



ДВУМЕРНЫЕ ТУННЕЛЬНЫЕ БИФУРКАЦИИ

М.Б. Семенов

Изучены два возможных типа двумерных туннельных бифуркаций в рамках науки о квантовом туннелировании с диссипацией. Выявлены квантовые биения в окрестности точки бифуркации в случае параллельного туннельного переноса взаимодействующих частиц, а также хаотизация режима переноса вблизи критической эффективной температуры при антипараллельном переносе.

Введение

В системах различной природы - в ряде макрокластерных структур [1,2], в биомолекулах типа порфиринов [3,4], в некоторых двумерных низкотемпературных адиабатических химических реакциях (например, для 7-азаиндола [5,6]), в различных предметоскопических и мезоскопических системах [7] - весьма важным может оказаться изучение двумерной туннельной диссипативной динамики взаимодействующих зарядов, движущихся по параллельным или антипараллельным «координатам реакции». Впервые в рамках науки о квантовом туннелировании с диссипацией [7-22] особенности двумерной туннельной динамики были изучены на примере взаимодействующих контактов Джозефсона [7]. Был обнаружен эффект «бифуркации» двумерных туннельных траекторий и прослежена возможность визуализации этого эффекта в виде излома на соответствующей токовой зависимости. В некотором смысле «аналогичная» бифуркация наблюдалась в системах типа порфиринов, хотя и оказалась неустойчивой [4]. Макроскопическая визуализация этого эффекта проявлялась в изломе на температурной зависимости (при достаточно низких температурах) скорости соответствующей химической реакции. Учитывая также возможности современных нанотехнологий в создании искусственных двумерных структур с заданными свойствами, интерес к изучению двумерных туннельных бифуркаций, позволяющих визуализировать смену механизма туннельного переноса взаимодействующих зарядов, значительно возрос [2,23-25].

1. Постановка задачи

В случае параллельного туннелирования выберем потенциалы $U(q_1)$ и $U(q_2)$ как функции линеаризованных координат зарядов в виде

$$U(q_1) = 1/2 \omega^2 (q_1+a)^2 \theta(-q_1) + [-\Delta I + 1/2 \omega^2 (q_1-b)^2] \theta(q_1), \quad (1)$$

$$U(q_2) = 1/2 \omega^2 (q_2+a)^2 \theta(-q_2) + [-\Delta I + 1/2 \omega^2 (q_2-b)^2] \theta(q_2),$$

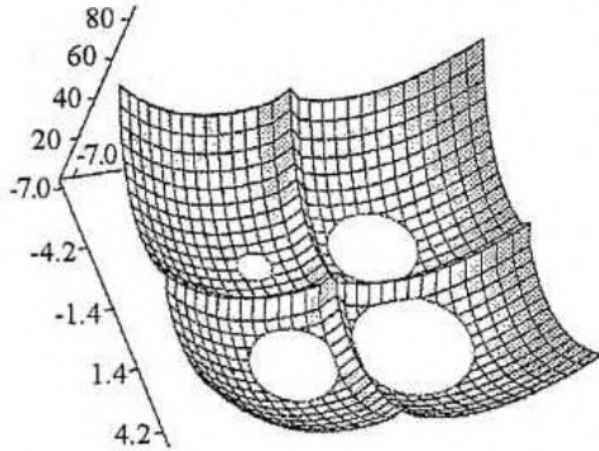


Рис. 1. Пространственная визуализация потенциала $U(q_1, q_2)$; $a=2, b=2.5, \alpha^*=0.0001$

где сумма $a+b$ определяет «длину связи» в соответствующем фрагменте макрокластера; $\Delta I = 1/2 \omega^2 (b^2 - a^2)$ - параметр асимметрии потенциала, ω - частота потенциала, введение которой обсуждалось в [26].

Взаимодействие между электронами (зарядами) берется в диполь-дипольном приближении [27] в виде

$$V_{\text{INT}}(q_1, q_2) = -1/2 \alpha (q_1 - q_2)^2, \quad (2)$$

где α - положительная константа. Общая форма двумерного потенциала с взаимодействием

$$U(q_1, q_2) = 2\tilde{U}(q_1, q_2)/\omega^2 = (q_1+a)^2 \theta(-q_1) + [-(b^2 - a^2) + (q_1-b)^2] \theta(q_1) + (q_2+a)^2 \theta(-q_2) + [-(b^2 - a^2) + (q_2-b)^2] \theta(q_2) - 1/2 \alpha^* (q_1 - q_2)^2, \quad (3)$$

где $\alpha^* = 2\alpha/\omega^2 < 1$ - безразмерный параметр; $\alpha \approx e^2/(\epsilon_0 R_0^3)$, e - заряд электрона, R_0 - «расстояние» между «координатами реакции» q_1 и q_2 туннелирующих электронов, ϵ_0 - диэлектрическая постоянная. Пространственная визуализация потенциала (3) представлена на рис. 1.

В случае антипараллельного туннелирования общая форма двумерного туннельного потенциала с взаимодействием принимает вид

$$U'(q_1, q_2) = 2\tilde{U}'(q_1, q_2)/\omega^2 = (q_1+a)^2 \theta(-q_1) + [-(b^2 - a^2) + (q_1-b)^2] \theta(q_1) + (q_2-a)^2 \theta(q_2) + [-(b^2 - a^2) + (q_2+b)^2] \theta(-q_2) - 1/2 \tilde{\alpha}^* (q_1 - q_2)^2, \quad (4)$$

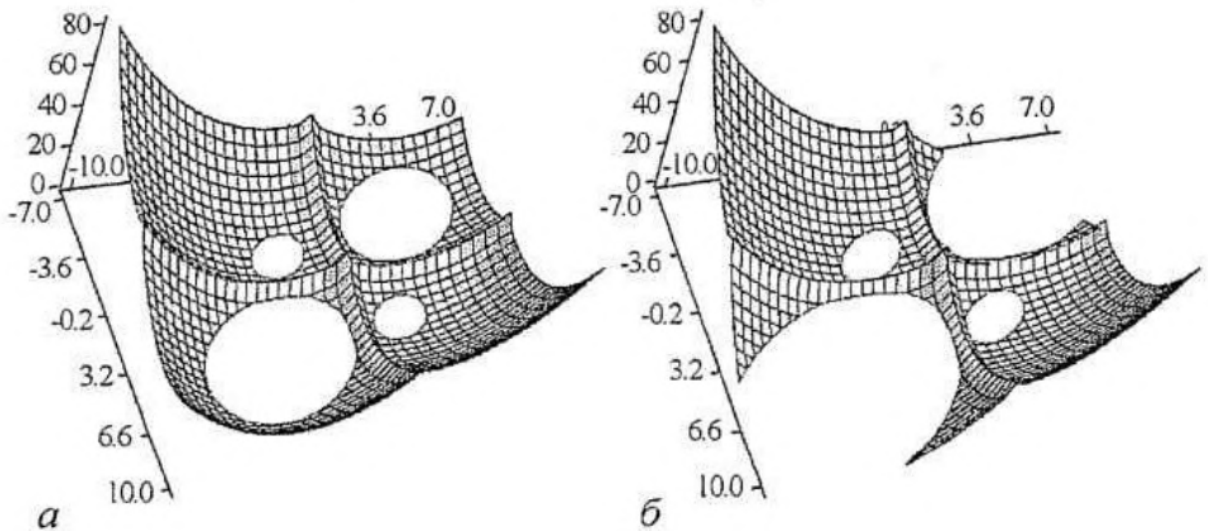


Рис. 2. Пространственная визуализация потенциала (4) при $a=2, b=2.3$; $\alpha^*=0.1$ (а); $\alpha^*=0.5$ (б)

где $\tilde{\alpha}^* = 2\tilde{\alpha}/\omega^2 < 1$ - безразмерный параметр. Пространственная визуализация потенциала (4) представлена на рис. 2.

Потенциал (3) будем условно называть «параллельным», а (4) - «антипараллельным». Кроме того, может быть определен «симметричный» потенциал, который можно рассматривать как частный случай потенциала (4) при условии $a=b$,

$$U'''(q_1, q_2) = 2\tilde{U}'''(q_1, q_2)/\omega^2 = (q_1+a)^2\theta(-q_1) + (q_1-a)^2\theta(q_1) + (q_2-a)^2\theta(q_2) + (q_2+a)^2\theta(-q_2) - 1/2 \tilde{\alpha}^{**}(q_1-q_2)^2, \quad \tilde{\alpha}^{**} < 1. \quad (5)$$

2. Вероятность двухчастичного туннельного перехода

Поскольку изучаемые двумерные фрагменты предполагаются включенными в структуру макрокластера и среду-термостат, вводим взаимодействие с осцилляторами среды (в линейном приближении). Динамика среды описывается осцилляторным гамильтонианом

$$H_{ph} = 1/2 \sum_i (P_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2). \quad (6)$$

Предполагается, что каждая из частиц (электронов или «эффективных» зарядов) взаимодействует линейно с осцилляторами среды

$$V_{p-ph}^{(1)}(q_1, Q_i) = q_1 \sum_i C_i Q_i, \quad V_{p-ph}^{(2)}(q_2, Q_i) = q_2 \sum_i C_i Q_i. \quad (7)$$

Как и в работе [27], будем интересоваться вероятностью перехода в единицу времени или, строго говоря, только ее экспоненциальной частью, которая может быть определена как

$$\Gamma = 2\text{Im}Z/\text{Re}Z, \quad (8)$$

причем для метастабильных уровней при нулевой температуре

$$\Gamma = -2\text{Im}E, \quad E = E_0 - i\Gamma/2. \quad (9)$$

Соотношение (8) получается, как известно [7-22], путем обобщения (9) на конечные температуры

$$\begin{aligned} \Gamma &= 2\sum_i \exp(-E_{0i}/T) \text{Im}E_i / \sum_i \exp(-E_{0i}/T) = \\ &= 2\text{Im}\sum_i \exp(-E_i/T) / \text{Re}\sum_i \exp(-E_i/T) = 2\text{Im}Z/\text{Re}Z. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь i - номер уровня энергии метастабильного состояния, Z - статистическая сумма системы, T - температура. При вычислении Γ удобно представить Z в виде интеграла по траекториям [7-22]

$$Z = \Pi_i \int Dq_1 Dq_2 DQ_i \exp[-S\{q_1, q_2, Q_i\}], \quad D - \text{дифференциальный оператор}. \quad (11)$$

Появление мнимой части в статистической сумме происходит из-за распадности уровней исходного состояния (более подробно эта проблема обсуждается в [28]). S - действие всей системы. После точного интегрирования по фоновым координатам [27] получим

$$S\{q_1, q_2\} = \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt \{ \dot{q}_1^2/2 + \dot{q}_2^2/2 + V(q_1, q_2) + \quad (12)$$

$$+ 1/2 \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt' D(\tau - \tau') [q_1(\tau) + q_2(\tau)] [q_1(\tau') + q_2(\tau')],$$

где $D(\tau) = 1/\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} D(\nu_n) \exp(i\nu_n \tau) - \quad (13)$

функция Грина фононов,

$$D(\nu_n) = -\sum_i [C_i^2 / (\omega_i^2 + \nu_n^2)]; \quad (14)$$

$\beta = \hbar / (k_B T)$ - обратная температура, (\hbar и k_B полагаются равными единице); $\nu_n = 2\pi n / \beta$ - мацубаровская частота.

Двумерная квазиклассическая траектория (инстантон), минимизирующая функционал действия S , определяется из системы уравнений движения. Для определенности рассматриваем «антипараллельный» потенциал

$$-\ddot{q}_1 + \Omega_0^2 q_1 + \tilde{\alpha}_1 q_2 + \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt' K(\tau - \tau') [q_1(\tau') + q_2(\tau')] + \quad (15)$$

$$+ \omega^2 a \theta(-q_1) - \omega^2 b \theta(q_1) = 0,$$

$$-\ddot{q}_2 + \Omega_0^2 q_2 + \tilde{\alpha}_1 q_1 + \int_{-\beta/2}^{\beta/2} dt' K(\tau - \tau') [q_1(\tau') + q_2(\tau')] - \quad (16)$$

$$- \omega^2 a \theta(q_2) + \omega^2 b \theta(-q_2) = 0.$$

В уравнениях (15) и (16) ядро K определяется соотношением

$$K(\tau) = 1/\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \exp(i\nu_n \tau), \quad (17)$$

где ξ_n выражается путем переопределения (14)

$$D(\nu_n) = -\sum_i C_i^2 / \omega_i^2 + \xi_n, \quad (18)$$

тем самым выделяется член с нулевой частотой. Будем искать решение системы уравнений (15) и (16) в виде ряда Фурье по частотам ν_n

$$q_1 = 1/\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} q_n^{(1)} \exp(i\nu_n \tau), \quad (19)$$

$$q_2 = 1/\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} q_n^{(2)} \exp(i\nu_n \tau).$$

Введем перенормированные частоту и константу взаимодействия

$$\Omega_0^2 = \omega^2 - \sum_i C_i^2 / \omega_i^2 - \tilde{\alpha}, \quad \tilde{\alpha}_1 = \tilde{\alpha} - \sum_i C_i^2 / \omega_i^2. \quad (20)$$

Подставляя соотношения (19) в систему уравнений (15) и (16), получим для $n=0$

$$q_0^{(1)} + q_0^{(2)} = 2\omega^2(a+b)\varepsilon / (\Omega_0^2 + \tilde{\alpha}_1), \quad (21)$$

$$q_0^{(1)} - q_0^{(2)} = -2\omega^2 a \beta / (\Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1) + 4\omega^2(a+b)\tau_0 / (\Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1),$$

и для $n \neq 0$

$$q_n^{(1)} + q_n^{(2)} = 2\omega^2(a+b)[\sin(v_n \tau_1) - \sin(v_n \tau_2)]/[v_n(v_n^2 + \Omega_0^2 + \tilde{\alpha}_1 + 2\xi_n)], \quad (22)$$

$$q_n^{(1)} - q_n^{(2)} = 2\omega^2(a+b)[\sin(v_n \tau_1) + \sin(v_n \tau_2)]/[v_n(v_n^2 + \Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1)],$$

где

$$\varepsilon \equiv \tau_1 - \tau_2, \quad \tau_0 \equiv (\tau_1 + \tau_2)/2. \quad (23)$$

Времена τ_1, τ_2 задают моменты прохождения частицами, движущимися из исходного положения, вершины соответствующего потенциального барьера и определяются из уравнений

$$q_1(\tau_1) = 0, \quad q_2(\tau_2) = 0. \quad (24)$$

Уравнения (24) позволяют нам изменить аргументы θ -функций - единичных функций Хевисайда. Таким образом, вместо зависимости от координат q_1, q_2 можем получить для θ -функций зависимость от времени, что позволит привести систему уравнений движения (15) и (16) к линейному виду. Времена $\pm\tau_1$ и $\pm\tau_2$ соответствуют моментам, когда частицы движутся квазиклассически «через» вершины барьера. Подставляя траекторию, определенную из соотношений (19), (21) и (22), в выражение (12), получим квазиклассическое (инстантонное) действие

$$\begin{aligned} S = & 4\omega^4 a(a+b)\tau_0/(\Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1) - \omega^4(a+b)^2\varepsilon^2/[\beta(\Omega_0^2 + \tilde{\alpha}_1)] - 4\omega^4(a+b)^2\tau_0^2/[\beta(\Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1)] - \\ & - 8\omega^4(a+b)^2/\beta \sum_{n=1}^{\infty} \{ \sin^2(v_n \tau_0) \cos^2(v_n \varepsilon/2) / [(v_n^2 + \Omega_0^2 - \tilde{\alpha}_1)v_n^2] + \\ & + \sin^2(v_n \varepsilon/2) \cos^2(v_n \tau_0) / [(v_n^2 + \Omega_0^2 + \tilde{\alpha}_1 + 2\xi_n)v_n^2] \}, \end{aligned} \quad (25)$$

которое с экспоненциальной точностью определяет вероятность двухчастичного перехода в потенциале с взаимодействием в единицу времени.

3. Параллельное движение туннелирующих частиц

В этом случае функционал действия S с учетом взаимодействия со средой находится по аналогии с (12). Двумерная квазиклассическая траектория (инстантон), минимизирующая функционал действия S , определяется из уравнений движения, аналогичных (15) и (16). Мы ищем решение этих уравнений в виде ряда Фурье по частотам v_n (19). Отметим, что решения системы уравнений движения ищутся при условии, что взаимодействующие частицы начинают двигаться одновременно. Времена τ_1 и τ_2 , соответствующие временам прохождения частиц под вершинами барьеров (вдоль координат реакции), определяются из уравнений (24).

В случае «параллельного» движения туннелирующих частиц (потенциальная энергия $U(q_1, q_2)$ (3)) выражение для действия через параметры τ_1, τ_2 имеет вид

$$\begin{aligned} S = & 2a(b+a)(\tau_1 + \tau_2)\omega^2 - \omega^2(a+b)^2(\tau_1 + \tau_2)^2/\beta - \omega^4(a+b)^2(\tau_1 - \tau_2)^2/[(\omega^2 - 2\alpha)\beta] - \\ & - 2\omega^4(a+b)^2/\beta \sum_{n=1}^{\infty} \{ [\sin(v_n \tau_1) + \sin(v_n \tau_2)]^2 / [v_n^2(v_n^2 + \omega^2 + \xi_n)] + \\ & + [\sin(v_n \tau_1) - \sin(v_n \tau_2)]^2 / [v_n^2(v_n^2 + \omega^2 - 2\alpha)] \}, \end{aligned} \quad (26)$$

где ξ_n определяется из соотношения (18).

Введем обозначения: $\varepsilon = \varepsilon^* \omega = (\tau_1 - \tau_2) \omega$; $\tau = 2\tau^* \omega = (\tau_1 + \tau_2) \omega$; $\beta^* = \beta \omega / 2$; $\alpha^* = 2\alpha / \omega^2$; $b^* = b/a$, $b \geq a$.

Система уравнений (24) в рассматриваемом случае принимает вид

$$\begin{cases} \text{sh}\varepsilon[\text{chtcth}\beta^* - \text{sh}\tau - \text{cth}\beta^*] + 1/(1-\alpha^*)\text{sh}(\varepsilon(1-\alpha^*)^{1/2}) \times \\ \times [\text{ch}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2})\text{cth}(\beta^*(1-\alpha^*)^{1/2}) - \text{sh}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2}) + \text{cth}(\beta^*(1-\alpha^*)^{1/2})] = 0, \\ 3 - 4/(1+b^*) - 1/(1-\alpha^*) + \text{ch}\varepsilon[\text{sh}\tau\text{cth}\beta^* - \text{ch}\tau - 1] + \text{sh}\tau\text{cth}\beta^* - \text{ch}\tau + \\ + 1/(1-\alpha^*)\text{ch}(\varepsilon(1-\alpha^*)^{1/2})[\text{sh}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2})\text{cth}(\beta^*(1-\alpha^*)^{1/2}) - \text{ch}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2}) + 1] - \\ - 1/(1-\alpha^*)[\text{sh}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2})\text{cth}(\beta^*(1-\alpha^*)^{1/2}) - \text{ch}(\tau(1-\alpha^*)^{1/2})] = 0. \end{cases} \quad (27)$$

Решения уравнений (27) имеют следующий вид:

$$\varepsilon = (\tau_1 - \tau_2) \omega = 0, \quad \forall \beta, \quad \alpha < \omega^2/2, \quad (28)$$

$$\tau_1 = \tau_2 = \tau/(2\omega) = 1/(2\omega) \text{Arcsh}[(1-b^*)/(1+b^*)\text{sh}(\beta\omega/2)] + \beta/4.$$

При достаточно «низких» температурах, $\omega\beta \gg 1$, с экспоненциальной точностью для $1 < b/a < 3$, $(b-a)/(2(b+a)) \leq 2\alpha/\omega^2 < 2(b-a)/(3b-a) = \alpha_c^*$

$$\begin{aligned} \exp(-\tau(1-\alpha^*)^{1/2}) &\approx [3-4/(1+b^*)-1/(1-\alpha^*)](1-\alpha^*)^{1/(1-(1-\alpha^*)^{1/2})} \times \\ &\times \{1+(1-\alpha^*)^{1/(1-(1-\alpha^*)^{1/2})}[-1/(1-\alpha^*)+(3-4/(1+b^*)-1/(1-\alpha^*))/(1-(1-\alpha^*)^{1/2})]\}^{-1}, \quad (29) \\ \exp(-\varepsilon) &\approx \{[3-4/(1+b^*)-1/(1-\alpha^*)]+1/(1-\alpha^*)\exp(-\tau(1-\alpha^*)^{1/2})\}/\exp(-\tau(1-\alpha^*)^{1/2}), \end{aligned}$$

где $\alpha^* = 2\alpha/\omega^2$, $b^* = b/a$.

Решение (29) справедливо, когда

$$\beta > -1/\omega \ln\{\exp(-\tau(1-\alpha^*)^{1/2})\} = \beta_c. \quad (30)$$

Двумерные туннельные траектории, инстантоны (19), соответствуют решениям (29) и (30). При некоторой «критической» температуре $\beta_{c(\text{eff})}$ происходит «расщепление» основной туннельной траектории ($\varepsilon=0$) на две близких подбарьерных траектории ($\varepsilon \neq 0$) (рис. 3).

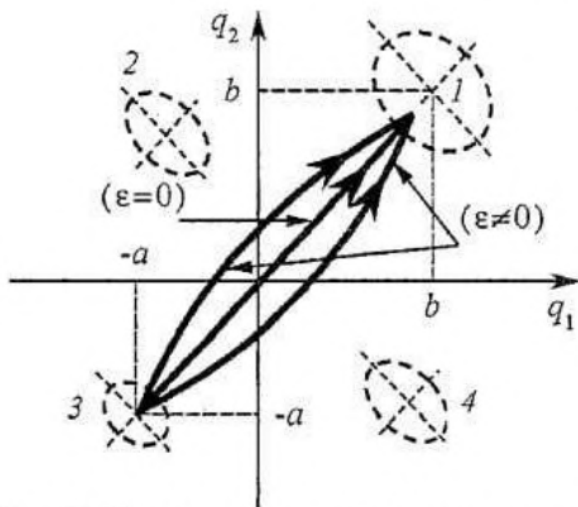


Рис. 3. Двумерные туннельные траектории - основная ($\varepsilon=0$) и «отщепленные» ($\varepsilon \neq 0$) - при $\omega\beta \gg 1$ для двух взаимодействующих частиц, движущихся параллельно; цифрами 1-4 обозначены проекции минимумов потенциальной энергии $U(q_1, q_2)$ (3)

При $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$) реализуется последний случай ($\varepsilon \neq 0$), так как из сравнения величин действий видно, что $S_{\varepsilon=0} > S_{\varepsilon \neq 0}$.

Для $\beta < \beta_c$ ($T > T_c$) и $\alpha > \alpha_c$ (см. (29)) реализуется только основная траектория. В случае симметричного потенциала ($b=a$) двумерное туннелирование происходит только по основной траектории во всем диапазоне температур.

Более подробный численный анализ системы трансцендентных уравнений (27) позволяет получить еще ряд интересных результатов для случая параллельного двумерного двухчас-

точного туннелирования с учетом взаимодействия между частицами. Из приведенных на рис. 4-6 результатов численного анализа видно, что с уменьшением температуры уменьшается и величина α_c , определяющая смену режимов туннелирования - синхронного асинхронным. Кроме того, существует низкотемпературный предел для α_c (см. рис. 5). Рис. 4, а - в демонстрирует, во-первых, способ получения при численном расчете точек β_c смены режимов туннелирования (синхронного на асинхронный) с уменьшением температуры. Фактически, одновременно происходит получение точек графиков рис. 5 и 6. Во-вторых, и это представляет значительный интерес, рисунок 4, б, в демонстрирует возникновение дополнительной точки перехода в асинхронный режим туннелирования, что позволяет уточнить картину смены режимов туннелирования в целом и выявить тонкую структуру перехода в окрестности точки бифуркации. Можно показать, что из двух точек перехода из синхронного в асинхронный режим туннелирования или наоборот (см. рис. 4, в) по величине действия выгодной оказывается лишь одна из них, именно она и реализуется. Но в момент возникновения (бифуркации) этих двух точек перехода, когда они достаточно близки, величины действия в них сравнимы, хотя и не равны. Тем самым, вероятным становится режим флуктуаций, связанный с перескоками из одной точки в другую и наоборот. По мере дальнейшего понижения температуры (роста β) флуктуации этой природы практически исчезают, и устойчивость режима асинхронного туннелирования восстанавливается. Есть также основания надеяться, что этот теоретический

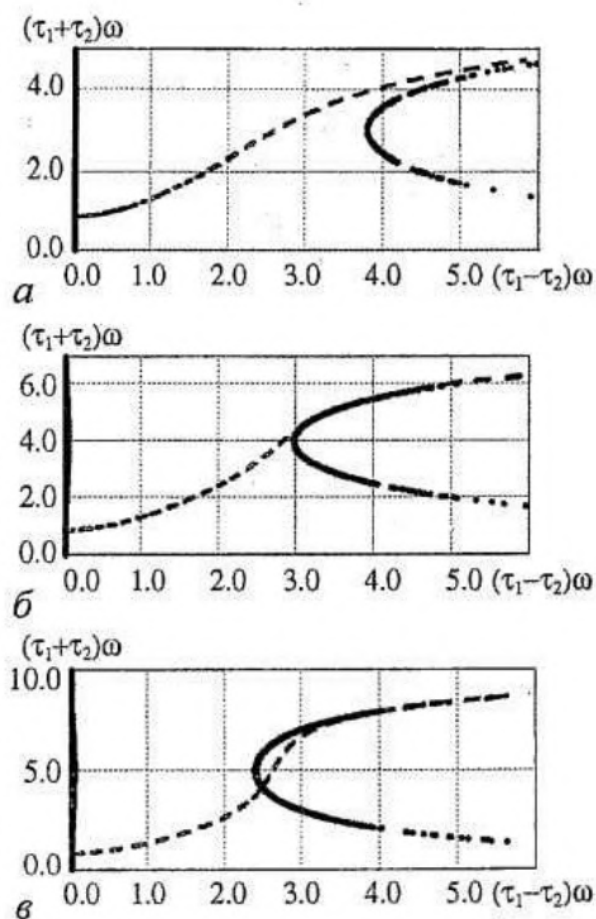


Рис. 4. Результаты численного решения системы трансцендентных уравнений (27). Помимо всегда существующего решения $\tau_1 = \tau_2$, на рис. б, в с ростом или с уменьшением температуры появляются дополнительные решения $\tau_1 \neq \tau_2$. Рис. б показывает момент бифуркации - появления дополнительного решения, более предпочтительного по величине квазиклассического действия. На рис. в таких дополнительных решений уже два, но по величине действия предпочтительным оказывается только одно из них

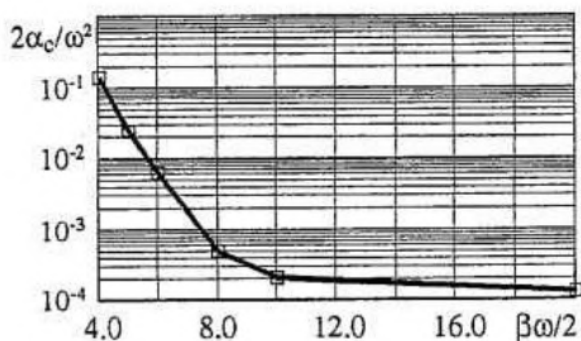


Рис. 5. Зависимость α_c от температуры ($1/T$) при фиксированных частоте и параметре асимметрии потенциала b/a

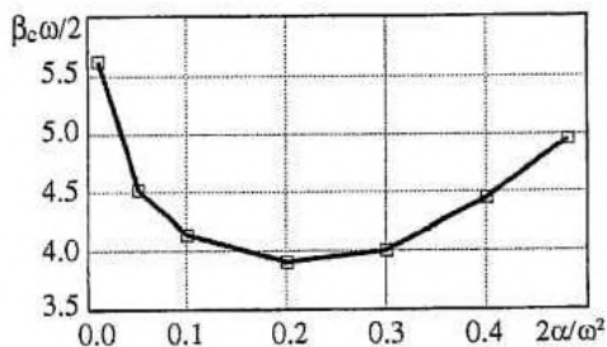


Рис. 6. Зависимость β_c от коэффициента взаимодействия между туннелирующими частицами

вывод вполне может быть проверен экспериментально при изучении искусственных двумерных структур, для которых реализуем данный тип двумерного потенциала. Для известных и упомянутых выше двумерных химических реакций, где наблюдается смена режимов туннелирования, показано, что этот эффект (излом на зависимости скорости реакции от температуры) является неустойчивым, а следовательно, более тонкие нюансы экспериментально не наблюдаемы, хотя теоретическое рассмотрение этой ситуации может быть (в некотором смысле) аналогичным представленному. Более точно эта экспериментальная ситуация соответствует случаю антипараллельного туннельного переноса взаимодействующих частиц.

4. Антипараллельное движение туннелирующих частиц

В случае антипараллельного туннельного переноса (4) действие как функция параметров ϵ и τ определяется формулой (25). Параметры ϵ и τ ($\xi_n=0$) подчиняются следующей системе уравнений (см. (24))

$$\begin{cases} -sh\epsilon[cth\beta^* + ch\tau cth\beta^* - sh\tau] + 1/(1-\tilde{\alpha}^*)sh(\epsilon(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) \times \\ \times \{cth(\beta^*(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) - ch(\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})cth(\beta^*(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) + sh(\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})\} = 0, \\ -1 - 4/[(1+b^*)(1-\tilde{\alpha}^*)] + 1/(1-\tilde{\alpha}^*) + (ch\epsilon - 1)(sh\tau cth\beta^* - ch\tau) + ch\epsilon + 1/(1-\tilde{\alpha}^*) \times \\ \times \{[ch(\epsilon(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) + 1][sh(\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})cth(\beta^*(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) - ch(\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})] - ch(\epsilon(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})\} = 0. \end{cases} \quad (31)$$

Решения системы (31) находим в следующем виде

$$\epsilon = (\tau_1 - \tau_2)\omega = 0, \quad \forall \beta, \quad \tilde{\alpha} < \omega^2/2, \quad (32)$$

$$\tau_1 = \tau_2 = \tau/(2\omega) = 1/(2\omega(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) \text{Arcsh}[(1-b^*)/(1+b^*)sh(1/2 \beta\omega(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})] + \beta/4.$$

Подобно случаю параллельного переноса, при эффективно низких температурах ($\omega\beta \gg 1$) и с экспоненциальной точностью

$$\exp(-\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) \approx A(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/\gamma} [1 - (1-\tilde{\alpha}^*)^{1/\gamma} [A/\gamma - 1/(1-\tilde{\alpha}^*)]]^{-1}, \quad (33)$$

$$\exp(\epsilon) \approx \{A - 1/(1-\tilde{\alpha}^*) \exp(-\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2})\} / \exp(-\tau(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}),$$

где $A = -1 - 4/[(1+b^*)(1-\tilde{\alpha}^*)] + 3/(1-\tilde{\alpha}^*)$; $\gamma = 1 - (1-\tilde{\alpha}^*)$ и $\tilde{\alpha}^*$, b^* , ϵ , τ определяются аналогично предыдущему случаю. Это решение справедливо для $\tilde{\alpha}_{c1}^* < \tilde{\alpha}^* < \tilde{\alpha}_{c2}^*$, где $\tilde{\alpha}_{c1}^*$ и $\tilde{\alpha}_{c2}^*$ находятся из громоздкого трансцендентного уравнения, которое здесь опущено. Но для $a=b$, $1/4 < 2\tilde{\alpha}/\omega^2 < 1$. Приближенное решение может быть написано также для больших значений параметра $b^* = b/a$ (и для меньших $\tilde{\alpha}^*$), но ограничимся физически более важным решением (33).

Решение (33) справедливо для

$$\beta > -1/(\omega(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/2}) \ln \{A(1-\tilde{\alpha}^*)^{1/\gamma} / [1 - (1-\tilde{\alpha}^*)^{1/\gamma} (A/\gamma - 1/(1-\tilde{\alpha}^*))]\} = \tilde{\beta}_{c(\text{eff})}; \quad (34)$$

A и γ определены выше.

При $\beta > \tilde{\beta}_c$ и соответствующих $\tilde{\alpha}^* S_{\epsilon \neq 0} > S_{\epsilon=0}$.

По аналогии со случаем параллельного переноса двумерные туннельные траектории находятся с помощью соотношений (32), (33). Эти траектории на плоскости (q_1, q_2) изображены на рис. 7. Аналогично происходит расщепление основной траектории на две вырожденные при $\beta > \tilde{\beta}_c$. В отличие от параллельного переноса такое «расщепление» может иметь место при любых параметрах потенциала. Для $\beta > \tilde{\beta}_c$ $S_{\epsilon \neq 0} > S_{\epsilon=0}$, и, следовательно, последняя величина определяет скорость туннелирования.

При $\beta < \tilde{\beta}_c$ вырожденные подбарьерные траектории преобразуются в основную ($q_1 = -q_2$), что соответствует синхронному антипараллельному переносу.

Таким образом, при одночастичном туннелировании существует одна траектория, инстантон, на которой действие принимает минимальное значение. При туннелировании двух частиц (в двумерном случае) возможно появление как одной основной, так и двух отщепленных траекторий, вносящих равноценный вклад в константу туннелирования. В этом случае, то есть при параллельном переносе на отщепленных траекториях, частицы уже не проходят вершины барьера одновременно по каждой из координат туннелирования ($\tau_1 \neq \tau_2$), что означает несинхронность (неодновременность) переноса частиц. Однако при определенном (малом) значении параметра взаимодействия α^* (29) и при $\beta < \tilde{\beta}_c$ (30), симметрия двумерной траектории может измениться: «отщепления» (бифуркации) траекторий от основной ($q_1 = q_2$) уже не происходит, по каждой из координат туннелирования частицы проходят вершины барьера в одно и то же время ($\tau_1 = \tau_2$), то есть перенос частиц происходит синхронным образом (одновременно).

Выбранный тип взаимодействия не влияет на движение по координате «центра масс» ($q_1 = q_2$). Поэтому для параллельного переноса по основной координате квазиклассическое действие не зависит от параметра взаимодействия. Поскольку энергетически выгодным оказывается состояние с максимальным значением относительной координаты ($q_1 = -q_2$), становится понятным, почему для параллельного переноса по отщепленным траекториям величина действия уменьшается с ростом величины параметра взаимодействия, а для антипараллельного переноса, наоборот, увеличивается.

Для антипараллельного переноса наиболее выгодным оказывается движение по единственной двумерной траектории, для которой $\tau_1 = \tau_2$ (синхронный перенос), а асинхронный перенос является невыгодным, поскольку он дает больший вклад в квазиклассическое действие.

Условие применимости нашей модели в адиабатическом приближении слабовзаимодействующего газа пар «инстантон - антиинстантон» рассмотрено в [26]. Учет взаимодействия со средой (конкретизация спектра осцилляторов среды) качественно не влияет на рассмотренные эффекты макрокорреляций.

Численный анализ системы трансцендентных уравнений (31), подобно случаю параллельного туннелирования, выявляет интересные особенности эффекта смены режимов туннелирования (тонкую структуру в окрестности

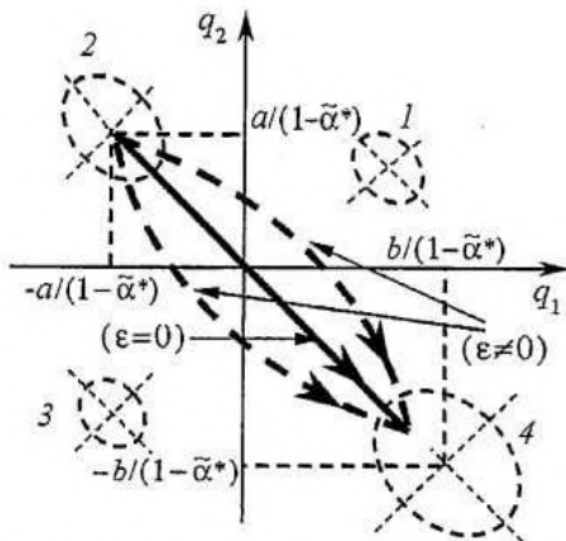


Рис. 7. Двумерные туннельные траектории - основная ($\epsilon=0$) и «отщепленные» ($\epsilon \neq 0$) при $\omega\beta \gg 1$ для двух взаимодействующих частиц, движущихся антипараллельно; цифрами 1-4 обозначены проекции минимумов потенциальной энергии $U'(q_1, q_2)$ (4)

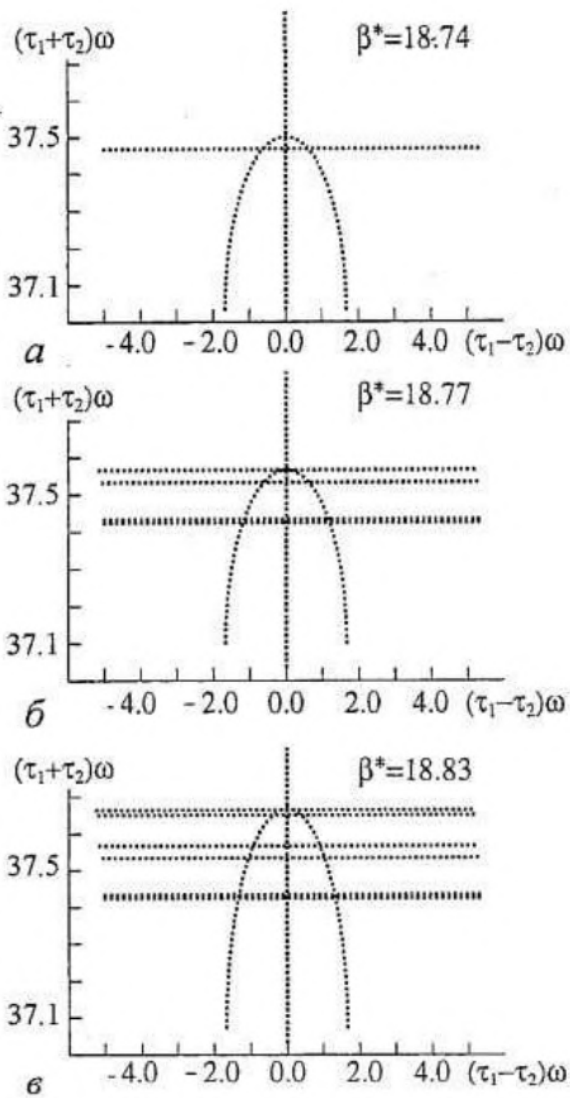


Рис. 8. Численный анализ системы трансцендентных уравнений (31). В дополнение к всегда существующему «синхронному» решению $\tau_1 = \tau_2$, с ростом β (уменьшением температуры) появляются отцепленные «асинхронные» решения $\tau_1 \neq \tau_2$: а - одна пара, б - четыре пары и в - шесть пар «асинхронных» решений

Что касается характера зависимостей $\alpha_c(\beta)$ и $\beta_c(\alpha)$, то они оказываются подобными аналогичным зависимостям для параллельного переноса, представленным на рис. 5 и 6. Таким образом, удастся рассмотреть тонкую структуру бифуркаций режимов туннелирования как для параллельного, так и для антипараллельного переноса и провести их сравнительный анализ.

При фиксированной константе взаимодействия α и в отсутствие взаимодействия с осцилляторами среды величина критической температуры T_c , характеризующей смену синхронного (одновременного) и асинхронного (неодновременного) режимов туннелирования, с учетом значений α_c (см. (29) и (33)), определяется формулами (30) и (34). Эти соотношения могут быть обобщены и на случай взаимодействия с выделенной колебательной модой. Для различных конкретных соединений величина этой критической температуры T_c может быть оценена в диапазоне значений $T_c = 10 \dots 400$ К. В стеклах величина T_c может быть малой; в химических реакциях она, как правило, возрастает. Ее величина может изменяться с изменением расстояния между туннелирующими

первоначальной бифуркации). Результаты представлены на рис. 8, из которого видно, что с понижением температуры помимо первой бифуркации - появления пары отцепленных решений (рис. 8, а) - происходит последующий каскад бифуркаций: появляется 4 и 6 пар отцепленных решений (рис. 8, б и в). Далее при $\beta^* = 19.2009$ ($\alpha^* = 0.05$) появляется уже 12 пар отцепленных решений, что напоминает один из возможных сценариев перехода к хаосу. И хотя по величине действия (Euclidean action) более выгодным остается, как отмечалось выше, режим синхронного туннелирования $\tau_1 = \tau_2$, но в небольшом интервале температур величины действий на основной траектории $\tau_1 = \tau_2$ и каскаде отцепленных туннельных траекторий $\tau_1 \neq \tau_2$ остаются сравнимыми, и оказываются возможными квантовые биения. Они в отличие от параллельного переноса перестают носить регулярный характер, а начинают напоминать хаос. Более того, важной особенностью изучаемых бифуркаций является для антипараллельного переноса (в отличие от параллельного) неустойчивый переход от синхронного к асинхронному туннелированию по типу «плавного перехода второго рода», тогда как для параллельного переноса такой устойчивый переход осуществляется скачком, по типу «перехода первого рода» (см. также рис. 4). На похожую особенность обращали внимание авторы работы [7].

частицами и, следовательно, с изменением их концентрации. Квантовое туннелирование может вносить существенный вклад в константу скорости переноса взаимодействующих частиц в указанном диапазоне температур T_c (при $k_B T_c / (\hbar \omega) \leq 1$), несмотря на их возможные высокие значения (для порфиринов T_c не превосходит 200 К). Следовательно, эффект смены режимов синхронного (одновременного) и асинхронного (неодновременного) переноса взаимодействующих частиц существенно квантовый.

Заключение

Таким образом, как для параллельного (3), так и для антипараллельного (4) и (5) движения туннелирующих частиц учет взаимодействия со средой качественно не влияет на характер переноса. Но количественно взаимодействие со средой по-разному влияет на антипараллельный и параллельный перенос частиц. Из выражения (12) следует, что влияние взаимодействия со средой на величину действия отлично от нуля при движении вдоль координаты «центра масс» $q_1 = q_2$. Следовательно, среда влияет всегда на параллельное движение туннелирующих частиц и не влияет на величину действия вдоль основной траектории $q_1 = -q_2$ при антипараллельном движении туннелирующих частиц.

В одноинстантонном приближении найдены выражения для действия (12) в моделях с «адиабатическими» потенциальными энергиями ((3), (4)) и (5) и проведен сравнительный анализ туннелирования двух взаимодействующих частиц, движущихся параллельно и антипараллельно, с учетом диссипации.

Условие применимости теории, гарантирующее квазистационарное протекание кинетического процесса (экспоненциальное затухание во времени вероятности туннелирования), было получено в [26].

Рассмотрен туннельный перенос с диссипацией двух квантовых частиц, взаимодействующих между собой и движущихся параллельно или антипараллельно. В случае движения туннелирующих частиц по параллельным координатам реакции в одном направлении в асимметричном адиабатическом потенциале, при некоторой температуре T_c в зависимости от величины коэффициента взаимодействия между частицами происходит отщепление от основной туннельной траектории $q_1 = q_2$ двух близких к ней подбарьерных траекторий. Подобное отщепление оказывается энергетически не выгодным для антипараллельного туннельного переноса частиц. Можно показать, что условие (30) определяет величину T_c , начиная с которой обеспечиваются устойчивые двумерные синхронные туннельные корреляции всех отмеченных в работе типов.

В заключение отметим, что ожидаемая продуктивность развития науки о квантовом туннелировании с диссипацией применительно к изучению эффективно одномерных и существенно двумерных нелинейных низкотемпературных адиабатических химических реакций как туннельных систем с диссипацией оказалась вполне оправданной.

Автор благодарен А.И. Ларкину, А.А. Овчинникову и Б.И. Ивлеву за внимание и обсуждение результатов настоящей работы.

Библиографический список

1. Meyer R., Ernst R.R. Hydrogen transfer in double minimum potential: kinetic properties derived from quantum dynamics // J. Chem. Phys. 1987. Vol. 86, № 2. P. 784.

2. Жуковский В.Ч., Кревчик В.Д., Семенов М.Б., Тернов А.И. Квантовые эффекты в мезоскопических системах. Ч. I. Квантовое туннелирование с диссипацией. М.: Изд-во физического ф-та МГУ, 2002. 108 С.
3. Smedarchina Z., Siebrand W., Wildman T.A. Intramolecular tunneling exchange of the inner hydrogen atoms in free-base porphyrins // Chem. Phys. Lett. 1988. Vol. 143, № 4. P. 395.
4. Smedarchina Z., Siebrand W., Zerbetto F. Comparison of synchronous and asynchronous hydrogen transfer mechanisms in free-base porphyrins // Chem. Phys. 1989. Vol. 136, № 2. P. 285.
5. Tokumura K., Watanabe Y., Itoh M. Deuterium isotope effects of excited-state and ground-state double-proton-transfer processes of the 7-azaindole H-bonded dimer in 3-methylpentane // J. Phys. Chem. 1986. Vol. 90, № 11. P. 2362.
6. Benderskii V.A., Goldanskii V.I., Ovchinnikov A.A. Effect of molecular motion on low-temperature and other anomalously fast chemical reactions in the solid phase // Chem. Phys. Lett. 1980. Vol. 73, № 3. P. 492.
7. Ивлев Б.И., Овчинников Ю.Н. Распад метастабильных состояний при наличии близких подбарьерных траекторий // ЖЭТФ. 1987. Т. 93, № 2(8). С. 668.
8. Caldeira A.O., Leggett A.J. Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems // Phys. Rev. Lett. 1981. Vol. 46, № 4. P. 211.
9. Affleck I. Quantum-statistical metastability // Phys. Rev. Lett. 1981. Vol. 46, № 6. P. 388.
10. Wolynes P.G. Quantum theory of activated events in condensed phases // Phys. Rev. Lett. 1981. Vol. 47, № 13. P. 968.
11. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. Квантовое туннелирование с диссипацией // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 37, № 7. С. 322.
12. Grabert H., Weiss U. Thermal enhancement of the quantum decay rate in a dissipative system // Z. Phys. B. 1984. Vol. 56, № 2. P. 171.
13. Caldeira A.O., Leggett A.J. Quantum tunnelling in a dissipative system // Ann. of Phys. 1983. Vol. 149, № 2. P. 374.
14. Мельников В.И. Активационно-туннельный распад метастабильных состояний // ЖЭТФ. 1984. Т. 87, № 2(8). С. 663.
15. Dekker H. Classical and quantum mechanics of the damped harmonic oscillator // Phys. Repts. 1981. Vol. 80, № 1. P. 1-112.
16. Schmid A. Quasiclassical wave function in multidimensional quantum decay problems // Ann. of Phys. 1986. Vol. 170, № 2. P. 333.
17. Заикин А.Д., Панюков С.В. К теории квантового туннелирования с линейной диссипацией // ЖЭТФ. 1985. Т. 89, № 5(11). С. 1890.
18. Каган Ю., Прокофьев Н.В. О туннелировании с «диссипацией» // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43, № 9. С. 434.
19. Grabert H., Weiss U. Quantum tunneling rates for asymmetric double-well systems with Ohmic dissipation // Phys. Rev. Lett. 1985. Vol. 54, № 15. P. 1605.
20. Сумецкий М.Ю. Неупругое туннелирование частицы, взаимодействующей с колебаниями // ЖЭТФ. 1985. Т. 89, № 2(8). С. 618.
21. Овчинников Ю.Н. Динамика частицы в двухъямном потенциале // ЖЭТФ. 1988. Т. 94, № 5. С. 365.
22. Ивлев Б.И. О динамике частицы в двухъямном потенциале // ЖЭТФ. 1988. Т. 94, № 7. С. 333.
23. Benderskii V.A., Vetoshkin E.V., Kats E.I., Trommsdorff H.P. Competing tunneling trajectories in a 2D potential with variable topology as a model for quantum bifurcations. <http://www.arxiv.org/cond-mat/0209030>.
24. Овчинников А.А., Дахновский Ю.И., Кревчик В.Д., Семенов М.Б.,

Арынгазин А.К. Управляемая модуляция низкоразмерных структур (монография). М: Наука, 2003 (в печати), 510 с.

25. *Dakhnovskii Yu.I., Ovchinnikov A.A., Semenov M.B.* Quantum tunneling with dissipation. Low-temperature adiabatic chemical reactions considered as dissipative tunnel systems // *Hadronic Journal*. 2002. Vol. 25, № 3. P. 303.

26. *Дахновский Ю.И., Овчинников А.А., Семенов М.Б.* Низкотемпературные химические реакции как туннельные системы с диссипацией // *ЖЭТФ*. 1987. Т. 92, № 3. С. 955.

27. *Dakhnovskii Yu.I., Semenov M.B.* Tunneling of two interacting particles: Transition between separate and cooperative tunneling // *J. Chem. Phys.* 1989. Vol. 91, № 12. P. 7606.

28. *Ovchinnikov A.A., Aringazin A.K., Dakhnovskii Yu.I., Krevchik V.D., Semenov M.B., Yamamoto K.* Two-dimensional tunnel correlations with dissipation // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 68. P. 155426. <http://arXiv.org/abs/cond-mat/0212623>.

Пензенский государственный
университет

Поступила в редакцию 8.04.03

TWO-DIMENSIONAL TUNNEL BIFURCATIONS

M.B. Semenov

Two possible types of two-dimensional tunnel bifurcations have been studied in frames of the «quantum tunneling with dissipation» science. Quantum oscillations near bifurcation point have been revealed in case of parallel tunnel transition for interacting particles. Also, the chaotic regime near the critical effective temperature in case of antiparallel tunnel transfer has been revealed.



Семенов Михаил Борисович - родился в Пензенской области (1960), окончил с отличием физический факультет МГУ (1985), аспирантуру кафедры теоретической физики МГУ (1988), до 1995 года - младший научный сотрудник той же кафедры. В настоящее время - доцент кафедры «Физика» Пензенского государственного университета, а также professor of the Institute for Basic Research, P.O. Box 1577, Palm Harbor, Fl. 34682, USA. Защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук в МГУ (1991). Область научных интересов - квантовое туннелирование с диссипацией, мезоскопика низкоразмерных систем, нелинейные квантовые низкоразмерные системы. Соавтор монографии «Управляемая модуляция низкоразмерных структур», соавтор учебного пособия для студентов физического факультета МГУ «Квантовые эффекты в мезоскопических системах», соавтор учебного пособия «Введение в современную мезоскопическую физику». Опубликовал более 30 научных статей по направлениям, указанным выше. Член редколлегии журнала «Известия вузов. Поволжский регион» по секции «Естественные науки».