Письма в ЖЭТФ, том 43, вып. 9, стр. 434 – 437 *10 мая 1986 г.*

О ТУННЕЛИРОВАНИИ С "ДИССИПАЦИЕЙ"

Ю.Каган, Н.В.Прокофьев

Рассмотрен общий подход к проблеме о туннелировании в условиях взаимодействия со средой, основанный на прямом определении интеграла перекрытия волновых функций системы. Анализируется двухъямная задача и одномерный кристалл в случае взаимодействия с фононами.

1. В последнее время значительный интерес вызывает задача о подбарьерном туннелировании частицы в условиях взаимодействия с возбуждениями среды. Обычно метод решения основывается на технике функционального интегрирования при специальном выборе вида гамильтониана взаимодействия (см. [1–3]). Существует альтернативный подход, основанный на прямом определении интеграла перекрытия многочастичных волновых функций системы, формирующихся при отсутствии канала туннелирования (см. [4]). Такой подход позволяет учесть флуктуационную перестройку барьера [5], которая выпадает из рассмотрения при использовании модельного спинового гамильтониана [6–8], отказаться от специального выбора взаимодействия, непосредственно выделить когерентное туннелирование (без реального возбуждения среды) и найти коэффициент квантовой диффузии D при переходе к кристаллу. Ниже в рамках этого подхода рассматривается задача туннелирования при взаимодействии с фононами.

2. Рассмотрим задачу о туннельном переходе между двумя ямами, нижние уровни которых сдвинуты относительно друг друга на величину ξ. Пусть эффективная амплитуда туннелирования $\tilde{\Delta}_0$, как и ξ, мала по сравнению с расстоянием до следующего уровня частицы в яме ω_0 и по сравнению с характерной частотой возбуждений среды ω_D

$$\tilde{\Delta}_0,\ \xi \ll \omega_0,\ \omega_D\,. \qquad (1)$$

Кроме того, будем предполагать, что $T \ll \omega_0$, и переход осуществляется только по нижнему уровню.

Частица живет в отдельной яме время $\tau \gg \tilde{\Delta}_0^{-1}$. За это время подавляющая часть возбуждений с энергией $\omega > \tau^{-1}$ адаптируется к одноямной ситуации, в результате чего формируется одноямная волновая функция системы $\psi^{(i)}(r, x)$, где r – координата частицы, x – коллективные координаты среды. Индекс $i = 1{,}2$ отвечает номеру ямы. Выделим в исходном потенциальном рельефе для частицы одну яму $U^{(i)}(r)$ и продолжим как обычно ее "берега". Обозначим через $H_1(r)$ разность между истинным потенциальным рельефом и выделенной нераспадной ямой. Тогда для матричного элемента перехода частицы из одной ямы в другую имеем

$$M_{\nu\nu'} = \langle\, \psi_\nu^{(2)}(r, x)\, |\, H_1(r)\, |\, \psi_{\nu'}^{(1)}(r, x)\rangle\,. \qquad (2)$$

Знание недиагонального и диагонального по состоянию среды ν матричного элемента (2) полностью решает задачу о туннелировании при взаимодействии со средой, включая проблему когерентного перехода с образованием зоны ($\nu' = \nu$), если речь идет о кристалле.

3. Возбуждения среды можно разделить на быстрые с частотами $\omega > \omega_0$ и медленные с $\omega < \omega_0$. Первые подстраиваются к движению частицы в яме, обусловливая "экранировку" и тем самым перенормировку потенциала $U^{(i)}$ и в слабой степени – массу частицы. Вторые, наоборот, не следят за частицей, и соответствующая им перестроенная волновая функция среды оказывается ориентированной на центр потенциальной ямы. Именно они оказывают решающее влияние на туннелирование. В случае взаимодействия с электронной жидкостью указанное разделение возбуждений было прослежено в явном виде [4]. Ниже мы рассмотрим взаимодействие с фононами, используя обозначение $\omega_c = (\omega_0, \omega_D)_{min}$.

Гамильтониан одноямной задачи может быть записан в виде

$$H^{(i)} = H_p^{(i)} + H_{ph} + V^{(i)}(r, x), \tag{3}$$

где H_p – гамильтониан частицы в перенормированном потенциальном рельефе, а $V(r, x)$ – взаимодействие частицы с медленными возбуждениями.

Собственные состояния гамильтониана (3), входящие в определение (2), могут быть найдены в рамках обычного адиабатического приближения.

$$\psi_\nu^{(i)}(r, x) = \varphi_0^{(i)}(r, x)\Phi_\nu^{(i)}(x), \tag{4}$$

где волновые функции φ_0 и Φ_ν являются решением уравнений

$$[H_p^{(i)} + V^{(i)}(r, x)]\varphi_0^{(i)}(r, x) = \epsilon_0^{(i)}(x)\varphi_0^{(i)}(r, x), \quad [H_{ph} + \epsilon_0^{(i)}(x)]\Phi_\nu^{(i)}(x) = E_\nu^{(i)}\Phi_\nu^{(i)}(x).$$

Разложим $\epsilon_0(x)$ в ряд по смещениям атомов среды, выраженным через нормальные координаты фононов x_β

$$\epsilon_0^{(i)}(x) - \epsilon_0^{(i)}(0) = \sum_\beta \gamma_\beta^{(i)} x_\beta + \tfrac{1}{2} \sum_{\beta\beta'} \gamma_{\beta\beta'}^{(i)} x_\beta x_{\beta'} \ .$$

В этой статье мы будем удерживать в разложении только первый член, хотя решение задачи удается найти и при сохранении квадратичного члена. Тогда для $\Phi_\nu^{(i)}$ имеем известное решение, отвечающее сдвигу нормальных осцилляторов

$$\Phi_\nu^{(i)}(x) = \prod_\beta \Phi_\beta^{(0)}(x_\beta - x_\beta^{(i)}), \qquad x_\beta^{(i)} = \gamma_\beta^{(i)} / \omega_\beta^2 , \tag{5}$$

где $\Phi_\beta^{(0)}$ – невозмущенная частицей волновая функция. Матричный элемент перехода (2) с учетом (4), (5) принимает вид

$$M_{\nu\nu'} = \langle \Phi_\nu^{(2)}(x) | J(x) | \Phi_{\nu'}^{(1)}(x) \rangle, \qquad J(x) = \langle \varphi_0^{(2)}(r, x) | H_1(r) | \varphi_0^{(1)}(r, x) \rangle \equiv \Delta_0 e^{-\Delta B(x)} ,$$

где $\Delta B(x) = B(x) - B(0)$. Ограничиваясь линейным разложением $\Delta B(x) = \Delta B(\bar{x}) + \sum_\beta B_\beta (x_\beta - \bar{x}_\beta)$ и воспользовавшись результатами работы [5], имеем

$$M_{\nu\nu'} = J(T) \langle \Phi_\nu^{(2)}(x) | \Phi_{\nu'}^{(1)}(x) \rangle , \qquad J(T) = \Delta_0 \exp(-\Delta B(\bar{x}) + G(T)). \tag{6}$$

Выражение для $J(T)$ отражает зависимость амплитуды перехода от экстремальной перестройки барьера. При этом важным оказывается как релаксация окружающих атомов $(\bar{x}_\beta = (x_\beta^{(1)} + x_\beta^{(2)})/2)$, так и эффект "флуктуационного приготовления барьера" [5] $G(T) = \sum_\beta B_\beta^2 \left(4\omega_\beta \operatorname{th}\left(\frac{\omega_\beta}{2T}\right)\right)^{-1}$, роль которого растет с повышением T.

4. Пусть $|\xi| \gg \tilde{\Delta}_0$. Тогда с учетом (6) и (5) задача о вероятности туннельного перехода W_{12} решается точно

$$W_{12} = J^2(T) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(i\xi_{12} t - \chi(t)). \tag{7}$$

Функция $\chi(t)$ имеет характерный для теории полярона малого радиуса вид

$$\chi(t) = 2\int_0^{\omega_c} \frac{d\omega}{\omega} \left[(1 - \cos\omega t) \operatorname{cth} \omega/2T - i \sin\omega t\right] f(\omega), \tag{8}$$

$$f(\omega) = \sum_{\beta} \frac{|c_{\beta}^{(1)} - c_{\beta}^{(2)}|^2}{2\omega_{\beta}} \delta(\omega - \omega_{\beta}) . \tag{9}$$

При малых волновых векторах $\mathbf{q}$ ($\beta \equiv \mathbf{q}, \xi$, где ξ – номер ветви)

$$c_{\beta}^{(i)} = (\gamma_{\beta}^{(i)}(2\omega_{\beta})^{-1/2}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} = c_{\xi}^{(i)} \left(\frac{\omega_{\xi}(\mathbf{q})\omega_D}{N}\right)^{1/2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} . \tag{10}$$

При $\omega \to 0$ имеем $f(\omega) \sim \omega^{d-1+(2)}$. Двойка в скобках отвечает тождественности обеих ям, когда $c_{\xi}^{(1)} = c_{\xi}^{(2)}$. Интеграл в (8) имеет особое поведение при $\omega \to 0$ при $f(0) = b =$ = const. Задача о "туннелировании с трением"[1-3, 6-8] предполагает справедливым именно это соотношение. Из приведенных результатов следует, что *помимо одномерности* $d = 1$ *это требует нетождественности ям.* В этом случае прямое интегрирование выражения (7) при $T \ll \omega_c$ дает

$$W_{12} = 2\sqrt{\pi} \frac{\tilde{\Delta}_0^2(T)\Omega_T}{\xi_{12}^2 + \Omega_T^2} \frac{|\Gamma(1 + b + i\xi_{12}/2\pi T)|^2}{\Gamma(1+b)\Gamma(1/2 + b)} e^{\xi_{12}/2T} , \tag{11}$$

$$\tilde{\Delta}_0(T) = \Delta_0 \exp(-\Delta B(\bar{x}) + G(T)) \exp(-b \ln{}^{\omega_c}/_{T}) , \quad \Omega_T = 2\pi b T. \tag{12}$$

В отличие от результата работ [7, 8], выражения (11), (12) содержат экспоненциальные множители, соответствующие флуктуационному приготовлению барьера. Полученное в этих работах выражение для $\tilde{\Delta}_0(T)$, соответствующее последнему множителю в (12), равно просто поляронному интегралу перекрытия фононных функций в (6).

Выражение (11) остается справедливым при выполнении хотя бы одного из условий $|\xi| >$ $> \tilde{\Delta}_0$ и $\Omega_T > \tilde{\Delta}_0$. При $\xi = 0$ и $T, \Omega_T < \tilde{\Delta}_0(T)$ (предполагается, что $b < 1$) туннелирование частицы приобретает когерентный бездиссипативный характер, которому отвечает диагональный матричный элемент (6). Его значение совпадает с (12), если в аргументе ln заменить T на $\tilde{\Delta}_0$, что связано с тем, что фононы с $\omega < \tilde{\Delta}_0$ за время пребывания частицы в яме не успевают принять участие в поляронном эффекте. Тогда когерентная амплитуда принимает независящее от T значение

$$\tilde{\Delta}_0^* = J(0)(J(0) / \omega_c)^{b/1-b} . \tag{13}$$

В пренебрежении неупругими процессами система имеет два собственных состояния, разделенных интервалом $2\tilde{\Delta}_0^*$, и вероятность нахождения частицы во второй яме, если в $t = 0$ она была в первой яме, носит осциллирующий характер. На самом деле даже при $T = 0$ эти осцилляции затухают с временем перехода с верхнего уровня на нижний

$$\tau^{-1} = 2\pi b \tilde{\Delta}_0^* / (1 - \exp(-2\tilde{\Delta}_0^* / T)). \tag{14}$$

В рамках используемого метода переход от двухъямной задачи к кристаллу проводится непосредственно. При низких температурах задача становится эквивалентной задаче о зонном движении в приближении сильной связи с шириной зоны $\tilde{\Delta} \cong 4J(0)(4J(0)/\omega_c)^{b/1-b}$. При этом рассеяние частиц происходит на фононах с частотами $\omega_{\beta} < \tilde{\Delta}$, которые не принимают участия в поляронном эффекте. Законы сохранения энергии и импульса могут выполняться при $\tilde{\Delta} \ll$ $\ll \omega_D$ только в меру периодически повторяющегося по кристаллу условия $c^{(n)} \neq c^{(n+1)}$. При этом время свободного пробега τ_p определяется соотношением

$$1/\tau_p = \pi b(\epsilon_p - \epsilon_{p+\pi/a}) / (1 - \exp((\epsilon_{p+\pi/a} - \epsilon_p) / T)) . \tag{15}$$

При $T \sim \tilde{\Delta}$ коэффициент диффузии

$$D \approx 1/8\, \tilde{\Delta}^2 / \Omega_T . \tag{16}$$

При $T \ll \tilde{\Delta}$ однофононное рассеяние экспоненциально затухает и существенным становится рассеяние во втором порядке по однофононному взаимодействию, для которого законы сохранения легко выполняются. Решение кинетического уравнения, с учетом эффекта транспортности $((q/p)^2 \ll 1)$ приводит к

$$D = \frac{15a^2}{4\pi^7 b^2} \frac{\tilde{\Delta}^2 \omega_D^2}{T^3} . \tag{17}$$

При $\Omega_T > \tilde{\Delta}$ происходит динамическое разрушение зоны и вероятность перехода из ямы n в $n+1$ определяется двухъямным выражением (11), которое ведет к коэффициенту диффузии, аналогичному (16).

Литература

1. *Sethna J.P.* Phys. Rev. B., 1981, **24**, 698; 1982, **25**, 5050.
2. *Caldeira A.O., Leggett A.J.* Phys. Rev. Lett., 1982, **46**, 211.
3. *Caldeira A.O., Leggett A.J.* Annals of Physics, 1983, **149**, 374.
4. *Каган Ю., Прокофьев Н.В.* ЖЭТФ, 1986, **90**, 2176.
5. *Каган Ю., Клингер М.И.* ЖЭТФ, 1976, **70**, 225.
6. *Chacravarty S., Leggett A.J.* Phys. Rev. Lett., 1984, **52**, 5.
7. *Grabert H., Weiss U.* Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1605.
8. *Fisher M.P.A., Dorsey A.T.* Phys. Rev. Lett., 1985, **54**, 1609.

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
28 марта 1986 г.