

А. Н. Темников

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ОДНОМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ. МОДЕЛЬ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Ключевые слова: наноструктуры, квантовые эффекты, волновая функция, моделирование.

Показана возможность анализа квантовых эффектов в наноструктурах с помощью наглядной модели, в которой эволюция волновой функции во времени рассчитывается на основе дискретного аналога уравнения Клейна – Гордона, описывающего распространение волн в системе связанных осцилляторов, находящихся в потенциальном поле.

Keywords: nanostructures, quantum effects, wave function, modeling.

The possibility of analysis of quantum effects in nanostructures is demonstrated on the basis of a simple model in which the time evolution of wave function is calculated using the discrete analog of the Klein – Gordon equation describing the wave propagation in a system of coupled oscillators in a potential field.

Введение

Физические модели природных объектов и явлений играют важную роль, как при изучении физики, так и в практической деятельности инженера-исследователя и ученого [1 – 3]. В педагогическом процессе модели обеспечивают реализацию дидактических принципов наглядности, доступности, систематичности знаний, способствуют формированию общего представления о методах физической науки, развивают навыки использования аналогии как метода научного познания. В практической деятельности современного инженера использование адекватных физических моделей позволяет определить границы вариации основных параметров исследуемого объекта или процесса и на этой основе корректно обосновать главное направление экспериментальных исследований, что повышает их эффективность, как с точки зрения получения конечного результата, так и с экономической точки зрения. Следует особо выделить прогностическую функцию физических моделей, анализ которых позволяет выявить новые физические эффекты и наметить новые, перспективные направления исследований.

Развитие нанотехнологий предъявляет повышенные требования к уровню освоения квантовой механики – одного из наиболее абстрактных разделов физики. В этом направлении можно продвинуться путем формирования наглядных образов абстрактных объектов на основе моделей с интуитивно понятным «механизмом» действия.

В данной работе обсуждается модель волновой функции и способ расчета ее эволюции во времени.

1. Представление волновой функции

Согласно существующей классификации [4], к одномерным относят наноструктуры, размер которых в продольном направлении значительно превышает их поперечные размеры. В этом случае микрочастицы могут свободно перемещаться вдоль проводника, а квантовые ограничения проявляются лишь при рассмотрении подвижности частиц в поперечном

направлении. Наиболее перспективными являются гетероструктуры, благодаря необычным свойствам их пограничных областей. В этом случае квантовые эффекты проявляются и при продольном движении микрочастиц.

Волновая функция свободной частицы, движущейся вдоль оси x , обычно ассоциируется с распространяющейся в этом направлении плоской волной. Стандартное выражение, описывающее бегущую волну

$$\psi = A \cos(\omega t - kx),$$

не удовлетворяет условию равновероятного обнаружения частицы в любой точке на оси x

$$|\psi|^2 = \text{const},$$

поэтому используется комплексная волновая функция

$$\psi = A e^{i(\omega t - kx)}, \quad (1)$$

для которой

$$|\psi|^2 = A e^{i(\omega t - kx)} \cdot A e^{-i(\omega t - kx)} = A^2 = \text{const}$$

Значение постоянной A рассчитывается из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1. \quad (2)$$

Согласно Эйлеру, выражение (1) можно записать в виде

$$\psi = A \cos(\omega t - kx) + i A \sin(\omega t - kx) = \psi_{\text{Re}} + i \psi_{\text{Im}}.$$

Последняя формула дает возможность наглядной геометрической интерпретации комплексной волновой функции как суммы двух плоских волн, ψ_{Re} и ψ_{Im} , поляризованных во взаимно перпендикуляр-

ных плоскостях и сдвинутых по фазе на $\frac{\pi}{2}$:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Re}} &= A \cos(\omega t - kx) \\ \psi_{\text{Im}} &= A \sin(\omega t - kx) \end{aligned} \quad (3)$$

Как известно, сумма таких волн представляет собой волну, поляризованную по кругу. Таким образом,

наглядным аналогом комплексной волновой функции свободной частицы может быть поляризованная по кругу волна. Такое представление естественно согласуется с требованием равной вероятности обнаружения частицы в любой точке на оси x :

$$\psi^2 = \psi_{\text{Re}}^2 + \psi_{\text{Im}}^2 = A^2 = \text{Const}.$$

Для свободной частицы, волновая функция которой является безграничной плоской волной, из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = A^2 x \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 1$$

следует $A = 0$, что лишено физического смысла. В реальных экспериментах частица всегда локализована в некоторой области пространства.

Волновую функцию локализованной частицы обычно представляют в виде волнового пакета – суперпозиции множества плоских волн с различными значениями импульсов (или волновых чисел). При этом считают, что в начальный момент времени огибающая волнового пакета (и распределение волн по импульсам) описывается функцией Гаусса:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}. \quad (4)$$

В этом случае формулы (3) с учетом (2) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{Re}} &= \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \cos(\omega t - kx) \\ \psi_{\text{Im}} &= \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \sin(\omega t - kx) \end{aligned} \quad (5)$$

На рис. 1 изображены волновые функции свободной и локализованной частицы, представленные в виде фрагментов поляризованной по кругу волны. На каждом из этих рисунков длина отрезков, перпендикулярных направлению распространения волны, соответствует значению амплитуды волновой функции в разных точках оси x . Как видно, на первом рисунке эта величина одинакова для всех x , на втором рисунке амплитуда волновой функции модулирована гауссовой функцией.

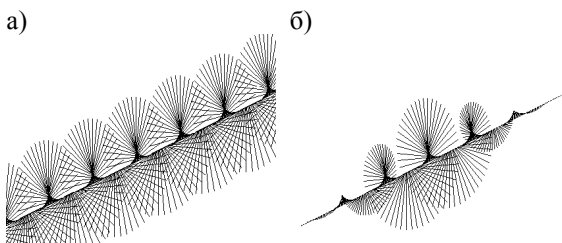


Рис. 1 - Представление волновой функции в виде поляризованной по кругу волны: а) волновая функция свободной частицы; б) гауссов волновой пакет

Представление волновой функции в виде (5) подразумевает неопределенность значения волнового

числа k и, следовательно, импульса и энергии частицы. Это, в свою очередь, затрудняет установление важных связей в системах с потенциальными барьерами, таких, например, как зависимость коэффициентов пропускания (T) и отражения (R) от параметров частиц и характеристик барьеров.

Из общей теории [5] следует, что с увеличением длительности процесса его характеристики определяются с большей точностью. Так, увеличивая значение параметра σ в (4) до бесконечности, можно, осуществив формальный переход от (4) к (3), что позволяет уменьшить неопределенность значения k , но чрезмерное увеличение σ создает проблемы при компьютерном моделировании.

Альтернативным представлением волновой функции, удобным для модельных расчетов, может быть волновой пакет, форма огибающей которого определяется следующими равенствами:

$$f(x) = \begin{cases} Ae^{-\frac{(x-x_1)^2}{2\sigma^2}}, & x < x_1 \\ A, & x_1 \leq x \leq x_2 \\ Ae^{-\frac{(x-x_2)^2}{2\sigma^2}}, & x > x_2 \end{cases} \quad (6)$$

Значение константы A , удовлетворяющее условию (2), зависит от трех параметров:

$$A = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi} + x_2 - x_1}}.$$

То, что амплитуда волновой функции остается постоянной в большой области пространства делает использование функции (6) в ряде случаев предпочтительным по сравнению с (4).

На рис. 2 и 3 представлены огибающие волновых пакетов, с различными значениями интервала $x_2 - x_1$ и соответствующие им распределения по волновым числам, полученные с помощью численного преобразования Фурье. Как и ожидалось, с увеличением указанного интервала, ширина распределения существенно уменьшается.

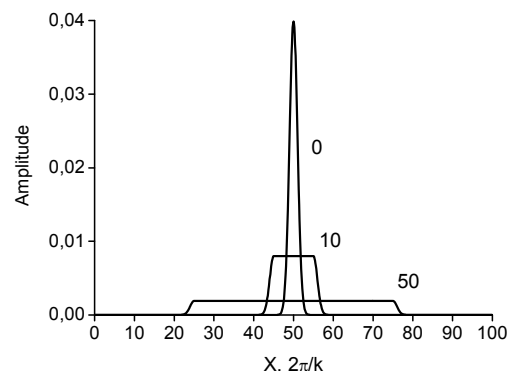


Рис. 2 - Огибающие волновых пакетов, описываемых формулами (6), при различных значениях интервала $x_2 - x_1$; цифры у кривых указывают число длин волн $\lambda = 2\pi/k$, укладывающихся на отрезке $x_2 - x_1$; параметр σ также равен λ .

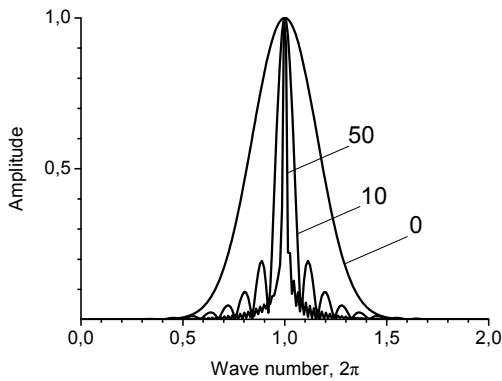


Рис. 3 - Распределение волн по волновым числам для волновых пакетов, огибающие которых представлены на рис. 2. Для наглядности кривые нормированы по амплитуде волновой функции, для которой $k = 2\pi$, т.е. $\lambda=1$

2. Описание эволюции волновой функции

Традиционным способом расчета волновой функции является решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}.$$

За исключением нескольких стандартных случаев, это дифференциальное уравнение решается численными методами, например, методом конечных разностей. При этом применяется формализм экспоненциальных операторов, приближенные значения которых получают, используя разложение в ряд Тейлора, как для самого оператора, так и для гамильтониана, и ограничиваясь линейными членами. Известно [6], что любая волновая функция, образованная суперпозицией плоских волн, должна удовлетворять волновому уравнению Клейна – Гордона. Известен [7] дискретный аналог этого уравнения, который можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = -\omega_0^2 \psi(x, t) + \omega^2 [\psi(x - \Delta x, t) + \psi(x + \Delta x, t) - 2\psi(x, t)] \quad (7)$$

Это уравнение по существу представляет собой уравнение движения осциллятора (маятника) в цепочке таких же осцилляторов, упруго связанных друг с другом и находящихся во внешнем потенциальном поле. Частота ω_0 определяется взаимодействием отдельного осциллятора с потенциальным полем, частота ω – взаимодействием соседних осцилляторов друг с другом. Так, для математических маятников длиной L и массой M , связанных пружинами жесткостью K и находящихся в гравитационном поле напряженностью G , значения ω_0 и ω рассчитываются по хорошо известным формулам:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{G}{L}} \quad \text{и} \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{M}}.$$

Согласно (7) ускорение каждого маятника зависит от его смещения относительно своего положения равновесия и относительно соседних маятников. Интересно отметить, что формальные математические преобразования в рамках такой модели приоб-

ретают простой физический смысл. В частности, известное соотношение, часто используемое в численных методах [8],

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \cong \frac{1}{(\Delta x)^2} [\psi(x - \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x + \Delta x)],$$

которое обычно получают путем разложения в ряд Тейлора значений функции в точках, соседних с точкой x , является аналогом выражения для ускорения маятника в системе связанных маятников при $G = 0$.

Следуя наглядной модели, описываемой уравнением (7), и используя элементарные кинематические соотношения

$$\frac{\partial \psi(x, t + \Delta t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} \Delta t$$

и

$$\psi(x, t + \Delta t) = \psi(x, t) + \frac{\partial \psi(x, t + \Delta t)}{\partial t} \Delta t$$

можно для заданных $\omega_0(x)$ и $\omega(x)$ рассчитать значения функций ψ_{Re} , ψ_{Im} и $|\psi|^2$ в любой момент времени, в любой точке оси x .

3. Отражение от барьера

Простейшей тестовой задачей, как для теоретического анализа, так и для компьютерного моделирования является задача об отражении частицы от бесконечно высокого потенциального барьера. В случае одномерной наноструктуры таким барьером является, например, каждый из двух концов однородного проводника.

Хотя функции ψ_{Re} и ψ_{Im} формально различаются, здесь нет оснований устанавливать для них разные условия взаимодействия с барьером. В случае бесконечно высокого барьера, располагающегося в точке с координатой x_b достаточно задать значения функций ψ_{Re} и ψ_{Im} в этой точке равными нулю. Результаты компьютерного эксперимента приведены на рис. 4.

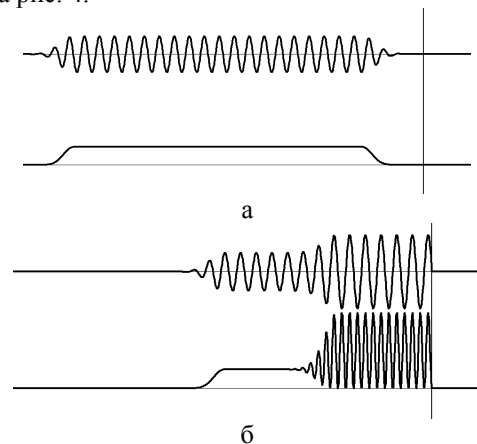


Рис. 4 - Взаимодействие волнового пакета с потенциальным барьером бесконечной высоты: а - вид функций ψ_{Re} и $|\psi|^2$ вдали от барьера; б - функции ψ_{Re} и $|\psi|^2$ во время взаимодействия с барьером

При анализе результатов следует обратить внимание на характерные (квантовые) особенности трансформации волнового пакета: в результате интерференции падающей и отраженной частей пакета амплитуда волновой функции ψ_{Re} (и ψ_{Im}) около барьера увеличивается вдвое, а на графике функции распределения вероятностей $|\psi|^2$ появляются максимумы и минимумы, расстояние между которыми составляет половину длины волны. Вероятность обнаружения частицы в точках максимумов в четыре раза выше, чем вдали от барьера, в минимумах эта вероятность равна нулю. Заметим, что подобные иллюстрации не встречаются в известной литературе. В ходе компьютерного эксперимента контролировалось условие (2); максимальное отклонение не превышало 10^{-5} .

Литература

1. И. П. Анашкин, А. В. Клинов, *Вестник КГТУ*, 3, 2011, 272-274.
2. В. Г. Макаров, А. Ю. Афанасьев, В. А. Матюшин, *Вестник КГТУ*, 5, 2011, 124-132.
3. Э. Ф. Вознесенский, *Вестник КГТУ*, 5, 2011, 271-274.
4. А. И. Гусев, *Нanomатериалы, наноструктуры, нанотехнологии*. Физматлит, Москва, 2007. 416 с.
5. А.А. Харкевич, *Спектры и анализ*. Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, Москва, 1962. 236 с.
6. Э. Вихман, *Квантовая физика*. Наука, Москва, 1977. 416 с.
7. Ф. Крауфорд, *Волны*. Наука, Москва, 1976. 528 с.
8. И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев, *Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов*. Наука, Москва, 1986. 544 с.