

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 нахождение 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: , . Как известно, показатель преломления связан с фазовой скоростью света, . Фазовая скорость, в свою очередь, может быть выражена через волновое число, . Используя эти соотношения, формулы Френеля легко можно представить в следующем виде: , . 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 удивительно, 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]. Используемый здесь алгоритм расчета эволюции волновой функции был рассмотрен ранее [5]. Он основан на простой наглядной модели, описываемой дискретным аналогом уравнения Клейна-Гордона (1) и позволяет при заданных параметрах и рассчитать значения волновой функции $y(x)$ 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 позволяет

получить частотный спектр непериодического сигнала в интервале частот $0 \leq k \leq k_{\text{max}}$. Волновой пакет $y(x)$ 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 и стационарное уравнение Шредингера. Сравнение показывает, что «частотой» для волновой функции $y(x)$ 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. Значения волновых чисел этих функций лежат в интервале $0 \leq k \leq k_{\text{max}}$. 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 (y_A) на два – отраженного от барьера (y_B) и проходящего сквозь него (y_C). В ходе численного эксперимента на всех этапах контролировалось выполнение условия нормировки. Максимальное отклонение не превышало 10^{-5} . Массивы значений y_A и y_C заносились в отдельные файлы, над которыми затем производилось численное преобразование Фурье (FT), позволяющее 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. Результат типичного эксперимента для произвольного значения a представлен на рис. 2. Для барьера прямоугольной формы известно аналитическое решение (см., например, [7]). Оно имеет следующий вид: при $E < V$, при $E > V$. Наглядное представление о зависимости T от a и E можно получить, если построить соответствующие графики (рис. 3). 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 (w_0 и w) и расчетных параметров (E , V и m). В задачу данной статьи это не входило.