

А. Н. Темников

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ОДНОМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦЫ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Ключевые слова: наноструктура, потенциальный барьер, квантовые эффекты, моделирование.

Для численного решения задачи о прохождении микрочастицы через потенциальный барьер используется простая наглядная модель, в которой эволюция волновой функции во времени рассчитывается на основе дискретного аналога уравнения Клейна – Гордона. Показано, что использование преобразования Фурье позволяет в ходе единственного численного эксперимента получить полную зависимость коэффициента прохождения от энергии частицы. Результаты сравниваются с известными аналитическими расчетами.

Keywords: nanostructure, potential barrier, quantum effects, modeling.

For numerical solution the problem on passage of particle through potential barrier the simple visual model is used. The time evolution of wave function is calculated using discrete analog of the Klein - Gordon equation. It is shown, that use of Fourier transformation allows to obtain full energy dependence of barrier transmission coefficient in a single numerical experiment. The results are compared with known analytical solutions.

Большинство наноструктурированных материалов являются гетерогенными [1 - 3]. Пограничные области входящих в их состав отдельных наноструктур обладают необычными свойствами, которые объясняются квантовыми эффектами, сопровождающими движение частиц вдоль последовательности гетероструктур. Типичной задачей, возникающей при этом, является задача на прохождение частицами потенциальных барьеров. При этом частица моделируется волновым пакетом, эволюция которого определяется уравнением Шредингера.

Интересно отметить, что задолго до возникновения квантовой механики Френель, решая задачу об отражении и преломлении световых волн на границе раздела двух сред с показателями преломления n_1 и n_2 , получил выражения для коэффициентов отражения и прохождения. При нормальном падении света на границу раздела формулы Френеля имеют следующий вид:

$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2, \quad T = \frac{4n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}.$$

Как известно, показатель преломления связан с фазовой скоростью света,

$$n = \frac{c}{v}.$$

Фазовая скорость, в свою очередь, может быть выражена через волновое число,

$$v = \frac{\omega}{k}.$$

Используя эти соотношения, формулы Френеля легко можно представить в следующем виде:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Через сто лет эти формулы были получены заново, но уже в рамках квантовой механики при решении задачи о прохождении частицы через ступенчатый потенциал Хэвисайда. Это не удивитель-

но, если учесть, что квантовая механика широко использует волновые модели.

В данной работе приведены результаты численных расчетов коэффициента прохождения при столкновении частицы с потенциальным барьером прямоугольной формы. Во многих случаях численные методы расчета являются более точными, чем аналитические, основанные на множестве допущений [4].

Использованный здесь алгоритм расчета эволюции волновой функции был рассмотрен ранее [5]. Он основан на простой наглядной модели, описываемой дискретным аналогом уравнения Клейна-Гордона

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial t^2} = -\omega_0^2 \psi(x, t) + \omega^2 [\psi(x - \Delta x, t) + \psi(x + \Delta x, t) - 2\psi(x, t)] \quad (1)$$

и позволяет при заданных параметрах $\omega_0(x)$ и $\omega(x)$ рассчитать значения волновой функции $\psi(x)$ в любой момент времени. Следует подчеркнуть, что эволюционный подход дает возможность использовать один и тот же алгоритм расчета при изменении условий распространения волновой функции.

В работе [5] упоминалась проблема получения зависимости коэффициента прохождения T от энергии частицы при численном моделировании. Эта проблема связана с появлением неопределенности значения энергии при любых ограничениях протяженности волнового пакета. Определенное значение энергии имеет только неограниченная в пространстве монохроматическая волна. Это обстоятельство не создает особых проблем при аналитическом решении задачи, но приводит к непреодолимым трудностям при численном моделировании.

Предлагается следующий подход к решению этой проблемы.

Любой волновой пакет представляет собой сумму монохроматических волн, и если нельзя смоделировать отдельные монохроматические волны, то можно выделить их из волнового пакета. Сделать это можно с помощью преобразования Фурье.

Как известно [6], преобразование Фурье

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-j\omega t} dt$$

позволяет получить частотный спектр $S(\omega)$ непериодического сигнала $f(t)$ в интервале частот $0 < \omega < \infty$.

Волновой пакет $\psi(x)$ в любой момент времени также можно рассматривать как некоторый сигнал, правда, изменяющийся не во времени, а в пространстве. Чтобы понять, что получится в результате Фурье-преобразования этого сигнала, достаточно сравнить два дифференциальных уравнения: уравнение гармонических колебаний

$$\frac{\partial^2 f(t)}{\partial t^2} + \omega^2 f(t) = 0$$

и стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + k^2 \psi(x) = 0.$$

Сравнение показывает, что «частотой» для волновой функции $\psi(x)$ является волновое число k . Таким образом, Фурье-преобразование ограниченного в пространстве волнового пакета позволяет получить распределение амплитуд монохроматических (значит, бесконечных) волновых функций, входящих в этот пакет

$$P(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-jkx} dx.$$

Значения волновых чисел этих функций лежат в интервале $0 < k < \infty$

При таком подходе полная зависимость T от k , а значит, и от E , может быть получена в ходе единственного модельного эксперимента!

На рис. 1 показан волновой пакет, первоначально имевший гауссову форму, на разных этапах его взаимодействия с прямоугольным потенциальным барьером. Хорошо видны характерные особенности, проявляющиеся в этом процессе: появление интерференционных максимумов перед барьером в результате наложения падающих и отраженных волн, возникновение резонансной стоячей волны внутри барьера, расщепление исходного волнового пакета (ψ_A) на два – отраженного от барьера (ψ_B) и проходящего сквозь него (ψ_C)

В ходе численного эксперимента на всех этапах контролировалось выполнение условия нормировки

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

Максимальное отклонение не превышало 10^{-5} .

Массивы значений ψ_A и ψ_C заносились в отдельные файлы, над которыми затем производилось численное преобразование Фурье (FT), позволяю-

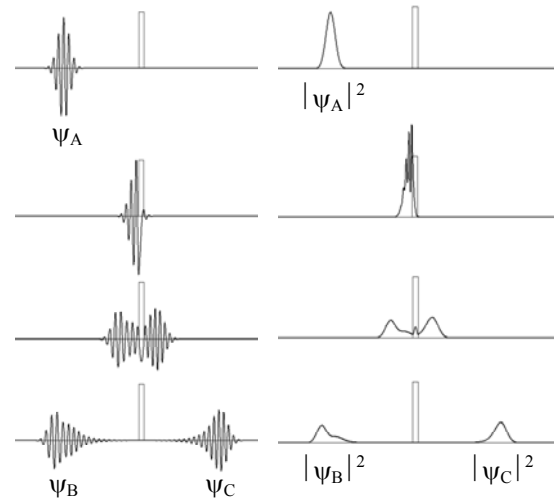


Рис. 1 - Эволюция волнового пакета при встрече с потенциальным барьером

щее получить спектры $P(k)$ исходного волнового пакета и его части, прошедшей сквозь барьер.

Зависимость коэффициента прохождения T от волнового числа определялась как квадрат результата деления соответствующих участков этих спектров. Описанная процедура условно может быть представлена в виде формулы

$$T(k) = \left(\frac{FT(\psi_c)}{FT(\psi_A)} \right)^2.$$

Результат типичного эксперимента для произвольного значения a представлен на рис. 2.

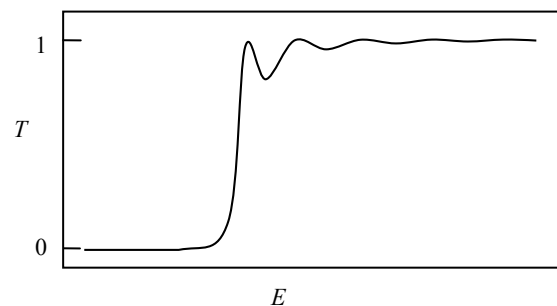


Рис. 2 - Зависимость коэффициента прохождения от энергии частицы, полученная в численном эксперименте

Для барьера прямоугольной формы известно аналитическое решение (см., например, [7]). Оно имеет следующий вид:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V^2 \sinh^2(ka)}{4E(V-E)}} \quad \text{при } E < V,$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V^2 \sin^2(ka)}{4E(E-V)}} \quad \text{при } E > V.$$

Наглядное представление о зависимости T от a и E можно получить, если построить соответствующие графики (рис. 3).

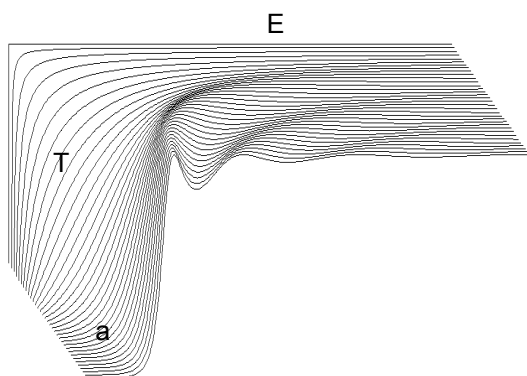


Рис. 3 - Зависимость коэффициента прохождения T от энергии частицы E для разных значений ширины потенциального барьера a

Сравнивая рис. 2 и рис. 3, можно сделать вывод о качественном соответствии результатов численного эксперимента и аналитического расчета. Количественное соответствие может быть установлено после сопоставления параметров использованной модели волновой функции (ω_0 и ω) и расчетных параметров (E , V и m). В задачу данной статьи это не входило.

Литература

1. А. И. Гусев, *Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии*. Физматлит, Москва, 2007, 416 с.
2. С. И. Вольфсон, Н. А. Охотина, А. И. Нигматуллина, *Вестник КГТУ*, 4, 2013, 144.
3. И. И. Чететкина, *Вестник КГТУ*, 1, 2013, 11.
4. A. Zhang, Z. Cao, Q. Shen, X. Dou, Y. Chen, *I. Phys. A: Math. Gen.* 33, 2000, 5449.
5. А. Н. Темников, *Вестник КГТУ*, 19, 2012, 13.
6. А.А. Харкевич, *Спектры и анализ*. Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, Москва, 1962. 236 с.
7. en.wikipedia.org/wiki/Rectangular_potential_barrier