) и (13) дают неплохие результаты для данной задачи.

Рассмотрим теперь эволюцию волнового пакета в пространстве импульсов. Чтобы подтвердить вывод об ускорении прошедшей части волнового пакета, приведем плотность вероятности в пространстве импульсов,  $|\psi(p)|^2$ , в моменты времени  $t = 0$  и  $t = 400$  (рис. 6). Поскольку волновая функция сначала имеет вид гауссовского волнового пакета, начальное распределение вероятности гауссово как в координатном, так и в импульсном пространствах (ср. рис. 5а и 6а). Однако после взаимодействия волнового пакета с барьером распределение вероятности в пространстве импульсов претерпевает значительные изменения (рис. 6б). В прошедшей части волнового пакета содержится больше (по сравнению со всем пакетом в начальном состоянии) компонент с большим импульсом, так как вероятность прохождения за барьером растет с ростом энергии. Это говорит о том, что барьер служит селектором энергии, взаимодействие с ним обогащает прошедшую часть компонентами с высокой энергией. Для распределения по импульсам на относительно больших временах ( $t = 400$ , рис. 6б) соответствие между гистограммой (КТД) и сплошным графиком (точное решение) немного хуже, чем для распределения в пространстве координат (рис. 5в). Причина в том, что мы работаем с ограниченным числом траекторий, а для  $t = 400$  приходится рассматривать достаточно большую область по импульсам, поскольку прошедшая часть пакета постоянно ускоряется. Из-за этого распределение по импульсам сильно расширяется со временем и траекторий со значениями  $\mu$  и  $\nu$ , достаточно близкими к  $\mu = 0$  и  $\nu = 1$ , для данного импульса  $p$  становится слишком мало (см. п. 2.2). Для рассматриваемого начального значения средней координаты  $q_0 = -0.2$  начальная энергия волнового пакета не очень велика (примерно  $0.75V_0$ , где  $V_0$  — высота барьера) и поэтому большая его часть остается в квантовой яме (в рассматриваемый момент времени  $t = 400$  только около 20% волнового пакета оказывается за барьером, см. рис. 4), из-за чего



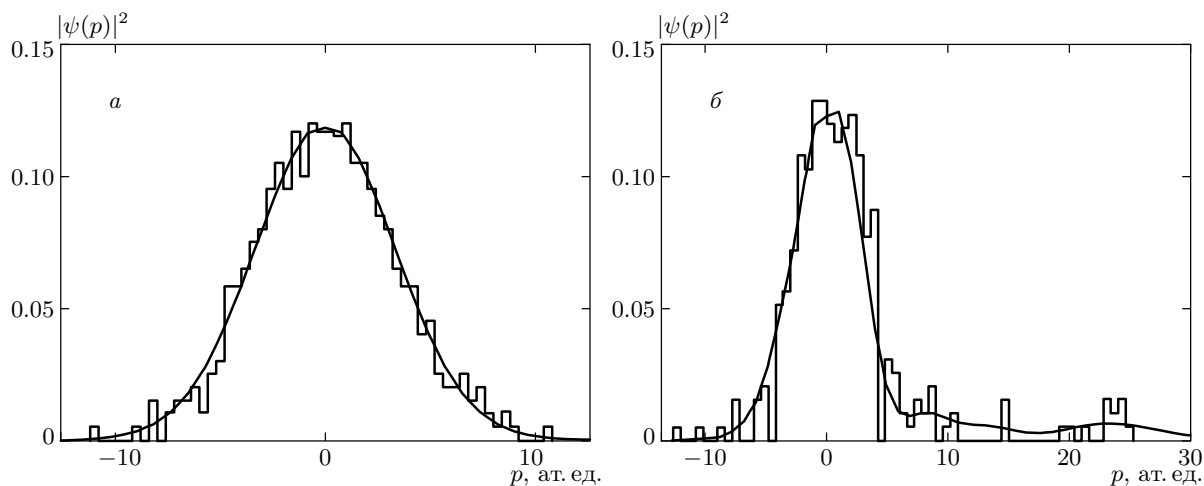


Рис. 6. Плотность вероятности в пространстве импульсов для КТД (гистограмма) и точного решения (сплошная линия) при  $t = 0$  (а) и  $t = 400$  ат. ед. (б)

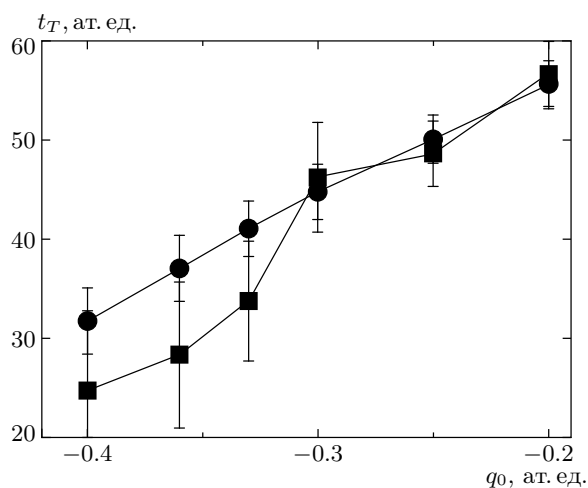


Рис. 7. Времена туннелирования  $t_T$  с погрешностями для нескольких значений начальной средней координаты волнового пакета  $q_0$ . Результаты КТД (квадраты) сравниваются с результатами точного квантового расчета (кружки)

волнового пакета  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$ . Обычно туннелирование тем сильнее, чем больше энергия. Увеличение энергии волнового пакета также соответствует увеличению средней скорости как прошедшей части, так и всего волнового пакета в целом. Тогда та часть волнового пакета, что оказывается за барьером, проходит область барьера (пространство между точками  $x_a$  и  $x_b$ ) быстрее, поэтому рост величины  $|q_0|$  вызывает уменьшение времени туннелирования. Результаты КТД (квадраты на рис. 7) отклоняются от результатов точного вычисления в пределах погрешностей расчета. Максимальное отклонение от точного результата наблюдается для больших значений  $|q_0|$ . Возможно, это связано с тем, что в этом случае пакет почти полностью проходит за барьер (см. рис. 4), так что эволюция большинства траекторий соответствует инфинитному ускоренному движению. В такой ситуации траектории далеко расходятся друг от друга и аппроксимация (13) представляет квантовую томограмму не так хорошо, как для меньших значений  $|q_0|$ .

распределение в координатном пространстве оказывается более компактным.

На рис. 7 приведена зависимость времени туннелирования волнового пакета от начального значения его средней координаты. Время туннелирования определяется формулой (17) как разность времен присутствия для точек  $x_a = 0.5 \cdot 0.6709$  и  $x_b = 2.0 \cdot 0.6709$  (в точке  $x = 0.6709$  потенциал достигает максимума). Если  $q_0 < 0$ , то чем больше его абсолютная величина, тем больше начальная энергия

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы разработали новый метод численного моделирования квантовых нестационарных процессов и применили его для изучения задачи о туннелировании волнового пакета через потенциальный барьер. Метод основан на томографической формулировке квантовой механики. Квантовая томограмма использована в некотором смысле как функция распре-

деления для ансамбля траекторий в пространстве  $\{X, \mu, \nu\}$ , где  $X = \mu q + \nu p$  — координата, измеренная в повернутой и растянутой системе отсчета, а  $q$  и  $p$  — соответственно координата и импульс системы. Траектории эволюционируют во времени в соответствии с уравнениями, напоминающими уравнения движения Гамильтона, поэтому может быть использован аналог метода молекулярной динамики.

Результаты моделирования движения волнового пакета в осцилляторе воспроизводят аналитическое решение с большой точностью. Для задачи о туннелировании волнового пакета с помощью нового метода получены различные величины, характеризующие туннелирование (вероятность прохождения за барьер, время туннелирования и др.). Эти результаты хорошо согласуются с результатами моделирования с помощью вигнеровских траекторий и точного квантового расчета.

Развитый метод обладает двумя преимуществами для описания квантового состояния: используется действительная положительно определенная функция, а в процессе моделирования вычисление этой функции заменяется рассмотрением эволюции ансамбля траекторий. Первое может оказаться полезным при моделировании ферми-систем, где существенные трудности («проблема знака») связаны с тем, что используемая для описания квантового состояния функция не является знакопостоянной. Второе, вероятно, позволит рассматривать большее число степеней свободы, чем это возможно в рамках методов, использующих вычисления на сетке. Поэтому мы надеемся, что метод квантово-томографической динамики станет удобным и мощным инструментом моделирования квантовых процессов.

Авторы выражают признательность INTAS, РФФИ и Министерству науки за финансовую поддержку. Один из авторов (А. С. А.) благодарит фонд «Династия» за предоставленную стипендию. Мы также признательны В. И. Манько за плодотворные обсуждения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. W. Lee, Phys. Rep. **259**, 147 (1995).
2. D. M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
3. K. Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. **22**, 264 (1940).
4. R. J. Glauber, Phys. Rev. Lett. **10**, 84 (1963).
5. E. C. G. Sudarshan, Phys. Rev. Lett. **10**, 277 (1963).
6. V. I. Man'ko, E-print archives: quant-ph/9902079.
7. S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, Phys. Lett. A **213**, 1 (1996).
8. V. V. Dodonov and V. I. Man'ko, Phys. Lett. **229A**, 335 (1997).
9. В. И. Манько, О. В. Манько, ЖЭТФ **85**, 430 (1997).
10. K. Vogel and H. Risken, Phys. Rev. A **40**, 2847 (1989).
11. S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, Found. Phys. **27**, 801 (1997).
12. S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, J. Opt. B **7**, 615 (1995).
13. G. M. D'Ariano, S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, J. Opt. B **8**, 1017 (1996); S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, Europhys. Lett. **37**, 79 (1997).
14. E. Wigner, Phys. Rev. **40**, 749 (1932).
15. A. Donoso and C. C. Martens, Phys. Rev. Lett. **87**, 223202 (2001).
16. Ю. Е. Лозовик, А. В. Филинов, ЖЭТФ **115**, 5, 1872 (1999).
17. Yu. E. Lozovik, A. V. Filinov, and A. S. Arkhipov, Phys. Rev. E **67**, 026707 (2003).
18. S. Mancini, V. I. Man'ko, and P. Tombesi, J. Mod. Opt. **44**, 2281 (1997).
19. V. I. Man'ko, L. Rosa, and P. Vitale, Phys. Rev. A **57**, 3291 (1998).
20. O. Man'ko and V. I. Man'ko, J. Rus. Laser Res. **18**, 407 (1997).
21. M. Büttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49**, 1739 (1982).
22. R. Landauer and Th. Martin, Sol. St. Comm. **84**, 115 (1992).
23. D. Sokolovski and J. N. L. Connor, Phys. Rev. A **47**, 4677 (1993).
24. А. И. Базь, ЯФ **5**, 229 (1967).
25. В. Ф. Рыбаченко, ЯФ **5**, 635 (1967).
26. M. Büttiker, Phys. Rev. B **27**, 6178 (1983).
27. E. H. Hauge and J. A. Stovneng, Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989).

- 
28. M. Büttiker and R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **30**, 451 (1986).
29. Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **122**, 1649 (1961).
30. J. J. Włodarz, Phys. Rev. A **65**, 044103 (2002).
31. A. D. Baute, I. L. Egusquiza, and J. G. Muga, Phys. Rev. A **65**, 032114 (2002).
32. S. Longhi, P. Laporta, M. Belmonte, and E. Recami, Phys. Rev. E **65**, 046610 (2002).
33. V. Delgado and J. G. Muga, Phys. Rev. A **56**, 3425 (1997).