

Tunneln mit Antrieb

T. Dittrich und P. Hänggi

In Gegenwart eines zeitabhängigen Antriebs bringt das altbekannte kohärente Tunneln in einem bistabilen Potential eine Vielfalt neuer Formen und Effekte hervor. Sie reichen vom Stillstand des Wellenpakets in einer der Potentialmulden über Quantenschwebungen bis zu Mischformen aus Tunneln und chaotischer Diffusion.

Der Tunneleffekt gehört seit den Anfängen der Quantenmechanik zu den elementarsten und zugleich überraschendsten unter ihren Vorhersagen. Die Erfindung des Rastertunnelmikroskops durch Binnig und Rohrer hat das Tunneln in den letzten Jahren auf spektakuläre Weise wieder in das Bewußtsein der Öffentlichkeit gebracht [1]. Tatsächlich ist es – denkt man an Anwendungen wie Zener-Dioden, Josephson-Kontakte, SQUIDs usw. – aus der Hochtechnologie nicht mehr wegzudenken. Der schnelle Transfer von Elektronen und Protonen innerhalb biologischer Makromoleküle, optimiert durch die Evolution, vollzieht sich durchweg durch Tunneln: Die entscheidenden Schritte der Photosynthese stellen ein Beispiel von kaum zu überschätzender Bedeutung dar.

Dr. habil. Thomas Dittrich und Prof. Dr. Peter Hänggi, Universität Augsburg, Institut für Physik, Memminger Str. 6, D-86135 Augsburg.

Sowohl für technische Anwendungen als auch für die Funktion biologischer Makromoleküle ist es wichtig, daß in diesen Vorgang steuernd eingegriffen werden kann, und zwar nicht nur durch dauerhaften Umbau von Bauteilen bzw. Molekülen, sondern auch auf kurzen Zeitskalen. Ein vielseitiges Mittel, um schnell und gezielt elektronische Prozesse und chemische Reaktionen zu beeinflussen, ist uns durch elektromagnetische Strahlung an die Hand gegeben. Namentlich die Steuerung durch modulierte Laserlicht ist in der Elektronik wie in der Chemie verbreitet [2].

Tunneln unter dem Einfluß starker dynamischer Felder zu verstehen, stellt eine Herausforderung an die Quantentheorie dar, handelt es sich doch um einen weitgehend kohärenten Prozeß mit einem zeitabhängigen Antrieb, der keiner Einschränkung hinsichtlich seiner Stärke unterliegt. Zunächst ist nicht einzusehen, wieso hier überhaupt noch von Tunneln die Rede sein kann, denn durch den Antrieb könnte, bliebe er nur lang genug bestehen, hinreichend viel Energie eingestrahlt werden, um eine Barriere auf klassischem Wege zu überwinden. Hier hilft der Begriff der Symmetrie, Klarheit zu schaffen. Kohärentes Tunneln tritt in statischen Potentialen insbesondere dort auf, wo die Energieeigenzustände aufgrund einer räumlichen Symmetrie in Paaren auftreten (Abb. 1). Obwohl selbst nicht lokalisiert, lassen sich aus diesen Dubletts Linearkombinationen bilden, die jeweils in einer Potentialmulde konzentriert sind. Ein zeitabhängiger Antrieb wird die Symmetrie des ungestörten Systems im allgemeinen brechen, es sei denn, er bringe selbst die gleiche oder eine neue Symmetrie, auch in bezug auf die Zeitabhängigkeit, ins Spiel. Ist der Antrieb periodisch in der Zeit, so existieren Eigenzustände des zeitabhängigen Potentials, die für das getriebene System dieselbe Rolle spielen wie die Energieeigenzustände für ein nicht getriebenes System. Sie werden als

Floquet-Zustände bezeichnet und die Eigenfrequenzen, die den Eigenenergien zeitunabhängiger Systeme entsprechen, als *Quasienergien*. Weist der Antrieb über die Periodizität hinaus eine weitere Symmetrie auf, so können Tunneldoublets auftreten, die denjenigen in einem statischen Potential ganz analog sind.

Ähnlich wie das Energiespektrum eines autonomen Systems bestimmt das Spektrum der Quasienergien wesentliche Eigenschaften der Dynamik. Allerdings hat man bereits bei einem unmodulierten periodischen Antrieb zwei zusätzliche Parameter zur Verfügung, um das Spektrum zu verändern, nämlich dessen Frequenz ω und Amplitude S . Ein Teil der Physik des Tunnelns mit Antrieb ist also in der „Landschaft“ der Quasienergieflächen enthalten, die sich über diesem zweidimensionalen Parameterraum erstrecken. Von Interesse ist vor allem, inwieweit eine Leiter von Tunneldoublets mit extrem kleinen Aufspaltungen, wie sie für das gewohnte kohärente Tunneln charakteristisch ist (Abb. 1), in dieser Quasienergie-landschaft wiederkehrt. Angenommen, das periodisch getriebene System sei invariant unter einer Transformation, die sich bei Abwesenheit des Antriebs auf die gewöhnliche Parität ($x \rightarrow -x$) reduziert: Dann lassen sich gerade und ungerade Eigenzustände unterscheiden, und Paare aus Zuständen entgegengesetzter Parität bilden, wie im statischen Fall, Dubletts. Freilich ist deren Energieaufspaltung nun eine Funktion der Parameter des Antriebs. Es ist möglich, daß sich die ursprünglich winzige Aufspaltung in bestimmten Gebieten des Parameterraums erheblich aufweitet, und es ist ebensowenig ausgeschlossen, daß sie für andere Parameterwerte exakt zu Null wird!

Beide Situationen treten in der Tat ein. Das hat die Untersuchung eines archetypischen Modellsystems ergeben, des monochromatisch getriebenen, quartischen Doppelmuldenpotentials

$$V(x,t) = \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{64D}x^4 + x S \cos \omega t, \quad (1)$$

das unter der verallgemeinerten Paritätsoperation $x \rightarrow -x, t \rightarrow t + \pi/\omega$ invariant ist. Eine Vergrößerung der Tunnelaufspaltung findet man hier bereits bei sehr langsamem und bei sehr schnellem Antrieb, gemessen auf den Zeitskalen des ungetriebenen Systems. Dazu gehört neben der Tunnelaufspaltung Δ (etwa des Grundzustandsdubletts) noch die Eigenfrequenz Ω der annähernd harmonischen Bewegung in den beiden Mulden des Potentials. Spannender wird es, sobald die Periode des Antriebs in die Nähe einer dieser natürlichen Zeitskalen kommt. Hier erfährt das Spektrum drastische, qualitative Änderungen gegenüber dem ungetriebenen Fall, und in der Entwicklung eines zu Anfang in einer der Mulden lokalisierten Zustandes ist der altbekannte Tunnelprozeß kaum wiederzuerkennen [3]. Bei typischen Werten von S und ω in diesem interessanten Bereich gesellen sich zu der eigentlichen Tunnelaufspaltung noch eine Reihe nahebei liegender Frequenzen hinzu, so daß es zu, unter Umständen recht komplexen, quantenmechanischen Schwebungen anstelle des harmonischen Hin- und Herlaufens der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den Mulden kommt.

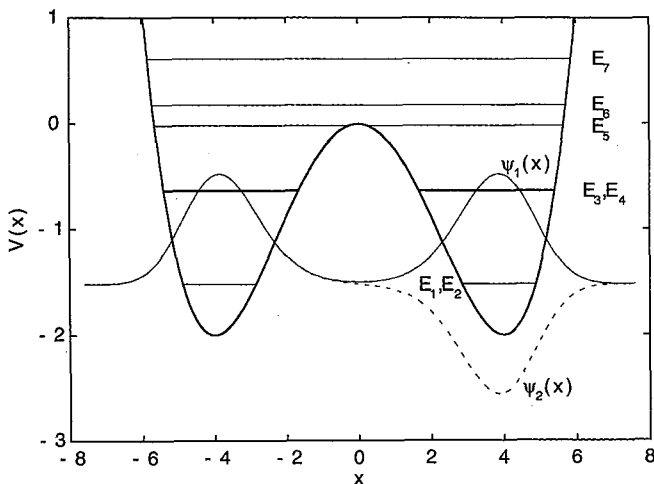


Abb. 1: Kohärentes Tunneln in einem symmetrischen Doppelmuldenpotential ohne Antrieb (dicke Linie, nach Gl. 1 mit $D = 2$ und $S = 0$). Die Aufspaltung der untersten beiden Tunnelndubletts im Energiespektrum (horizontale Linien) wird im Druck nicht mehr (E_1, E_2) bzw. gerade noch (E_3, E_4) aufgelöst. Der Grundzustand $\psi_1(x)$ (durchgezogen, Ordinate in willkürlichen Einheiten) ist von gerader Parität, der erste angeregte Zustand $\psi_2(x)$ (gestrichelt) von ungerader Parität. Für einen in der linken Mulde konzentrierten Anfangszustand $|\psi_{\text{links}}\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)/\sqrt{2}$ lautet die Wahrscheinlichkeit, in diesem Zustand zu bleiben, $P(t) = \cos^2(\Delta t/2\hbar)$, wo $\Delta = E_2 - E_1$ die Aufspaltung des untersten Dubletts angibt.

Noch erstaunlicher allerdings ist der oben schon angedeutete Fall, daß sich die zu einem Tunnelndublett gehörenden Quasienergieflächen über dem (ω, S) -Raum schneiden, die Aufspaltung also exakt verschwindet. Gehören diese Energien zu Zuständen entgegengesetzter Parität, wie das für die Partner in einem Dublett gilt, so können sich die Quasienergieflächen entlang von Linien im Parameterraum kreuzen; sind die Zustände hingegen von gleicher oder ohne definierte Parität, so ist nach dem Wigner-von-Neumann-Theorem nur eine Berührung in isolierten Punkten möglich.

Wo die Tunnelaufspaltung verschwindet, kommt die Zeitentwicklung der Phasendifferenz zwischen den beiden Partnern des Tunnelndubletts zum Stillstand. Freilich besitzen die Floquet-Zustände noch eine zusätzliche, innere Zeitabhängigkeit, die daher rührt, daß bei einem zeitabhängigen Potential die Zeit die Rolle einer weiteren räumlichen Koordinate annimmt. Ist nun diese innere Zeitabhängigkeit bloß geringfügig, so wird das Tunneln in der Tat an den Kreuzungen des Dubletts praktisch vollständig unterdrückt (Abb. 2). Dieser überraschende; wohlgekannt rein kohärente Effekt ist in numerischen Simulationen eingehend studiert worden und wartet auf seine experimen-

telle Bestätigung. Exakte Kreuzungen des Tunnelndubletts geben noch zu einigen anderen ungewöhnlichen Effekten Anlaß, wie Frequenzverdopplung und Niedrigfrequenzerzeugung beim Dipolmoment [4]. Der kohärenten Lokalisierung nahe verwandt ist die Unterdrückung der Transmission durch getriebene Doppelbarrieren für entsprechende Werte der Antriebsparameter [5].

Sowohl die Beschleunigung oder die Unterdrückung des Tunnelns als auch quantenmechanische Schwebungen im Tunnelprozeß sind dem Bereich tief quantenmechanischer Dynamik zuzuordnen, denn es tragen jeweils nur eine geringe Zahl von Eigenzuständen wesentlich zur Zeitentwicklung bei. Die entscheidenden Eigenschaften der kohärenten Lokalisierung in einem bistabilen Potential, insbesondere die Kurven im (ω, S) -Raum, auf denen sie auftritt, lassen sich sogar bereits mit einer Zweiniveunäherung erfassen [6]. Es handelt sich also um einen fast ebenso elementaren Kohärenzeffekt, wie es das Tunneln selbst darstellt.

Freilich ist eine Reduktion der Quantendynamik auf nur einige wenige Niveaus eher untypisch für die eingangs angesprochenen Anwendungen des getriebenen Tunnelns. Zunächst bedeutet ja bereits

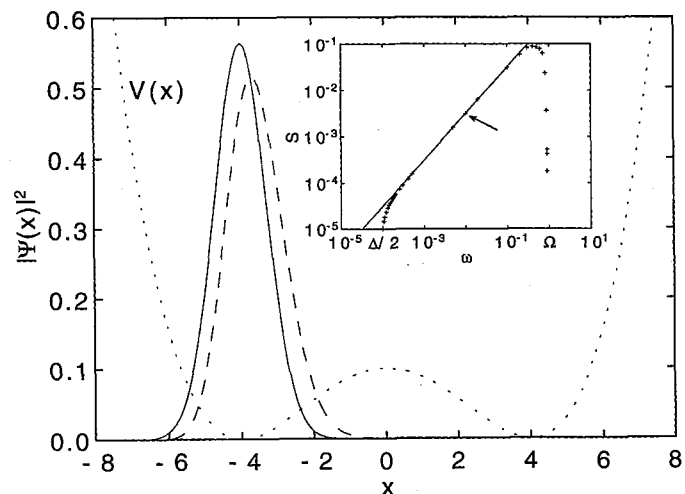


Abb. 2: Kohärente Unterdrückung des Tunnelns in einem symmetrischen Doppelmuldenpotential mit periodischem Antrieb (gepunktet, Gl. 1 mit $D = 2$ bei $t = \pi/2\omega$, Ordinate in willkürlichen Einheiten) an einer Überkreuzung der dem Grundzustandsdublett entsprechenden Quasienergien. Die gestrichelte Kurve zeigt die maximale Verschiebung eines in der linken Mulde präparierten Wellenpakets (durchgezogen) im Laufe seiner Zeitentwicklung. Die Wahrscheinlichkeit, im Ausgangszustand zu verbleiben, ist im Rahmen einer Zweiniveunäherung durch den Ausdruck $P(t) \sim \cos^2[J_0(S\mu/\hbar\omega)\Delta t/2\hbar]$ gegeben, in dem μ das Übergangsdipolmoment bezeichnet. Die Nullstellen der nullten Bessel-Funktion $J_0(S\mu/\hbar\omega)$ bestimmen approximativ die Lage der Kreuzungen in der (ω, S) -Ebene. In der Einfügung wird diese Mannigfaltigkeit (durchgezogen) mit Punkten der entsprechenden exakten Kurve (Kreuze) verglichen. Der Pfeil markiert die für das Hauptbild gewählten Parameterwerte.

die Darstellung des Antriebs als einer deterministischen, von Rückwirkungen durch das getriebene System freien Kraft eine erhebliche Vereinfachung. Genaugenommen wäre auch für den Antrieb ein Quantensystem anzusetzen, z. B. ein harmonischer Oszillator mit großer Masse, damit die Reaktion des treibenden auf die Bewegung des getriebenen Systems gering bleibt. Die Untersuchung eines entsprechend erweiterten Modells für getriebenes Tunneln hat gezeigt, daß die erwähnten Kohärenzeffekte dort in ähnlicher Form auftreten [7].

Aber auch das getriebene System kann hoch angeregt sein. Das schiere Anwachsen der Zahl der beteiligten Zustände hat nach dem Ehrenfestischen Korrespondenzprinzip eine Annäherung an klassisches Verhalten zur Folge. Die nie ganz vermeidbare Kopplung des betrachteten Systems an ein makroskopisches Umfeld bewirkt zudem, daß die quantenmechanische Kohärenz allmählich zerstört wird. So weisen bereits biologische Makromoleküle tausende von inneren Freiheitsgraden auf, und ähnliches gilt, selbst bei den heute erreichbaren Graden der Miniaturisierung, für elektronische Bauelemente. Hinzu kommen die Freiheitsgrade der Umgebung, etwa der Zuleitungen, die ein Bauelement mit einem Schaltkreis verbinden.

Die klassische Dynamik getriebener bistabiler Systeme steht ihrer Quantendynamik, was die Fülle der Phänomene angeht, in nichts nach. Entscheidend hierfür ist, daß die geringste periodische Störung die Bewegung in einem Teil des Phasenraums chaotisch werden läßt. Chaos breitet sich, mit wachsender Amplitude des Antriebs, in der Nähe der Separatrix aus, also des Paares instabiler Bahnen, die vom Scheitel der Barriere ausgehen. Damit kommt ein klassischer Transportmechanismus ins Spiel, die Diffusion innerhalb des chaotischen Phasenraumgebiets. In einem weiten Bereich des Parameterraums treten chaotische Diffusion und kohärentes Tunneln gemeinsam auf und beeinflussen sich gegenseitig (Abb. 3). So hat sich ein mehrteiliger Tunnelprozeß, der einen „Zwischenaufenthalt“ im chaotischen Gebiet einbezieht, als besonders effektiv erwiesen. Die Schnelligkeit des Transports auf diesem Weg äußert sich wiederum in der Energieaufspaltung der miteinander verbundenen Zustände, die so von der Größe des chaotischen Gebiets abhängig wird: „Chaosgestütztes Tunneln“ ist ein reizvolles Beispiel für das Zusammenwirken klassischer Nichtlinearität mit quantenmechanischer Kohärenz [8].

Der Zerfall der Kohärenz. als zweite

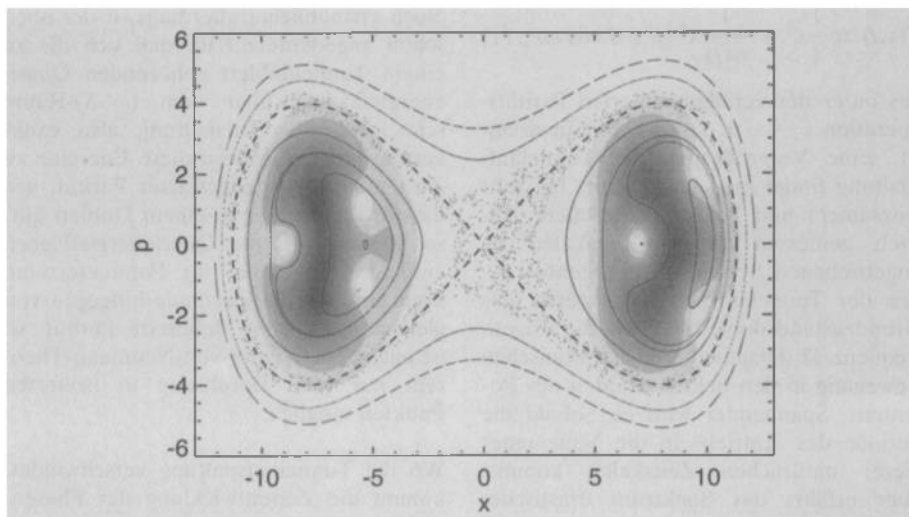


Abb. 3: Tunneln und klassisches Chaos. Im Phasenraum des periodisch getriebenen symmetrischen Doppelmuldenpotentials (Gl. 1 mit $D = 8$ und $S = 0,07$, die Figur zeigt die Durchstoßpunkte der Trajektorien jeweils bei Phase 0 des Antriebs) entwickelt sich ein chaotischer Bereich um die Separatrix (dicke gestrichelte Linie) des ungestörten Potentials herum. Zustände, die zu einem Tunnelndublett gehören (die Graustufenverteilung gibt die Husimi-Funktion, eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum, für das vierte angeregte Tunnelndublett wieder), überlappen mit dem chaotischen Gebiet, so daß Tunneln und klassische Diffusion entlang der Separatrix beim Transport von Mulde zu Mulde zusammenwirken.

Komponente des Übergangs zu klassischem Verhalten, macht das getriebene Tunneln in all seinen Erscheinungsformen zu einem transienten Phänomen. Die asymptotischen Zustände, in die die getriebene Dynamik unter dem Einfluß der Umgebung mündet, können noch eine Zeitabhängigkeit mit der Periode des Antriebs besitzen. Sie zeigen aber nur mehr Quanteneffekte, die auf inkohärentem Quantenrauschen beruhen.

Die kohärente Unterdrückung des Tunnelns bietet auch, was ihren Zerfall angeht, Überraschungen. Sind Frequenz und Amplitude des Antriebs nicht exakt auf die Kurve im (ω, S) -Raum eingestellt, auf der Lokalisierung eintritt, so besteht die kohärente Dynamik in einem „Kriechen“ des Wellenpakets von einer Mulde in die andere. Dieses kohärente Kriechen wird nun seinerseits, so ist aus numerischen Experimenten zu schließen, durch einen verrauschten Antrieb, bei einer bestimmten Rauschstärke, unterdrückt, d. h. geschickt gewähltes Rauschen stabilisiert die kohärente Lokalisierung [9]. Dieser Effekt gemahnt an die Unterbindung der kohärenten Zeitentwicklung durch kontinuierliches Messen (Quanten-Zenon-Effekt).

Kohärenzzerstörendes Rauschen geht, auf der Zeitskala klassischer Relaxation, stets mit Dissipation einher. Sie bewirkt bei einem getriebenen bistabilen System, daß chaotische Bahnen gegen seltsame Attraktoren streben, die hier typischerweise in Paaren auftreten. Transientes Tunneln

findet also zwischen den Einzugsbereichen koexistierender seltsamer Attraktoren statt! Das mag als Beispiel für die ungewöhnliche Physik stehen, die getriebenes Tunneln am quantenmechanisch-klassischen Übergang erwarten läßt.

Literatur

- [1] G. Binnig u. H. Rohrer, Phys. Bl. **43** (1987) 282.
- [2] D. J. Tannor, Nature **369** (1994) 445; D. J. Tannor u. S. A. Rice, Adv. Chem. Phys. **90** (1988) 441.
- [3] F. Großmann, T. Dittrich, P. Jung u. P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 516.
- [4] R. Bavli u. H. Metiu, Phys. Rev. A **47** (1993) 3299.
- [5] M. Wagner, Phys. Rev. A **51** (1995) 758.
- [6] J. M. Gomez-Llorente u. J. Plata, Phys. Rev. A **45** (1992) R6958; F. Großmann u. P. Hänggi, Europhys. Lett. **18** (1992) 571; Y. Kayanuma, Phys. Rev. A **50** (1994) 843.
- [7] J. M. Gomez-Llorente u. J. Plata, Phys. Rev. A **48** (1993) 782; D. E. Makarov, Phys. Rev. E **48** (1993) R4164.
- [8] R. Utermann, T. Dittrich u. P. Hänggi, Phys. Rev. E **49** (1994) 273; S. Tomsovic u. D. Ullmo, Phys. Rev. E **50** (1994) 145; M. Latka, P. Grigolini u. B. J. West, Phys. Rev. A **50** (1994) 1071.
- [9] T. Dittrich, B. Oelschlägel u. P. Hänggi, Europhys. Lett. **22** (1993) 5.