

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, не удовлетворяет условию равновероятного обнаружения частицы в любой точке на оси  $x$ , поэтому используется комплексная волновая функция, (1) для которой значение постоянной рассчитывается из условия нормировки. (2) Согласно Эйлеру, выражение (1) можно записать в виде. Последняя формула дает возможность наглядной геометрической интерпретации комплексной волновой функции как суммы двух плоских волн, и, поляризованных во взаимно перпендикулярных плоскостях и сдвинутых по фазе на  $\pi/2$ . (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  $x$ . Для свободной частицы, волновая функция которой является безграничной плоской волной, из условия нормировки следует, 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:  $\psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk$ . (4) В этом случае формулы (3) с учетом (2) принимают следующий вид: (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 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 в (4) до бесконечности, можно, осуществив формальный переход от (4) к (3), что позволяет уменьшить неопределенность значения  $k$ , но чрезмерное увеличение создает проблемы при компьютерном моделировании. Альтернативным представлением волновой функции, удобным для модельных расчетов, может быть волновой пакет, форма огибающей которого определяется следующими равенствами: (6) Значение константы  $A$ , удовлетворяющее условию (2), зависит от трех параметров:  $A, \sigma, x_0$ . 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 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  $\Delta k$ ; цифры у кривых указывают число длин волн  $\lambda$ , укладывающихся на отрезке  $\Delta x$ ;

параметр также равен 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  $\psi = 1$ .

2. Описание эволюции волновой функции Традиционным способом расчета волновой функции является решение уравнения Шредингера. 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: (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 определяется взаимодействием отдельного осциллятора с потенциальным полем, частота - 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  $\omega$  и рассчитываются по хорошо известным формулам:  $\omega = \sqrt{g/l}$  и  $\omega = \sqrt{k/m}$ . 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 приобретают простой физический смысл. В частности, известное соотношение, часто используемое в численных методах [8],  $\omega^2 = g/l + k/m$ , которое обычно получают путем разложения в ряд Тейлора значений функции в точках, соседних с точкой  $x=0$ , является аналогом выражения для ускорения маятника в системе связанных маятников при  $x=0$ . Следуя наглядной модели, описываемой уравнением (7), и используя элементарные кинематические соотношения и можно для заданных  $x$  и  $t$  рассчитать значения функций  $\psi$  и  $\psi^*$  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  $\psi$  и формально различаются, здесь нет оснований устанавливать для них разные условия взаимодействия с барьером. В случае бесконечно высокого барьера, располагающегося в точке с координатой достаточно задать значения функций  $\psi$  и  $\psi^*$  в этой точке равными нулю. Результаты компьютерного эксперимента приведены на рис. 4. а б Рис. 4 - Взаимодействие

волнового пакета с потенциальным барьером бесконечной высоты: а - вид функций и вдали от барьера; б функции и 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 (и ) около барьера увеличивается вдвое, а на графике функции распределения вероятностей 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  $10^{-5}$ .