



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ГУМАНИТАРНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ЮУрГГПУ»)

ФАКУЛЬТЕТ ФИЗИКО - МАТЕМАТИЧЕСКИЙ  
КАФЕДРА ФИЗИКИ И МЕТОДИКИ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ  
Тема выпускной квалификационной работы Барьерные задачи в курсе квантовой  
механики педагогического вуза

Выпускная квалификационная работа по направлению  
44.03.05. Педагогическое образование  
код, направление

Направленность программы магистратуры  
«Физика. Английский язык»

Форма обучения очная

Проверка на объем заимствований:  
74 % авторского текста  
Работа рекомендована в защите  
рекомендована/не рекомендована  
« 14 » мая 2020 г.  
зав. кафедрой ФиМОФ  
Беспаль Ирина Ивановна

Выполнила:  
Студентка группы ОФ-513/085-5-1  
Томко Елена Владимировна  
Научный руководитель:  
кандидат физ.-мат. наук, доцент  
Свирская Людмила Моисеевна

Челябинск

2020 г.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	<b>4</b>
<b>ГЛАВА I. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ БАРЬЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В РАМКАХ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА</b>	<b>12</b>
1.1 Движение микрочастицы в поле потенциальной ступеньки	12
1.1.1 Надбарьерное рассеяние	12
1.1.2 Туннельный эффект	18
1.2 Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер	20
1.2.1 Прямоугольный потенциальный барьер	20
1.2.2 Потенциальный барьер произвольной формы	28
1.2.3 Некоторые приложения теории туннельного эффекта	33
1.3 Прямоугольная потенциальная яма между двумя бесконечными стенками	41
<b>ГЛАВА II. КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ В СРЕДЕ СО СКАЧКАМИ ПОТЕНЦИАЛА</b>	<b>49</b>
2.1 Туннельный эффект при инфинитном движении частицы в потенциале прямоугольной формы	49
2.2 Надбарьерное рассеяние	57
2.3 Отражение от потенциальной ямы	58
2.4 Движение частицы в поле прямоугольной потенциальной ступеньки	59
2.5 Распад связанного состояния	65
2.6 Прохождение электрона через туннельные резонансные структуры	68
	<b>73</b>
<b>ГЛАВА III. МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ БАРЬЕРНЫХ КВАНТОВО – МЕХАНИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ</b>	

## **КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

3.1 Методика организации исследования работы по изучению поведения микрочастицы в поле потенциальных барьеров	73
3.2 Итоги компьютерного эксперимента	80
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b>	89
<b>СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ</b>	90
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 1</b> Графическая иллюстрация результатов компьютерных экспериментов	94
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 2</b> Компетенции, формируемые при изучении барьерных эффектов	98
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 3</b> Чек-лист успешности усвоения знаний	99

## ВВЕДЕНИЕ

Квантовая механика, объектом изучения которой являются процессы, происходящие в микромире, является сегодня одной из наиболее общих физических теорий, составляющих основы различных областей знания. Основные представления и понятия квантовой механики (принципы соответствия, дополнительности, Паули, волновые функции и др.) стали фундаментом современного естествознания, поэтому учебный курс «Квантовая механика» играет важную роль в системе физического образования студентов педвуза [28].

Следует отметить, что в настоящее время, как показывает анализ школьных учебников, отдельные вопросы и понятия квантовой механики (корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга, стационарное уравнение Шредингера и др.) изучаются на старшей ступени школьного курса физики. Это обстоятельство определяет значимость данного курса для подготовки будущего учителя физики.

Поэтому в курс необходимо включать материал, который непосредственно пригодится будущему учителю физики в его профессиональной деятельности и который он сможет спроецировать на школьный курс физики. Таким образом, одной из важнейших методических и методологической задач, стоящих перед преподавателем данной дисциплины, становится - вооружить будущего учителя методикой обучения квантовой механике и методами решения задач по данному курсу.

Помимо этого, данный курс способствует формированию научного мировоззрения, научно-теоретического способа мышления, целостных представлений о современной физической картине мира.

Однако, несмотря на значимость курса, как для студентов, в общем, так и для будущих учителей, большинство вопросов, связанных с методикой преподавания квантовой механики, и сегодня остаются предметом дискуссий.

Это обусловлено, во-первых, тем, что в других разделах физики (классическая механика, оптика и др.) студенты изучают свойства реальных объектов, которые можно мысленно представить. Квантовая механика в этом аспекте невыгодно отличается отсутствием в макромире аналогий большинства квантово-механических понятий, что не позволяет преподавателям наглядно иллюстрировать учебный материал. Во-вторых, физические модели квантово-механических явлений, рассматриваемые в данном курсе, описываются сложным математическим аппаратом. Как следствие, студенты не могут в полной мере усвоить квантовую механику, что проявляется в недостаточно высоком уровне сформированности умений решать задачи, который, как показано в работах С.Е. Каменецкого, Н.Н. Тулькибаевой, А.В. Усовой [30] является одним из основных показателей уровня усвоения изучаемого курса.

Проведенный нами анализ различных учебно-методических пособий и рекомендаций по методике преподавания физики в школе и в вузе показал, что их авторы основное внимание уделяют совершенствованию методов и способов решения задач, но практически не обсуждают сам процесс отбора задач, особенно для высшей школы. Важность правильного отбора задач для достижения поставленных целей обучения и повышения уровня сформированности умения решать физические задачи отмечена в работах В.Е. Володарского, В.А. Кокина, Р.Г. Хазанкина. В них описано множество разных подходов к отбору задач, но не создано единой методологии, позволяющей поставить отбор задач на научную основу, и сформировать высокий уровень умения решать задачи, как у школьников, так и у студентов вузов.

Существующие в настоящее время критерии отбора физических задач (знания и умения студентов, трудность задач и др.) не могут автоматически применяться к процессу формирования системы задач по квантовой механике, так как большинство из них не учитывают особенности курса «Квантовая механика», а также профессиональную направленность будущих учителей.

С учетом сложности математического аппарата, невозможности наглядного представления теоретического материала и абстрактности квантово-механических явлений курса «Квантовая механика» в настоящее время требуется применение новых средств обучения, в том числе, в процессе решения задач, одними из которых являются информационные технологии. Необходимость их применения в процессе обучения физике показана в работах В.А. Извозчикова, А.С. Кондратьева, В.В. Лаптева, А.Д. Ревунова, О.Ю. Тяжельниковой [27, 28] и др..

В сети интернет имеется большое количество интерактивных моделирующих программ, предназначенных для лекционных демонстраций по курсу квантовой механики. Однако более эффективным методом усвоения квантовых законов может явиться организация исследовательской деятельности студентов в рамках лабораторного компьютерного эксперимента.

В преподавании физики, с нашей точки зрения, вопрос о применении компьютерного эксперимента имеет особую важность. Так как при решении большинства физических задач, особенно в курсах теоретической физики, приходится производить громоздкие математические преобразования, вызывающие затруднения у большинства студентов. В то же время, они не являются самоцелью в физике, поэтому использование компьютерного эксперимента здесь вполне оправданно.

Использование данных систем в обучении позволяет не только сократить трудоемкие математические преобразования и повысить наглядность изучаемого материала, но активизировать и разнообразить деятельность студентов, пробудить интерес к самостоятельной исследовательской деятельности, а также рассматривать учебные задачи на качественно новом уровне.

Численный эксперимент (или вычислительный эксперимент) в квантовой механике, имеющий много общего с лабораторным экспериментом, выступает как эффективный способ обучения физике квантовых явлений [4, 6, 7, 19, 25, 26, 32, 34, 35]. По образному выражению профессора Б.Н. Захарьева, который в течение ряда лет проводил в Объединённом Институте Ядерных Исследований (ОИЯИ, г. Дубна Московской области) летние школы «Секреты квантовой и математической интуиции», компьютерный эксперимент в квантовой механике является «педагогическим бальзамом для залечивания пробелов традиционного курса» [10].

Однако проведенный анализ методических подходов к применению компьютерного эксперимента в процессе обучения общей и теоретической физике в вузе показал, что они ориентированы на классические университеты и предусматривают только фрагментарное использование вычислительного эксперимента при изучении отдельных тем курса, а для педагогических вузов данные методики практически отсутствуют. В качестве положительного примера стремления внедрить в курс квантовой механики педвуза компьютерные технологии можно отметить использование системы символьных вычислений (пакет программ Maple) для решения избранных квантовых задач [27, 28]. Этот пакет, ориентированный на сложные математические вычисления, визуализацию данных и моделирование, требует освоения специфического языка программирования, что несколько уводит от

основной цели – сосредоточиться на физике изучаемого квантового эффекта и достичь его максимального понимания.

Следовательно, в настоящее время требуется разработка новых подходов к применению компьютерного эксперимента при решении задач по квантовой механике в педагогических вузах.

Вышесказанное определяет наличие следующих противоречий:

– между объективной необходимостью формирования умения решать задачи по квантовой механике у студентов педагогических вузов и недостаточной разработанностью в педагогических исследованиях методики обучения решению задач с учетом специфики курса;

– между необходимостью применения компьютерного эксперимента при решении барьерных задач по квантовой механике и отсутствием методики его применения в процессе обучения студентов педагогических вузов;

– между стремительным развитием компьютерных технологий, применяемых в мировой практике обучения курсу квантовой механики, и ограниченными возможностями односеместрового курса квантовой механики в педагогическом вузе.

Выявленные противоречия обуславливают актуальность исследования.

Актуальность темы исследования обусловлена следующими причинами:

1. «Барьерные» задачи затрагивают основополагающие квантовые явления, которые дают представления об особенностях поведения микрообъектов, существенно отличающихся от поведения классических частиц. Эти задачи имеют большую методическую ценность в связи с современными исследованиями в области микро- и наноэлектроники.

2. В квантовой механике отсутствует наглядность в интерпретации изучаемых эффектов. Эту трудность можно устранить путём использования компьютерного эксперимента.



3. Задачи о поведении микрочастиц в поле потенциальных барьеров и потенциальных ям носят исследовательский характер. Поэтому применение компьютерного эксперимента при изучении барьерных эффектов способствует формированию исследовательских умений будущего учителя, который в последующей профессиональной деятельности будет формировать их у своих учеников, что соответствует требованиям ФГОС [29] для бакалавриата.

4. В традиционном курсе квантовой механики рассматривается поведение микрочастиц в различных силовых полях на основе стационарного уравнения Шрёдингера, которое не даёт представления о динамике исследуемых явлений и их пространственно-временной картине. Поэтому возникает необходимость разработать методику изучения барьерных эффектов с помощью компьютерного эксперимента, основанного на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера.

5. В сети интернет имеется большое количество интерактивных моделирующих программ, предназначенных для лекционных демонстраций по курсу квантовой механики. Однако более эффективным методом усвоения квантовых законов может явиться организация исследовательской деятельности студентов в рамках лабораторного компьютерного эксперимента.

Цель исследования: разработка и реализация методики обучения решению барьерных задач по квантовой механике в педагогическом вузе.

Объектом исследования является квантово-механические явления в среде со скачками потенциала, требующие применения нестационарного уравнения Шрёдингера.

Предметом исследования является применение компьютерного эксперимента для изучения барьерных эффектов, основанного на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера.

Гипотеза исследования заключается в следующем: уровень понимания физики барьерных эффектов и сформированности умения решать задачи по квантовой механике у будущих учителей физики повысится, если:

- разработать систему задач по квантовой механике на основе использования компьютерного эксперимента;
- организовать проведение компьютерного эксперимента, опирающегося на численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера.

Для достижения поставленной цели исследования и проверки выдвинутой гипотезы необходимо решить следующие задачи:

1. Разработать, научно обосновать и реализовать методику обучения решению задач по квантовой механике студентов специальности «Физика с дополнительной специальностью» с использованием компьютерного эксперимента.
2. Разработать методические рекомендации и учебно-методические материалы для обучения решению барьерных задач по квантовой механике студентов педагогических вузов на основе предлагаемой методики.
3. Разработать критерии оценки и экспериментально оценить влияние разработанной методики на уровень сформированности умения объяснять барьерные эффекты в квантовой механике.

Материалы ВКР были представлены на V Всероссийской научно-методической конференции «Проблемы современного физического образования» (г. Уфа, 24-26 октября 2019 г.) [25], на VI Международной научно-практической конференции «Новации и традиции в преподавании физики: от школы до вуза» (г. Тула, 26 - 27 марта 2020 г.), а также в XVI межвузовском сборнике научных трудов «Актуальные проблемы развития среднего и высшего образования» под редакцией профессора О.Р. Шефер [26].

# ГЛАВА I. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ БАРЬЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В РАМКАХ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

## 1.1 Движение микрочастицы в поле потенциальной ступеньки

Рассмотрим поведение частицы на границе двух областей I и II, где потенциальная энергия меняется скачком:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ U_0 & \text{при } x \geq 0. \end{cases} \quad (1.1)$$

Представляют интерес два случая: а) полная энергия частицы превышает потенциальную энергию ( $E > U_0$ ) в области II (рис. 1.1) и б) полная энергия меньше потенциальной энергии ( $E < U_0$ ).

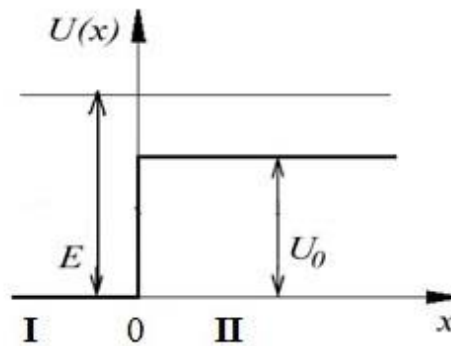


Рисунок 1.1 – Надбарьерное рассеяние

### 1.1.1 Надбарьерное рассеяние ( $E > U_0$ )

Если полная энергия частицы ( $E > U_0$ ), то в классической механике такая частица перейдет из области I в область II. В квантовой механике поведение частицы будет другое. Движение будет описываться плоской волной де Бройля. На границе этих областей происходит изменение потенциальной

энергии, так что эта волна ведет себя подобно световой волне на границе двух областей с различным показателем преломления. На границе областей I и II волна де Бройля частично отражается и частично проходит в область II. Т.е. существует определенная вероятность надбарьерного рассеяния и определенная вероятность прохождения в область II.

Уравнение Шрёдингера для двух областей имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1 = 0, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \psi_2 = 0, \quad (1.3)$$

Введём следующие обозначения

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (1.4)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad (1.5)$$

где  $k_1$  и  $k_2$  – волновые числа в области I и в области II. Уравнения (1.2) и (1.3) запишем следующим образом:

$$\psi_1'' + k_1^2 \psi_1 = 0, \quad (1.6)$$

$$\Psi_2'' + \kappa_2^2 \Psi_2 = 0. \quad (1.7)$$

Решениями этих уравнений являются функции

$$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (1.8)$$

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2 x}. \quad (1.9)$$

В области I, где частица является свободной ( $U=0$ ), волновая функция представляет собой суперпозицию двух волн – падающей волны  $e^{ik_1 x}$  (идущей слева направо) и отраженной волны  $e^{-ik_1 x}$ , а в области II распространяется только проходящая волна  $e^{ik_2 x}$ . Коэффициент  $A_1$  – это амплитуда падающей волны, поэтому его можно положить равным 1 (вероятность нахождения частицы в падающей волне  $|A_1|^2 = 1$ ). Коэффициент  $B_1$  – амплитуда отраженной волны,  $A_2$  – амплитуда волны, прошедшей во вторую область.

В случае волны де Бройля плотность тока вероятности определяется формулой [22]

$$\vec{j}_w = |\Psi|^2 \frac{\vec{p}}{m}.$$

Для падающих и прошедших волн будем иметь:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k_1}{m} j_{\text{отр}} = |B_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} j_{\text{прош}} = |A_2|^2 \frac{\hbar k_2}{m}. \quad (1.10)$$

Коэффициент отражения  $R$  найдем следующим образом:

$$R = \frac{j_{\text{отр}}}{j_{\text{пад}}} = |B_1|^2. \quad (1.11)$$

Коэффициент прозрачности  $D$  определим как отношение прошедшего и падающего потоков:

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = |A_2|^2 \frac{k_2}{k_1}. \quad (1.12)$$

Коэффициент  $R$  можно рассматривать, как вероятность частице испытать отражение на границе областей, а коэффициент  $D$  – как вероятность преодолеть потенциальный барьер в область II.

Для вычисления этих вероятностей воспользуемся граничными условиями. Наложим требование непрерывности волновых функций и их первых производных на границе областей I и II (в точке 0):

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0), \quad (1.13)$$

$$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0). \quad (1.14)$$

Тогда:

$$1 + B_1 = A_2,$$

$$ik_1(1 - B_1) = ik_2 A_2.$$

После деления обеих частей второго уравнения на  $ik_1$  получим систему двух уравнений с двумя неизвестными  $B_1$  и  $A_2$ :

$$1 + B_1 = A_2, \quad (1.15)$$

$$1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2. \quad (1.16)$$

Сложив (1.15) с (1.16), получим выражение для  $A_2$ :

$$A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (1.17)$$

Подставляя (1.17) в (1.15), находим  $B_1$ :

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (1.18)$$

Из уравнений (1.11) и (1.12) получим выражения для коэффициентов отражения  $R$  и прозрачности  $D$ :

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (1.19)$$

$$D = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (1.20)$$

Из (1.19) и (1.20) следует, что

$$R + D = 1. \quad (1.21)$$

Можно сделать вывод, что на границе областей частица либо отразится, либо пройдет дальше в область II.

Из выражений (1.4) и (1.5) для волновых чисел  $k_1$  и  $k_2$  получаем коэффициенты отражения и прозрачности в зависимости от соотношения между полной энергией  $E$  и потенциальной энергией  $U_0$ :

$$R = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2, \quad (1.22)$$

$$D = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{\left(1 + \sqrt{1 - U_0/E}\right)^2} . \quad (1.23)$$

Проанализируем поведение коэффициента отражения  $R$ .

1) Из (1.22) можно видеть, что при  $E > U_0$  коэффициент отражения  $R \neq 0$ . В отличие от классической механики частица испытывает отражение от потенциальной ступеньки.

2) Если  $E = U_0$ , коэффициент отражения  $R = 1$ .

3) При  $E \gg U_0$  формулу (1.22) можно преобразовать к следующему виду:

$$R = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}} \right)^2 \approx \frac{[1 - (1 - U_0/2E)]^2}{(1 + 1 - U_0/2E)^2} \approx (U_0/4E)^2$$

Из этой формулы можно сделать следующий вывод: чем больше энергия частицы, тем меньше коэффициент отражения; при  $E \rightarrow \infty$  коэффициент отражения  $R \rightarrow 0$  и частица перейдет во вторую область.

Рассмотрим поведение коэффициента прозрачности  $D$ , исходя из формулы (1.23).

1) Если  $E = U_0$ , коэффициент прозрачности  $D = 0$ , проникновение частицы в область II невозможно.

2) При  $E \gg U_0$  частица с вероятностью, равной единице, окажется в области II. Выполняется условие (1.21).



### 1.1.2 Туннельный эффект ( $E < U_0$ )

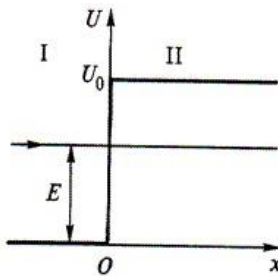
Этот случай иллюстрируется рисунком 1.2.

Рисунок 1.2 – Туннельный эффект

Уравнение Шрёдингера в областях I и II можно записать в виде (1.2) и (1.3), однако волновое число  $k_2$  при  $E < U_0$  становится мнимым:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik_0, \quad (1.24)$$

где вещественная часть



$$k_0 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (1.25)$$

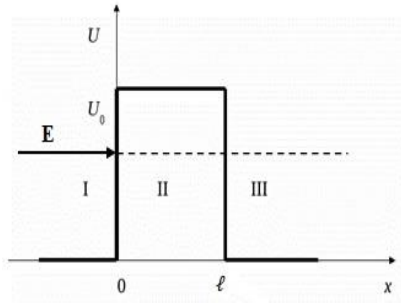
Подставляя волновое число (1.24) в формулу (1.9) для волновой функции  $\Psi_2$ , получаем

$$\Psi_2 = A_2 e^{ik_0 x} = A_2 e^{-k_0 x}. \quad (1.26)$$

Следовательно,  
частицы в области II

$$|\Psi_2|^2 = |A_2|^2 e^{-2k_0 x},$$

или



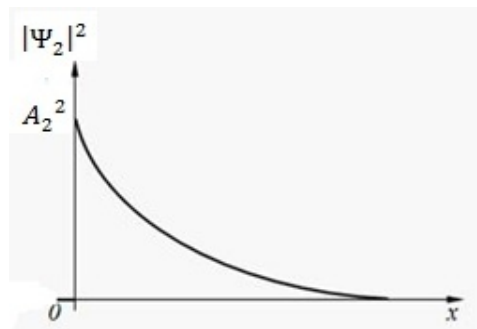
вероятность нахождения  
определяется выражением

$$|\Psi_2|^2 = A_2^2 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x} . \quad (1.27)$$

Из (1.27) видно, что имеется вполне определенная вероятность нахождения частицы в области действия потенциала  $U_0$ . Эта вероятность уменьшается по экспоненциальному закону (рис. 1.3).

Рисунок 1.3 – Вероятность нахождения частицы в области действия потенциала

Следовательно,  
может «просочиться» в  
запрещенную область, это  
возможность квантового  
эффекта, который рассматривается для случая потенциального барьера конечной  
ширины.



микрочастица  
классически  
означает  
туннельного

## 1.2 Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер

### 1.2.1 Прямоугольный потенциальный барьер

Потенциальным барьером называется область пространства, где потенциальная энергия больше, чем в окружающих областях пространства. На рис.1.4 представлено одномерное движение с потенциальным барьером прямоугольной формы.

Рисунок 1.4 – Прямоугольный потенциальный барьер

Потенциальная энергия определяется следующим образом:

$$U = \begin{cases} 0 & \text{при } -\infty < x < 0, \\ U_0 & \text{при } 0 \leq x \leq l, \\ 0 & \text{при } l < x < \infty. \end{cases} \quad (1.28)$$

В областях I и III частица является свободной ( $U=0$ ), в области II она движется в силовом поле ( $U=U_0=const$ ).

Согласно классической теории при  $E < U_0$  частица не сможет оказаться в области II. Она отражается от потенциального барьера, который будет являться абсолютным зеркалом. Действительно, полная механическая энергия частицы

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + U(x),$$

поэтому ее импульс

$$p_x = \pm\sqrt{2m[E - U(x)]} = \begin{cases} \pm 0 & \text{при } U_0, \\ \pm i\sqrt{2m(U_0 - E)} & \text{при } E < U_0 \end{cases} \quad (1.29)$$

Частица остановится в точке  $x=0$  и изменит направление своего движения на обратное. В области II ее импульс становится мнимым, что невозможно в классической механике. Таким образом, при  $E < U_0$  потенциальный барьер является абсолютным препятствием. Если же полная энергия частицы больше максимальной потенциальной энергии,  $E > U_0$ , то частица свободно проходит, потенциальный барьер полностью прозрачен.

В квантовой механике, в соответствии с её статистической интерпретацией, имеется некоторая вероятность того, что частица пройдет через барьер при  $E < U_0$  и частично отразится от барьера при  $E > U_0$ . Явление прохождения частицы через потенциальный барьер называется туннельным эффектом [22]. Для преодоления барьера частица не взбирается на его вершину, а проходит под барьером подобно движению через туннель. Преодолев потенциальный барьер, частица оказывается в области III с той же самой энергией, что и в области I.

Определим вероятность прохождения через барьер в случае  $E < U_0$ . Запишем уравнение Шрёдингера для каждой из трех областей:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_1 = 0, \quad x < 0, \quad U(x) = 0, \quad (1.30)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \Psi_2 = 0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad U(x) = U_0, \quad (1.31)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi_3 = 0, x > l, U(x) = 0, \quad (1.32)$$

Введем волновые числа:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \equiv k,$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}},$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \equiv k. \quad (1.33)$$

Тогда уравнение Шрёдингера для каждой из рассматриваемых областей примет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + k^2 \Psi_1 = 0,$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + k_2^2 \Psi_2 = 0,$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} + k^2 \Psi_3 = 0.$$

В первой и третьей областях волновые числа совпадают, а во второй области волновое число оказывается мнимым:

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{-\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} = ik_0 \quad (1.34)$$

Уравнение Шрёдингера и его решения для трех областей пространства представлены в таблице 1.

Уравнение Шрёдингера	Общее решение	Решение при $E < U_0$
$\Psi_1'' + k^2\Psi_1 = 0$	$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$	$\Psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$
$\Psi_2'' + k_2^2\Psi_2 = 0$	$\Psi_2 = A_2 e^{ik_2x} + B_1 e^{-ik_2x}$	$\Psi_2 = A_2 e^{-k_0x} + B_2 e^{k_0x}$
$\Psi_3'' + k^2\Psi_3 = 0$	$\Psi_3 = A_1 e^{ik_3x} + B_3 e^{-ik_3x}$	$\Psi_3 = A_3 e^{ikx}$

Таблица 1 – Уравнение Шрёдингера и его решения для трех областей пространства

Здесь

$A_1$ – амплитуда падающей волны,

$B_1$ – амплитуда волны, отраженной от первой стенки ( $x=0$ ),

$A_2$ – амплитуда волны, прошедшей в область II,

$B_2$ – амплитуда волны, отраженной от второй стенки барьера( $x=\ell$ ),

$A_3$ – амплитуда волны, прошедшей в область III.

Коэффициент прозрачности потенциального барьера можно определить как отношение прошедшего в область III и падающего потоков:

$$D = \frac{j_{\text{прош,III}}}{j_{\text{пад,I}}} = \frac{|A_3|^2 \hbar k / m}{|A_1|^2 \hbar k / m} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}. \quad (1.35)$$

Для определения амплитуд  $A_3$  и  $A_1$  необходимо воспользоваться условиями непрерывности волновой функции и ее производной на границах барьера, в точках  $x=0$  и  $x=l$ :

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \end{cases}, \quad (1.36)$$

$$\begin{cases} \Psi_2(l) = \Psi_3(l) \\ \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l) \end{cases}. \quad (1.37)$$

Получим следующие уравнения:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) = k_0(B_2 - A_2) \end{cases}, \quad (1.38)$$

$$\begin{cases} A_2 e^{-k_0 l} + B_2 e^{k_0 l} = A_3 e^{ikl} \\ (k_0 B_2 e^{k_0 l} - A_2 e^{-k_0 l}) = ik A_3 e^{ikl} \end{cases}. \quad (1.39)$$

Вначале определим коэффициенты  $A_2$  и  $B_2$  из системы (1.39). Для этого перепишем (1.39) в следующем виде:

$$\begin{cases} A_2 e^{-k_0 l} + B_2 e^{k_0 l} = A_3 e^{ikl} \\ -A_2 e^{-k_0 l} + B_2 e^{k_0 l} = \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ikl} \end{cases}.$$

Очевидно, что

$$A_2 = \frac{\Delta_x}{\Delta},$$

$$B_2 = \frac{\Delta_y}{\Delta},$$

где главный определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{-k_0 l} & e^{k_0 l} \\ e^{-k_0 l} & e^{k_0 l} \end{vmatrix} = 2.$$

Получаем:

$$A_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} A_3 e^{ikl} & e^{k_0 l} \\ \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ikl} & e^{k_0 l} \end{vmatrix} = \frac{1}{2} A_3 e^{ikl} e^{k_0 l} \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right), \quad (1.40)$$

$$B_2 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} e^{-k_0 l} & A_3 e^{ikl} \\ -e^{-k_0 l} & \frac{ik}{k_0} A_3 e^{ikl} \end{vmatrix} = \frac{1}{2} A_3 e^{ikl} e^{-k_0 l} \left(1 + \frac{ik}{k_0}\right). \quad (1.41)$$

Из (1.40) и (1.41) видно, что  $B_2 \ll A_2$ , поэтому в системе уравнений (1.38) коэффициентом  $B_2$  можно пренебречь. Таким образом, имеем

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ A_1 - B_1 = \frac{ik_0}{k} A_2 \end{cases}$$

Сложив эти уравнения, получаем формулу для амплитуды  $A_1$

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) A_2,$$

или, с учетом (1.40):

$$A_1 = \frac{1}{4} A_3 \left(1 - \frac{ik}{k_0}\right) \left(1 + \frac{ik_0}{k}\right) e^{k_0 l} e^{ikl}.$$



Отсюда следует, что

$$A_3 = \frac{4A_1}{\left(1 - \frac{ik}{k_0}\right)\left(1 + \frac{ik_0}{k}\right)} e^{-k_0 l} e^{-ikl}, \quad (1.42)$$

$$A_3^* = \frac{4A_1^*}{\left(1 + \frac{ik}{k_0}\right)\left(1 - \frac{ik_0}{k}\right)} e^{-k_0 l} e^{ikl}. \quad (1.43)$$

Перемножая (1.42) и (1.43), получаем плотность вероятности нахождения микрочастицы в области за потенциальным барьером

$$|A_3|^2 = \frac{16k^2 k_0^2 |A_1|^2}{(k^2 + k_0^2)^2} e^{-2k_0 l}. \quad (1.44)$$

Из (1.35) и (1.44) следует, что коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер имеет вид

$$D = \frac{16k^2 k_0^2}{(k^2 + k_0^2)^2} e^{-2k_0 l}. \quad (1.45)$$

Подставляя в эту формулу выражения для  $k$  и  $k_0$ , получаем следующую формулу для коэффициента прозрачности барьера прямоугольной формы

$$D = D_0 e^{-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}, \quad (1.46)$$

где

$$D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}. \quad (1.47)$$

Из формулы (1.46) следует:

1) туннельный эффект – это чисто квантовое явление, обусловленное волновыми свойствами микрообъектов. При  $\hbar \rightarrow 0$  коэффициент прозрачности  $D \rightarrow 0$ ;

2) проницаемость барьера зависит от его ширины  $l$ , от разности между высотой барьера и энергией частицы ( $U_0 - E$ ), а также от ее массы.

Вычислим значение экспоненциального фактора, например, для электрона в случае, когда  $U_0 - E \sim 10 \text{ эВ} \sim 10^{11} \text{ эрг}$ . Подставляя массу электрона  $m = 9.1 \cdot 10^{-28} \text{ г}$  и постоянную Планка  $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с}$ , получаем

$$\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}\right\} = \exp\{-10^8\}.$$

Теперь оценим коэффициент прозрачности для двух значений ширины барьера:

а)  $l = 1 \text{ см}$ ,  $D = D_0 \exp\{-10^8\} \rightarrow 0$ . Вероятность прохождения электрона через барьер толщиной 1 см чрезвычайно мала.

б)  $l = 1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$ ,  $D = D_0 \exp\{-1\} \approx 0,1$ . Для барьера шириной порядка атомных размеров коэффициент прозрачности отличен от нуля.

Обобщим формулу (1.46) на случай барьера произвольной формы (рисунок 1.5).

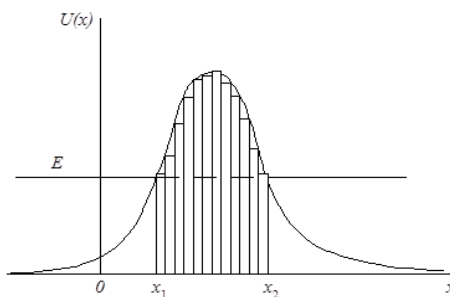


Рисунок 1.5 – Барьер произвольной формы

### 1.2.2 Потенциальный барьер произвольной формы

Барьер произвольной формы можно представить в виде последовательности потенциальных барьеров прямоугольной формы шириной  $dx$  и высотой  $U(x)$  (рисунок 1.6).

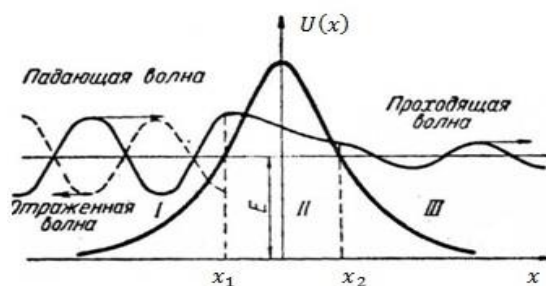


Рисунок 1.6 – Совокупность прямоугольных барьеров

Частица с энергией  $E$  вступает в барьер в точке  $x=x_1$  и выходит из барьера в точке  $x=x_2$ . Коэффициент прозрачности одного элементарного барьера

$$D_i = D_{0i} e^{-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m[U(x)-E]} dx} .$$

Коэффициент прозрачности для всего барьера определится как произведение коэффициентов прозрачности для элементарных прямоугольных барьеров. При этом показатели экспонент сложатся, тогда формула примет такой вид:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\} \quad (1.48)$$

Основы квантовой теории туннельного эффекта разработали в 1928 г. Л.И. Мандельштам и М.А. Леонтович.

С точки зрения классической механики частица не может находиться в области, где  $E < U_0$ , поскольку прохождение в эту область означало бы нарушение закона сохранения энергии. Такое заключение вытекает из классического представления о полной энергии как суммы кинетической и потенциальной энергии, которые могут быть определены одновременно точно. Однако в квантовой механике в силу соотношения неопределенностей Гейзенберга нельзя одновременно точно определить координату  $x$  и импульс  $p_x$ , следовательно, нельзя говорить об одновременных определенных значениях кинетической энергии (как функции импульса) и потенциальной энергии (как функции координат).

Обнаружить частицу внутри потенциального барьера означает измерить ее координату с точностью  $\Delta x = l$ . При этом импульс в соответствии с неравенством Гейзенберга получает неопределенность

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2l}. \quad (1.49)$$

Этой неопределенности импульса соответствует неопределенность энергии

$$\Delta E = \frac{(\Delta p)^2}{2m}. \quad (1.50)$$

Надо учесть, что туннельный эффект имеет заметную вероятность, тогда

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} l \sim 1.$$

Отсюда находим, что

$$l \sim \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (1.51)$$

Из (1.49) и (1.51) следует, что неопределенность импульса

$$\Delta p > \sqrt{2m(U_0 - E)}.$$

Поэтому

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} > U_0 - E. \quad (1.52)$$

Следовательно, изменение кинетической энергии частицы, вносимое вмешательством измерения ее координаты, оказывается больше той энергии, которой ей не достает до высоты барьера  $U_0$ .

Рассмотрим пример измерения координаты частицы, находящейся внутри потенциального барьера, с помощью пучка света.

Направим узкий пучок света в направлении, перпендикулярном к направлению движения частицы. Если пучок рассеется, значит, на его пути оказалась частица. Точность измерения должна удовлетворять требованию  $\Delta x \leq l$ . Так как нельзя создать пучок света, ширина которого была бы меньше длины световой волны ( $\Delta x > \lambda$ ), то  $\lambda < l$ , поэтому согласно (1.51)

$$\lambda < \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(U_0 - E)}}.$$

Так как  $\lambda = 2\pi c/\omega$ , где  $\omega$  – частота световых колебаний,  $c$  – скорость света, то

$$\hbar^2 \omega > 32\pi^2 mc^2 (U_0 - E).$$

В нерелятивистской механике энергия должна быть меньше собственной энергии частицы  $mc^2$ , поэтому

$$\hbar \omega > U_0 - E.$$

Таким образом, энергия световых квантов в пучке должна превосходить разность между высотой потенциального барьера и энергией частицы. Т.е. утверждение о местонахождении частицы внутри барьера имеет смысл, если ее можно осветить пучком с достаточно большой энергией, чтобы можно было локализовать частицу. Тогда никакого парадокса с энергией не возникает.

Последовательный квантово-механический анализ возможности обнаружения частицы внутри потенциального барьера с использованием электронного микроскопа в качестве измерительного прибора дан Леонтовичем и Мандельштамом [15]. На основе вычисления волновой

функции показано, что изображение частицы на пластинке можно получить, если энергия «освещающих» электронов достаточно велика и удовлетворяет условию  $E > U_0$ . При этом  $\Psi \neq 0$  внутри барьера.

Необходимо заметить, что явления, рассматриваемые в «барьерных» задачах, носят в принципе нестационарный характер и поэтому должны рассматриваться на основе нестационарной теории возмущений. Стационарная теория не дает реальной пространственно-временной картины движения частицы через потенциальный барьер и не позволяет ответить на такие вопросы, как длительность процесса туннелирования, или скорость прошедших и отраженных частиц. Такая задача не может быть решена аналитически, но допускает численное решение.

Неслучайно авторы фундаментального двухтомного курса квантовой механики [12] для иллюстрации движения частицы в поле прямоугольного потенциала в рамках стационарного уравнения Шрёдингера приводят динамическую картину поведения гауссова волнового пакета на скачке потенциала, являющуюся результатом решения нестационарного уравнения. При этом анализируются отдельные фазы этого процесса. Вначале даётся картина приближения пакета к скачку потенциала. Затем приводится форма пакета в тот момент, когда он начинает делиться на две части: интерференция падающих и отражённых волн приводит к осцилляциям волнового пакета в области перед барьером. Через некоторое время образуются два волновых пакета — отражённый и прошедший.

### 1.2.3 Некоторые приложения теории туннельного эффекта

#### а) Холодная эмиссия электронов из металла

Если к металлу приложить большое электрическое поле  $\sim 10^6$  В/см, то даже при низких температурах электроны начинают покидать металл. Явление

вырывания электронов с поверхности металла под действием внешнего электростатического поля получило название холодной или автоэлектронной эмиссии [22, 24].

Этот эффект не получает объяснения в рамках классической физики. Для вырывания электрона из металла необходимо сообщить ему энергию не меньшую, чем работа выхода. Однако постоянное электрическое поле в металл не проникает и поэтому не может изменить энергию электронов внутри металла. При низких температурах электроны в металле заполняют низшие энергетические уровни вплоть до максимального, называемого уровнем Ферми. Энергия электронов оказывается меньше высоты потенциального барьера и поэтому они не могут покинуть металл. Можно было бы предположить, что электрическое поле понижает высоту потенциального барьера, но в таком случае должен наблюдаться лавинообразный поток электронов через барьер и весьма большой ток эмиссии. На опыте же наблюдается постепенное нарастание тока с ростом поля.

С точки зрения квантовой механики холодная эмиссия есть проявление туннельного эффекта. При наличии электрического поля, приложенного к поверхности проводника, потенциальная энергия электрона имеет вид:

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x, \quad (1.53)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $\mathcal{E}$  – напряженность поля.





$$J = \int_0^{x_2} \sqrt{U_0 - e\epsilon x - E} dx = \sqrt{e\mathcal{E}} \int_0^{x_2} \sqrt{x_2 - x} dx = \frac{2}{3} \sqrt{e\mathcal{E}} x_2^{3/2}.$$

Таким образом, имеем следующее выражение для коэффициента прозрачности:

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{4\sqrt{2m}(U_0 - E)^{3/2}}{3\hbar e\epsilon} \right\} = D_0 e^{-\frac{\epsilon_0}{\epsilon}}, \quad (1.55)$$

где  $D_0$  и  $\epsilon_0$  - константы, зависящие от природы металла и энергии находящихся в нем свободных электронов. Ток холодной эмиссии пропорционален коэффициенту прозрачности, поэтому

$$j = j_0 D = j_0 e^{-\frac{\epsilon_0}{\epsilon}}. \quad (1.56)$$

Такая зависимость тока от поля хорошо подтверждается экспериментально.

б) Альфа-распад тяжелых ядер.

Опыт показывает, что многие тяжелые ядра самопроизвольно испускают  $\alpha$  - частицы (т.е. ядра гелия с зарядом  $+2e$  и массой, приблизительно равной четырем массам протона). График потенциальной энергии  $\alpha$  - частицы в зависимости от расстояния до центра ядра приведен на рисунке 1.8. На малых расстояниях, в пределах радиуса ядра ( $R \sim 10^{-13}$  см) действуют мощные ядерные силы притяжения. Внутри этой области  $\alpha$  - частица «заперта» в глубокой потенциальной яме. Вне ядра  $\alpha$  - частица находится под воздействием силы кулоновского отталкивания от положительно заряженного дочернего ядра (испустившего  $\alpha$  - частицу). В этой

области потенциальная энергия является положительной и возрастает обратно пропорционально расстоянию от ядра. Таким образом, вблизи границы ядра имеется кулоновский потенциальный барьер.

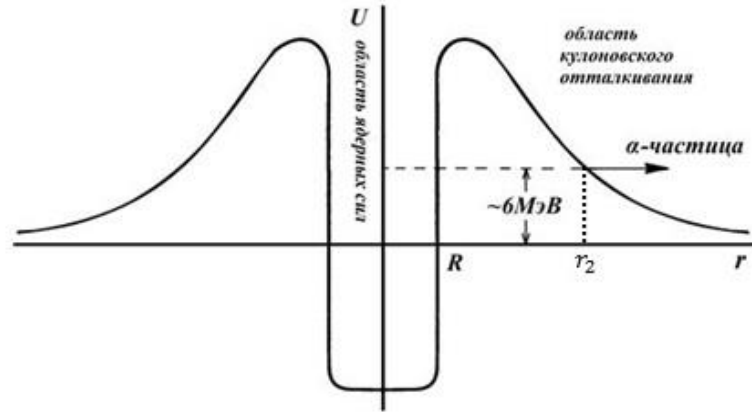


Рисунок 1.8 - Потенциальная энергия  $\alpha$  - частицы в поле атомного ядра

Потенциальная энергия  $\alpha$  - частицы определяется следующим выражением [22, 24]:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & \text{при } r < R, \\ \frac{2(Z-2)e^2}{r} & \text{при } r > R. \end{cases} \quad (1.57)$$

Экспериментально установлено, что энергия  $\alpha$  - частиц, вылетающих из ядра, меньше высоты потенциального барьера. Например, для ядра урана, потенциальный барьер имеет высоту порядка 30 МэВ, а энергия вылетающих  $\alpha$  - частиц не превышает 10 МэВ. Объяснение этого явления было дано на основе квантовой механики. Теория  $\alpha$  - распада была построена в 1928 г. Г. Гамовым, Э. Кондоном и Р. Герни. Они показали, что  $\alpha$  - распад представляет собой туннельный эффект.

Если  $\alpha$  - частица движется со скоростью  $v$  в пределах атомного ядра радиусом  $R$ , то она будет испытывать ежесекундно в среднем  $v/R$  столкновений со стенкой ядра, т.е. частота столкновений

$$v_{\text{ст}} = v/R. \quad (1.58)$$

Согласно неравенству Гейзенберга

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Полагая  $\Delta x \sim R$ ,  $\Delta p_x \sim mv$ , получаем, что

$$v \sim \frac{\hbar}{2mR},$$

$$v_{\text{ст}} = \frac{\hbar}{2mR^2}. \quad (1.59)$$

Постоянная радиоактивного распада связана с частотой столкновений и коэффициентом прозрачности барьера соотношением

$$\lambda = v_{\text{ст}} \cdot D, \quad (1.60)$$

где  $D$  – коэффициент прохождения через потенциальный барьер. Для его вычисления воспользуемся формулой, аналогичной (1.48):

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_R^{r_2} \sqrt{2m[U(r) - E]} dr \right\}. \quad (1.61)$$

Задача сводится к вычислению следующего интеграла:

$$J = \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E} dr. \quad (1.62)$$

Пределы интегрирования соответствуют классическим точкам поворота, в которых  $E=U$ . Первую точку поворота можно принять за радиус ядра. Во второй точке поворота  $r_2$

$$E = \frac{2(Z-2)e^2}{r_2}, \quad (1.63)$$

Поэтому  $2(Z-2)e^2 = Er_2$ . При этом интеграл (1.62) можно записать в виде

$$J = \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{Er_2}{r} - E} dr = \sqrt{E} \int_R^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr. \quad (1.64)$$

Для вычисления (1.64) произведем замену переменной:

$$\frac{r_2}{r} = \frac{1}{x^2},$$

тогда  $r = r_2 \cdot x^2$ ,  $dr = 2r_2 x dx$ . Соответственно появятся и новые пределы интегрирования:

$$x_1^2 = R/r_2 \approx 0,$$

$$x_2^2 = \frac{r_2}{r_2} = 1.$$

Тогда интеграл (1.63) будет иметь вид

$$J = 2r_2\sqrt{E} \int_0^1 \sqrt{\frac{1}{x^2} - 1} dx = 2r_2\sqrt{E} \int_0^1 \sqrt{1 - x^2} dx = 2r_2\sqrt{E} \pi/4.$$

Согласно (1.63)

$$r_2 = \frac{2(Z - 2)e^2}{E}.$$

Подставив это выражение в интеграл, получаем

$$J = \frac{(Z - 2)e^2\pi}{\sqrt{E}}.$$

Тогда коэффициент прозрачности потенциального барьера принимает вид

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{\pi(Z - 2)e^2}{\sqrt{E}} \right\}. \quad (1.65)$$

Из (1.65) и (1.60) следует, что

$$\lambda = \frac{\hbar}{2mR^2} D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \frac{\pi(Z - 2)e^2}{\sqrt{E}} \right\}.$$

Поэтому

$$\ln\lambda = \ln\left(\frac{\hbar D_0}{2mR^2}\right) - \frac{2}{\hbar}\sqrt{2m} \frac{\pi(Z-2)e^2}{\sqrt{E}}.$$

Последнее выражение можно переписать в следующем виде

$$\ln\lambda = A - \frac{B}{\sqrt{E}}. \quad (1.66)$$

Формула (1.66) совпадает с законом Гейгера-Нэттола, экспериментально установленным в 1911–1912 гг., что свидетельствует о правильности объяснения альфа-распада с помощью туннельного эффекта.

Туннельный эффект обеспечивает возможность слияния атомных ядер в процессе термоядерного синтеза [22]. Кулоновское отталкивание ядер изотопов водорода препятствует их сближению, создавая потенциальный барьер. Для его преодоления необходимы высокие температуры, при которых тепловая энергия ядер будет сравнима с энергией их кулоновского отталкивания

$$\frac{e^2}{r} \sim 3 kT.$$

Учитывая, что ядерные силы начинают проявлять себя уже на расстояниях  $r \sim 10^{-11}$  см, получим

$$T \sim \frac{e^2}{3kr} \sim \frac{(4,8 \cdot 10^{-10})^2}{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-16} \cdot 10^{-11}} \sim 10^8 \text{ K}.$$

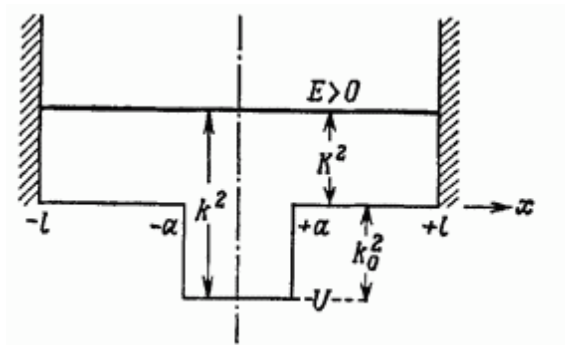
Однако температура в недрах Солнца составляет примерно на порядок ниже, и поэтому, казалось бы, термоядерный синтез невозможен. Но благодаря туннельному эффекту реакции слияния ядер могут происходить при более низких температурах. К этому механизму следует добавить ещё и возможность существования ядер со скоростями, значительно превышающими среднее значение в распределении Максвелла по скоростям. В результате благодаря этим механизмам звезды светят.

### 1.3 Прямоугольная потенциальная яма между двумя бесконечными стенками

Эта задача связана с решением уравнения Шредингера для потенциала, изображенного на рисунке 1.9 [31].

Рисунок 1.9 – Потенциальная яма, окружённая двумя бесконечными стенками

Следует рассмотреть решения положительных появлений связанных



отдельно для энергий ( $E > 0$ ) и состояний с



отрицательными энергиями ( $E < 0$ ). Возможны два типа решений: чётные и нечётные.

Чётные решения:

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos k a \operatorname{sh} \chi(l-x)}{\operatorname{sh} \chi(l-a)}, & a \leq x \leq l \end{cases}, \quad (1.67)$$

$$A_-^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{\cos^2 ka}{\chi} \left[ \operatorname{ctg} \chi(l-a) - \frac{\chi(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \chi(l-a)} \right].$$

Нечётные решения:

$$u_- = \begin{cases} A_+ \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\sin k a \operatorname{sh} \chi(l-x)}{\operatorname{sh} \chi(l-a)}, & a \leq x \leq l \end{cases}, \quad (1.68)$$

$$A_-^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{\sin^2 ka}{\chi} \left[ \operatorname{cth} \chi(l-a) - \frac{\chi(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \chi(l-a)} \right].$$

При этом волновые функции подчиняются стандартному условию нормировки (обозначение волновых функций сохранилось такое же, как в задачке Флюгге [31], где рассматривается эта задача)

$$\int_{-l}^{+l} |u|^2 dx = 1.$$

Здесь, как и в задаче о прямоугольном потенциальном барьере, необходимо наложить требования непрерывности волновых функций и их первых производных при  $x=a$ . Последнее требование даёт дополнительное условие:

для чётных состояний

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\chi}{k} \operatorname{cth} \chi(l-a), \quad (1.69)$$

для нечётных состояний

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{k}{\chi} \operatorname{th} \chi(l-a). \quad (1.70)$$

Оно позволяет вычислить собственные значения гамильтониана. Заметим, что при  $\chi(l-a) \gg 1$  обе гиперболические функции быстро стремятся к единице. При этом уравнения (1.69) и (1.70) переходят в уравнения для собственных значений в случае потенциальной ямы конечной глубины

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\chi}{k},$$

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{k}{\chi}.$$

В выражениях для самих волновых функций, когда  $|x| < l$ , но  $\chi(l-x) \gg 1$ , можно положить

$$\frac{\operatorname{sh} \chi(l-x)}{\operatorname{sh} \chi(l-a)} \approx e^{\chi(a-x)},$$

что приводит к волновым функциям частицы в яме с конечной глубиной.

Рассмотрим состояния с положительной энергией. При конечных значениях  $l$  имеются дискретные собственные значения, образующие по мере роста  $l$  все более плотную систему уровней, которая в предельном случае  $l \rightarrow \infty$  переходит в непрерывный набор значений (континуум). Введя вместо  $E > 0$  новую переменную

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad K^2 = -\chi^2 = k^2 - k_0^2, \quad (1.71)$$

можно переписать волновые функции в следующем виде:

для чётных состояний

$$u_+ = \left\{ \begin{array}{ll} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka}{\sin K(l-a)}, & a \leq x \leq l \end{array} \right\}, \quad (1.72)$$

$$A_+^2 = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] - \frac{\cos^2 ka}{\chi} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right];$$

для нечётных состояний

$$u_- = \left\{ \begin{array}{ll} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l \end{array} \right\}, \quad (1.73)$$

$$A_-^2 = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] - \frac{\sin^2 ka}{\chi} \left[ \operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right].$$

Требование непрерывности производной  $u'(x)$  снова дает условие:  
для чётных собственных функций

$$\operatorname{tg} ka = \frac{K}{k} \operatorname{ctg} K(l - a), \quad (1.74)$$

для нечётных собственных функций

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{K} \operatorname{tg} K(l - a). \quad (1.75)$$

Это позволяет вычислить собственные значения. Используя это условие, мы можем заменить  $\operatorname{ctg} K(l-a)$  во вторых скобках в нормировочных выражениях для  $1/A^2_{\pm}$ . В результате будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_+^2} = & \frac{1}{k} [ka + \operatorname{sinkacoska}] + (l - a) \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right) \\ & - \frac{k}{K^2} \operatorname{sinkacoska}, \end{aligned} \quad (1.76)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A_-^2} = & \frac{1}{k} [ka - \operatorname{sinkacoska}] + (l - a) \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right) \\ & + \frac{k}{K^2} \operatorname{sinkacoska}. \end{aligned} \quad (1.77)$$

При  $l \rightarrow \infty$ , второй член в этих выражениях неограниченно возрастает, поэтому (1.76) и (1.77) принимают вид

$$\frac{1}{A_+^2} \approx l \left( \cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right),$$

$$\frac{1}{A_-^2} \approx l \left( \sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right). \quad (1.78)$$

Амплитуды вне ямы определяются непосредственно из (1.76) и (1.77)

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2 \cos^2 ka} \rightarrow l,$$

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2 \sin^2 ka} \rightarrow l,$$

так что при  $x > a$  обе волновые функции принимают следующий вид

$$u_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{l}} \sin K(l-x). \quad (1.80)$$

Из (1.80) видно, что величина  $l$  входит в фазу волновой функции, но ее можно исключить, воспользовавшись снова уравнениями, определяющими собственные значения:

чѐтные состояния

$$Kl = \arctg \left( \frac{\frac{K}{k} + \operatorname{tg}ka \operatorname{tg}Ka}{\operatorname{tg}ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg}Ka} \right), \quad (1.81)$$

нечѐтные состояния

$$Kl = \arctg \left( \frac{\operatorname{tg}_-a - \frac{K}{k} \operatorname{tg}ka}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg}ka \operatorname{tg}Ka} \right). \quad (1.82)$$

На основе уравнений (1.74) и (1.75) можно определить плотность энергетических уровней для случая очень больших, но конечных значений  $l$ . Правые части этих уравнений принимают значения от  $\infty$  до  $+\infty$ , в то время как переменная  $Kl$  пробегает интервал шириной  $\pi$ . В каждом таком интервале имеется только одно решение этих уравнений. В результате получаются чередующиеся четные и нечетные уровни, расположенные в среднем на расстоянии  $\Delta K = \pi/(2l)$  (в шкале переменной  $K$ ) друг от друга. При этом расстояние между уровнями равно

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} K \frac{\pi}{2l} = \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} E}. \quad (1.83)$$

Таким образом, среднее расстояние между последовательными уровнями растет как  $\sqrt{E}$  и обратно пропорционально длине нормировочного интервала. В пределе  $l \rightarrow \infty$  дискретный энергетический спектр переходит в непрерывный.

Поведение амплитуды при переходе к непрерывному спектру для случая  $k_0 a = 2$  показано на рисунке 1.10. Безразмерная величина  $A^2 l$  представляет собой меру квадрата амплитуды внутри ямы, когда нормировка на всем протяжении вне ямы остается одной и той же, а величина  $l$  велика. График показывает зависимость этой величины от  $(Ka)^2$ , т.е. в зависимости от энергии в безразмерных единицах.

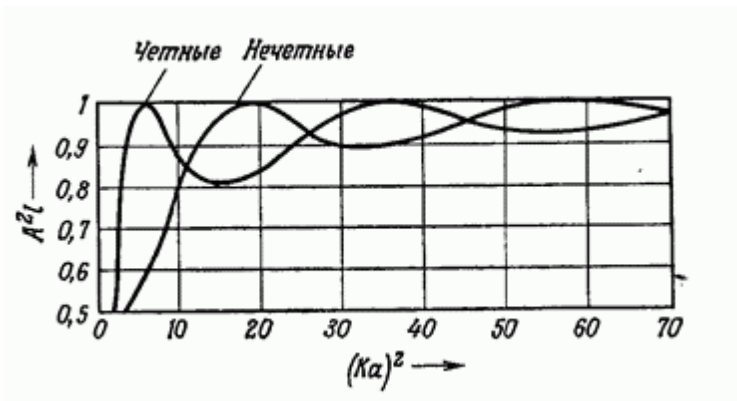


Рисунок 1.10 – Виртуальные состояния в непрерывном спектре

Имеется бесконечное число последовательных значений энергии, для которых величина  $A^2l$  принимает максимальное значение, равное единице. Между максимумами лежат минимумы амплитуды, выраженные тем слабее, чем выше энергия. При энергиях, соответствующих максимумам амплитуды, рассматриваемые состояния с положительной энергией все еще сохраняют некоторые черты связанных состояний, поскольку в этих состояниях достигается максимально возможная концентрация волновой функции в области, занятой ямой. По этой причине их называют виртуальными состояниями в противоположность "истинным" связанным состояниям с отрицательной энергией [31].

Существует большое количество задач с разнообразными потенциальными барьерами и комбинациями барьеров и ям. В данной главе мы ограничились обсуждением теоретических вопросов, которые необходимы для рассмотрения компьютерных моделей во второй главе.

## ГЛАВА II. КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОГО ДВИЖЕНИЯ В СРЕДЕ СО СКАЧКАМИ ПОТЕНЦИАЛА

### 2.1 Туннельный эффект при инфинитном движении частицы в потенциале прямоугольной формы

При движении микрочастицы в поле потенциального барьера основной задачей является определение вероятностей прохождения  $D$  через потенциальный барьер и отражения  $R$  от него. С точки зрения классической механики картина будет следующей: если высота потенциального барьера  $U_0$  больше энергии частицы, то частица отразится от потенциального барьера ( $R=1, D=0$ ); если же энергия частицы превосходит высоту потенциального барьера, то частица с вероятностью  $D=1$  пройдет через препятствие ( $R=0$ ). В квантовой механике ситуация совершенно другая: с некоторой вероятностью частица может пройти через область действия потенциала и с некоторой вероятностью – отразиться от него. При этом выполняется условие:

$$D + R = 1. \quad (2.1)$$

В рамках стационарного уравнения Шрёдингера данная задача подробно рассмотрена в главе I. Здесь мы обсудим основные результаты стационарного подхода и акцентируем внимание на необходимость использования нестационарного уравнения Шрёдингера.

Зададим потенциал в следующем виде:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq \frac{a}{2}, \\ U_0, & |x| < \frac{a}{2}. \end{cases}$$



При этом случай  $U_0 < 0$  будет соответствовать потенциальной яме,  $U_0 > 0$  – потенциальному барьеру. В зависимости от соотношения между энергией частицы и потенциалом будут иметь место следующие эффекты: при  $E > U_0$  – надбарьерное движение частицы, а при  $E < U_0$  – квантовое туннелирование через потенциальный барьер.

Решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.2)$$

проводится для трёх областей пространства

$$x \leq -\frac{a}{2}, \quad |x| < \frac{a}{2}, \quad x \geq \frac{a}{2}.$$

В первой и третьей областях они имеют одинаковый вид

$$\psi_1 = A_1 e^{-ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad (2.3)$$

$$\psi_2 = A_2 e^{-ikx} + B_2 e^{-ikx}. \quad (2.4)$$

Во второй ( $|x| < \frac{a}{2}$ ) области решение имеет вид:

$$\psi_2 = \left\{ \begin{array}{l} A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}, \text{ при } k^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} > 0 \\ A_2 e^{-kx} + B_2 e^{kx}, \text{ при } k^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} > 0 \end{array} \right\}. \quad (2.5)$$

Используя условие непрерывности волновых функций и их первых производных на границах указанных областей, можно получить выражение для коэффициента прохождения микрочастицы через область действия потенциала [6]:

$$D = \left( 1 + \frac{1}{4} * \left( \frac{k^2 - k'^2}{kk'} \right) * sh^2 ka \right)^{-1}, \quad E < U_0 \quad (2.6)$$

$$D = \left( 1 + \frac{1}{4} * \left( \frac{k^2 - k'^2}{kk'} \right) * sin^2 k'a \right)^{-1}, \quad E > U_0; \quad (2.7)$$

Выражение (2.6) описывает вероятность туннелирования, а (2.7) - надбарьерное рассеяние.

Рассмотрим случай, когда  $E > U_0$ . В классической механике поток частиц, падающих на потенциальный барьер, должен полностью отразиться, т.е.  $D=0$ . А в квантовой теории такой результат можно получить только при условии  $ka \rightarrow \infty$ , т.е. при достаточно большой высоте потенциального барьера. Из (2.6) получим:

$$D = 16 \frac{k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)} * e^{-2ka}. \quad (2.8)$$

Это выражение представляет собой частный случай общей формулы для коэффициента прозрачности барьера произвольной формы  $U(x)$ :

$$D = D_0 \exp \left\{ -\frac{2}{h} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right\}. \quad (2.9)$$

Пределами интегрирования  $x_1$  и  $x_2$  являются точки поворота, т.е. точки, разделяющие область классически разрешенного и классически запрещенного движений:  $U(x_{1,2}) = E$ , где  $E$  – энергия частицы.

В случае, когда  $E < U_0$ , согласно классической механике  $D=1$ . А в квантовой механике этот результат можно получить только при определённых энергиях, удовлетворяющих условию

$$k'a = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (2.10)$$

При  $E \gg U_0$  наблюдается стремление к классическому пределу:  $D \rightarrow 1$ . Зависимость коэффициента прозрачности потенциального барьера от энергии частицы показана на рисунке 2.1.

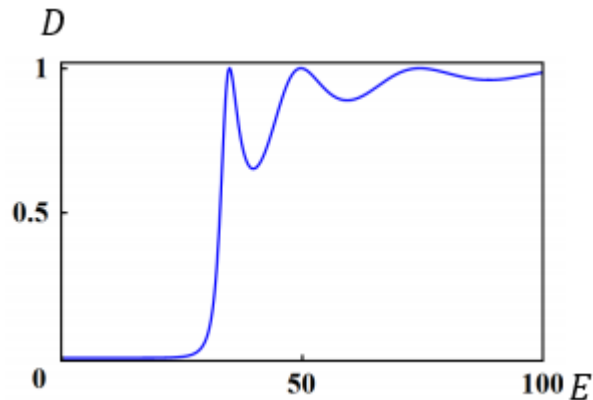


Рисунок 2.1– Зависимость  $D$  от энергии  $E$ .

Однако стационарная теория не даёт пространственно-временной картины движения частицы через потенциальный барьер. Поэтому необходимо рассмотреть эту задачу на основе нестационарного уравнения Шредингера. Это позволит получить ответы на ряд принципиальных вопросов. Например, какова длительность процесса туннелирования, или каковы скорости прошедших и отраженных частиц.

Такая задача не имеет аналитического решения и требует численного моделирования [6]. Начальное состояние частицы задается пакетом гауссовой формы с полушириной  $\Delta x$ , движущимся по направлению области действия потенциала со средней скоростью  $v = \hbar k/m$ :

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\Delta x}\right)^2\right\} e^{ik_0 x} . \quad (2.11)$$

Представление о временной картине туннелирования такого пакета через потенциальный барьер прямоугольной высоты  $U_0$  и ширины  $a$  даёт рисунок 2.2.

Из рисунка видно, что пакет по мере приближения к области действия потенциала постепенно расплывается, но сохраняет свою форму. При попадании пакета в область действия потенциала его форма нарушается в результате формирования отраженного волнового пакета и его интерференции с падающим на препятствие пакетом. Через некоторое время формируется два пакета: отраженный и прошедший через препятствие.

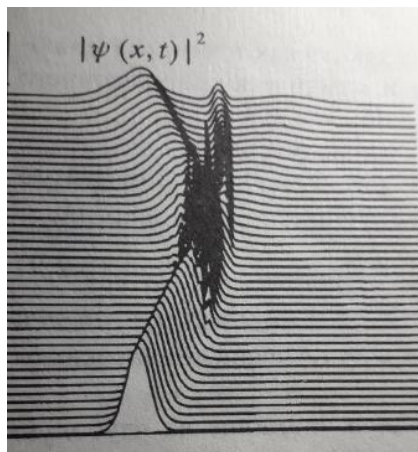


Рисунок 2.2 –Туннелирование волнового пакета гауссовой формы через прямоугольный потенциальный барьер

Для наблюдения движения микрочастицы через потенциальный барьер используются компьютерные модели, входящие в пакет программ NSSE (Non Stationary Shroedinger Equation) [6].

Рассмотрим, какие исследования представляют интерес в рамках данной задачи ( $E < U_0$ ). Детальное изучение движения пакета через потенциальный барьер целесообразно осуществить, варьируя параметры потенциала и волнового пакета (высота и толщина барьера, энергия частицы, начальная ширина пакета).

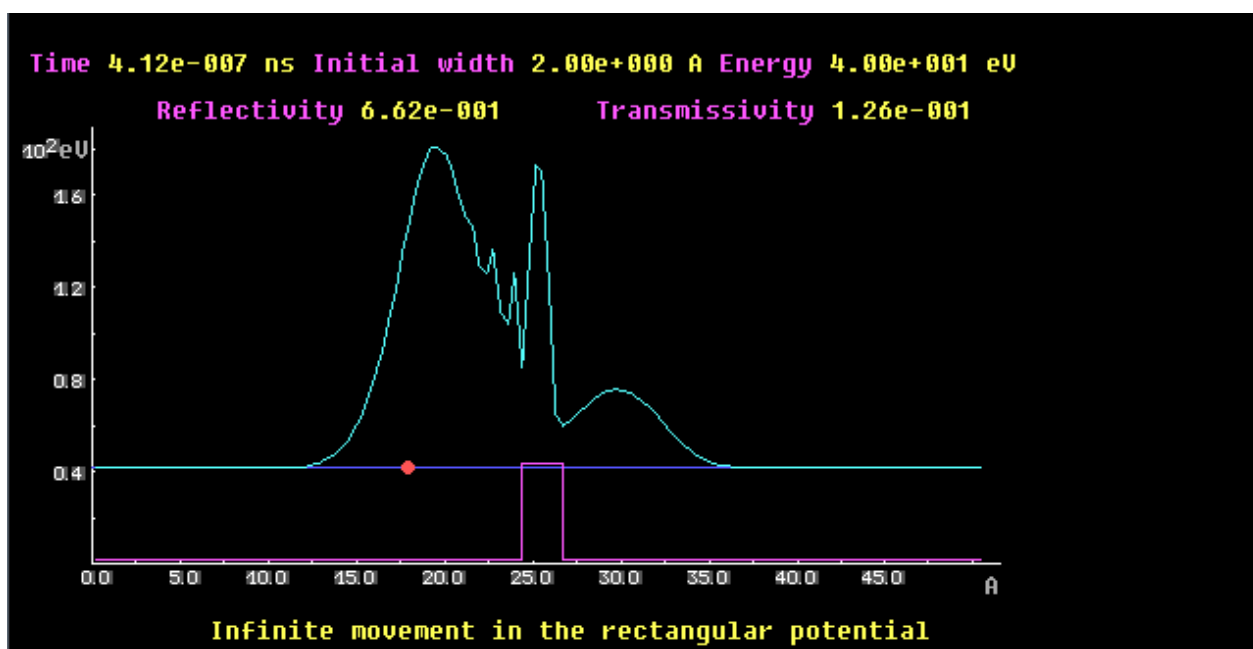


Рисунок 2.3 – Квантовое туннелирование через потенциальный барьер

На рисунке 2.3 показана картина движения частицы с полной энергией  $E = 40 \text{ eV}$ , которая несколько ниже потенциальной энергии  $U = 42 \text{ eV}$ . При этом начальная ширина волнового пакета соизмерима с толщиной потенциального барьера ( $a = 2$ ). Для сравнения показано положение классической частицы, которая при выбранных параметрах отражается от барьера, как от зеркала, и начинает двигаться в сторону, противоположную направлению распространения волнового пакета. Наряду с потоком,

прошедшим в область за барьером, наблюдается достаточно большой отражённый поток слева от барьера.

Вероятность прохождения через потенциальный барьер существенно зависит от толщины барьера Рисунок 2.4 иллюстрирует случай достаточно узкого потенциального барьера (толщина барьера  $a = 0.1\text{\AA}$ , энергия частицы  $E = 60\text{ eV}$ , высота барьера  $U = 70\text{ eV}$ ). Несмотря на малую ширину барьера формируется весьма значительный отражённый поток. При этом «частокол» максимумов и минимумов свидетельствует об интерференционном характере процесса наложения падающих и отражённых волн.

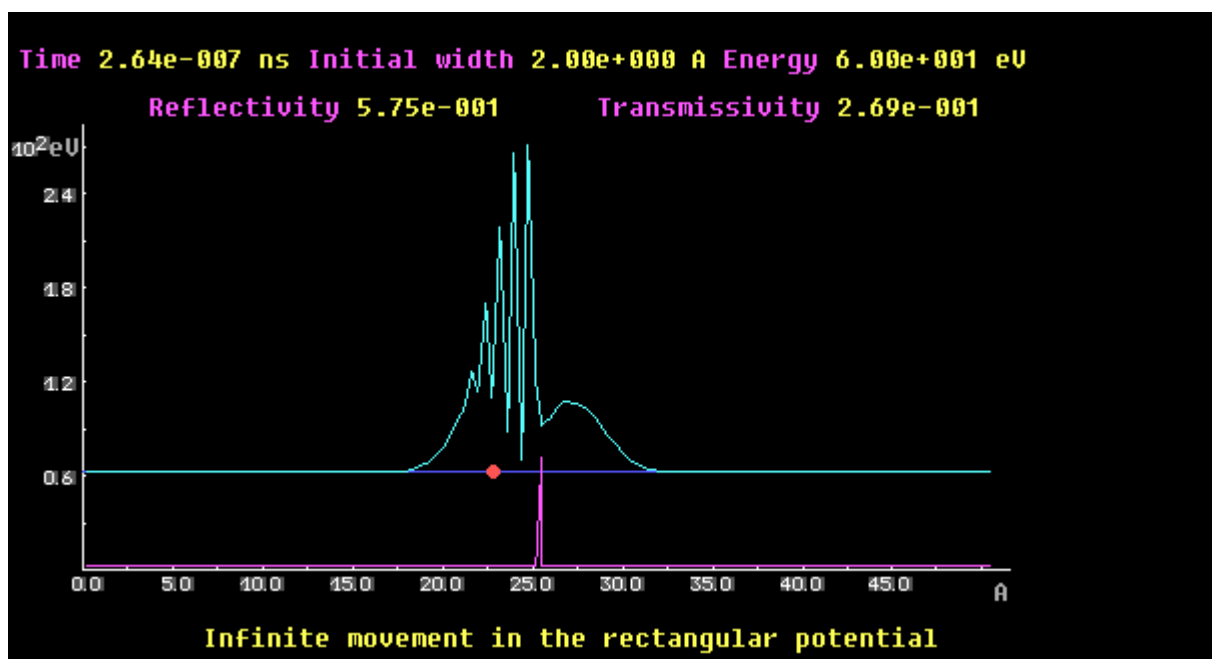


Рисунок 2.4 – Прохождение частицы через достаточно узкий потенциальный барьер

Типичная картина, отражающая динамику туннелирования частицы, представлена на рисунке 2.5.

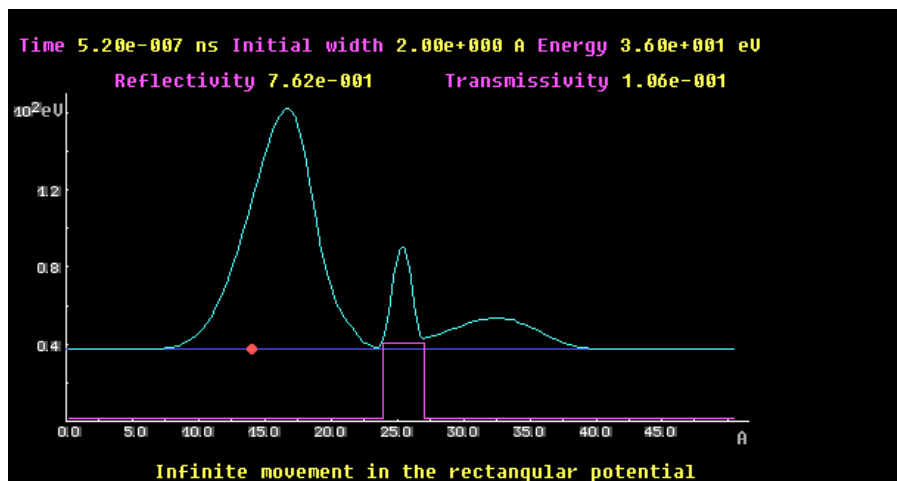
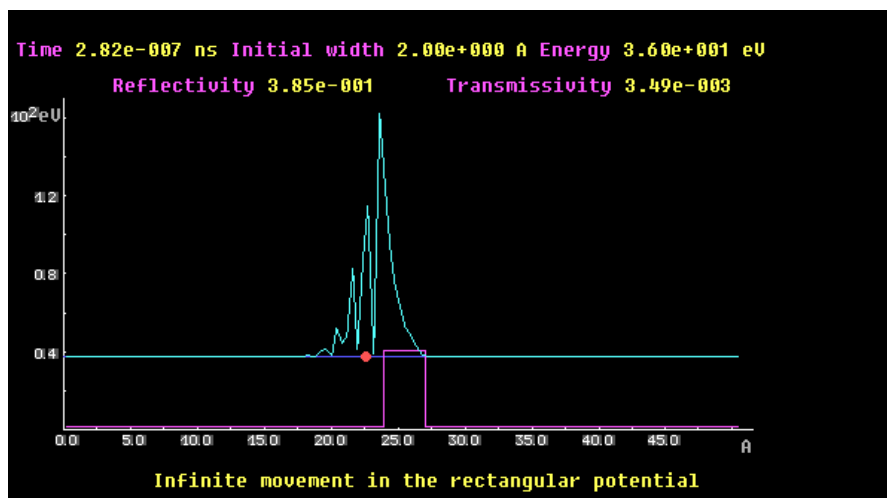
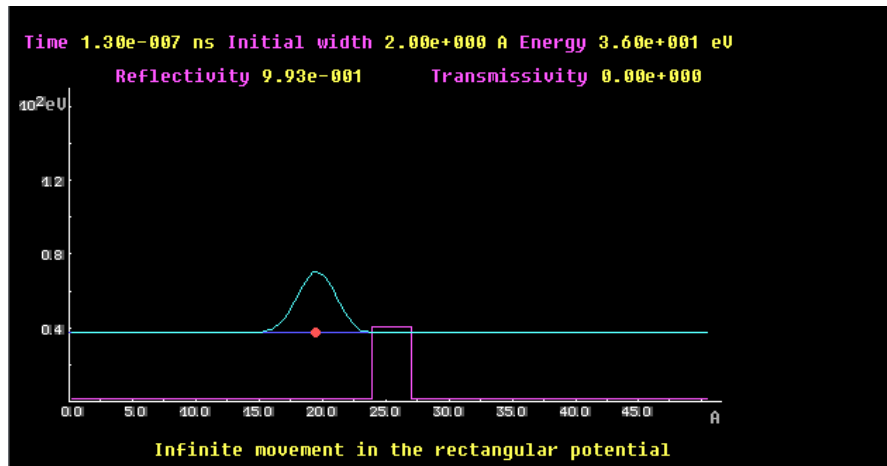


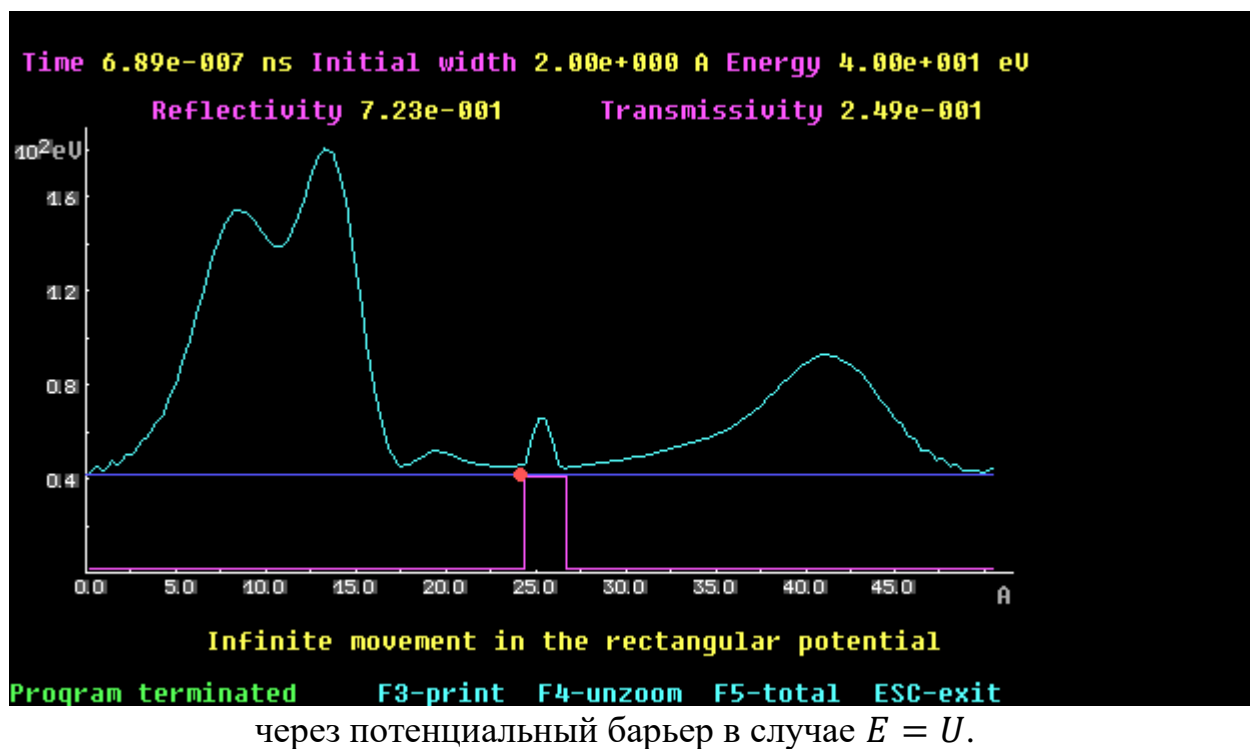
Рисунок 2.5 – Динамика туннелирования микрочастицы

При этом с некоторой вероятностью происходит «застывание» частицы в области действия потенциала, что приводит к формированию сразу

нескольких пакетов, как отраженных от препятствия, так и прошедших через него. При этом положение классической частицы может не совпадать ни с одним из прошедших пакетов.

Особый интерес представляет случай совпадения энергии частицы с высотой потенциального барьера (рисунок 2.6). В этом случае классическая частица останавливается, достигнув барьера, а волновой пакет с конечной вероятностью просачивается через потенциальный барьер.

Рисунок 2.6 – Движение волнового пакета и классической частицы



## 2.2. Надбарьерное рассеяние

Надбарьерное рассеяние соответствует случаю  $E > U_0$ . Типичная картина такого процесса, представленная на рисунке 2.7, является удивительной с точки зрения классических представлений. Несмотря на то, что энергия



частицы значительно выше её потенциальной энергии, результирующий пакет формируется из двух пакетов: прошедшего и отраженного от барьера.

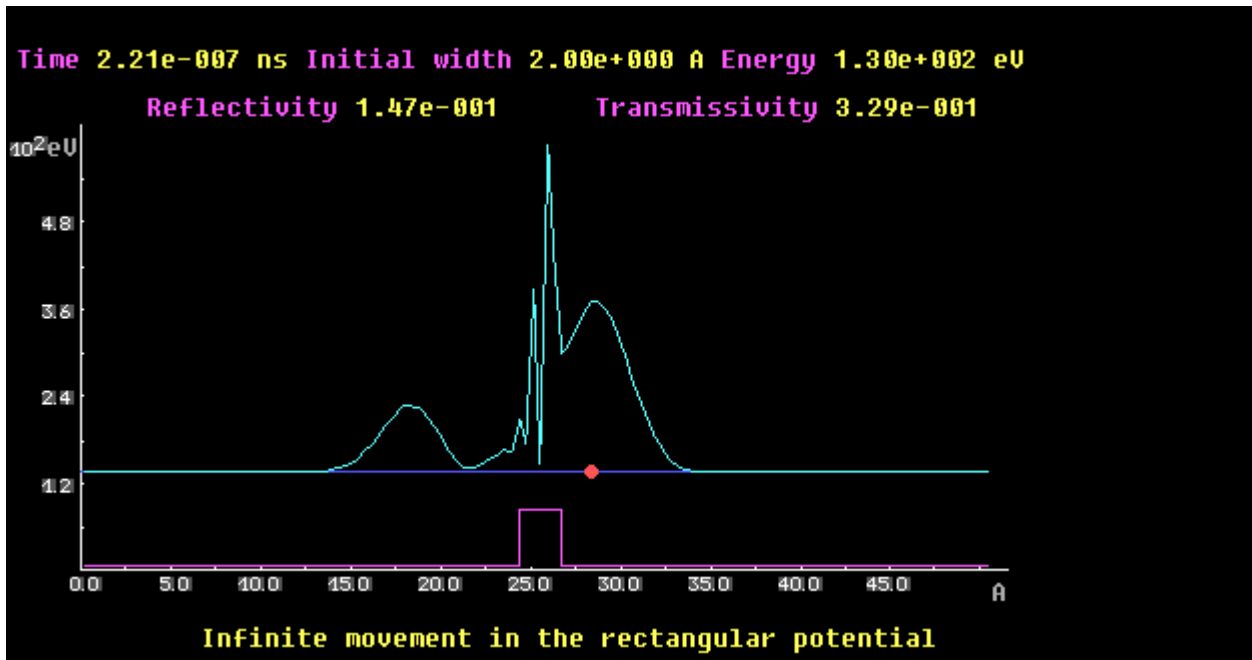


Рисунок 2.7 – Надбарьерное рассеяние (случай  $E > U_0$ )

### 2.3 Отражение от потенциальной ямы

Движение в поле потенциальной ямы соответствует случаю  $U_0 < 0$ . Это исследование проводится при изменении знака потенциала по сравнению со случаем 1. Можно убедиться, что знак потенциала не влияет на результат туннелирования микрочастицы. По-прежнему коэффициент прозрачности оказывается меньше 1 (рисунок 2.8).

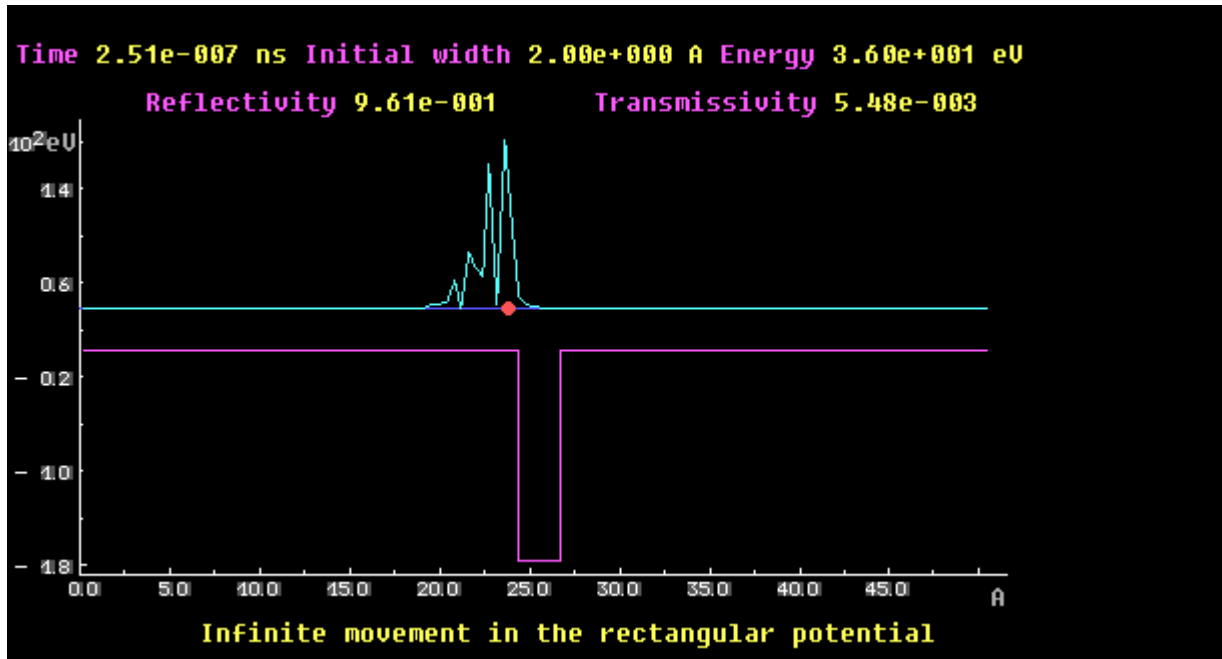


Рисунок 2.8 – Отражение от прямоугольной потенциальной ямы

В процессе изучения этого явления можно наблюдать квантовый аналог эффекта Рамзауэра – возникновение минимумов вероятности отражения частицы от потенциальной ямы при определённых энергиях частицы. При некоторых энергиях на размере области действия потенциала может укладываться целое число длин полувольт де Бройля. В этом случае частица ведёт себя так, словно «не замечает» влияния потенциала.

#### 2.4 Движение частицы в поле прямоугольной потенциальной ступеньки

Определим потенциал следующим образом:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ U_0, & x \geq 0. \end{cases} \quad (2.12)$$

С точки зрения классической механики при  $E > U_0$  частица пройдёт

через ступеньку в область  $x > 0$ , а при  $E < U_0$  – отразится от ступеньки. С точки зрения квантовой механики картина оказывается не столь однозначной.

Задача о движении частицы в поле потенциальной ступеньки (2.12) в рамках стационарного уравнения Шрёдингера подробно рассмотрена в главе I. Здесь следует различать два случая.

1) Высота потенциальной стенки выше энергии частицы ( $U_0 > E$ ). В этом случае решениями уравнения (2.2) будут являться волновые функции

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2 &= A_2 e^{-k_0 x} + B_2 e^{k_0 x},\end{aligned}\tag{2.13}$$

где

$$k_1^2 = 2mE/\hbar^2, k_0^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2.$$

Функция  $\psi_1(x)$  из (2.13) описывает суперпозицию двух потоков частиц слева от барьера: падающий на барьер и отраженный от него. Коэффициент отражения от барьера определяется следующим образом:

$$R = \frac{J_{\text{отр}}}{J_{\text{пад}}} = \frac{|B_1|}{|A_1|}.\tag{2.14}$$

Принципиальное отличие квантового рассмотрения от классического заключается в том, что в квантовой механике имеется отличная от нуля вероятность обнаружения частицы во второй области. Она определяется выражением

$$W_2 = \int_0^\infty |\psi_2|^2 dx = \frac{2k_0^2}{(k_1^2 + k_0^2)k_0} |A_1|^2. \quad (2.15)$$

Чем меньше величина  $(U_0 - E)$ , тем больше эта вероятность. И в пределе  $E \rightarrow U_0$  вероятность (2.15) неограниченно возрастает.

2) Высота потенциальной стенки ниже энергии частицы ( $U_0 < E$ ).

Решения уравнения Шрёдингера для каждой из двух областей имеют вид:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x},$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 x}, \quad (2.16)$$

где волновые числа в каждой из двух областей

$$k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2},$$

$$k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}.$$

Коэффициенты отражения и прохождения частицы через потенциальную ступеньку имеют вид:

$$R = \frac{J_{\text{отр}}}{J_{\text{пад}}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2,$$

$$D = \frac{J_{\text{пр}}}{J_{\text{пад}}} = \frac{k_2}{k_1} \cdot \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (2.14)$$

При этом выполняется условие:  $D + R = 1$ .

Данный результат существенно отличается от предсказаний классической физики, в рамках которой частица с вероятностью равной 1 окажется в области за ступенькой. Однако при условии  $E \gg U_0$  должен наблюдаться предельный переход к классической картине (рисунке 2.9).

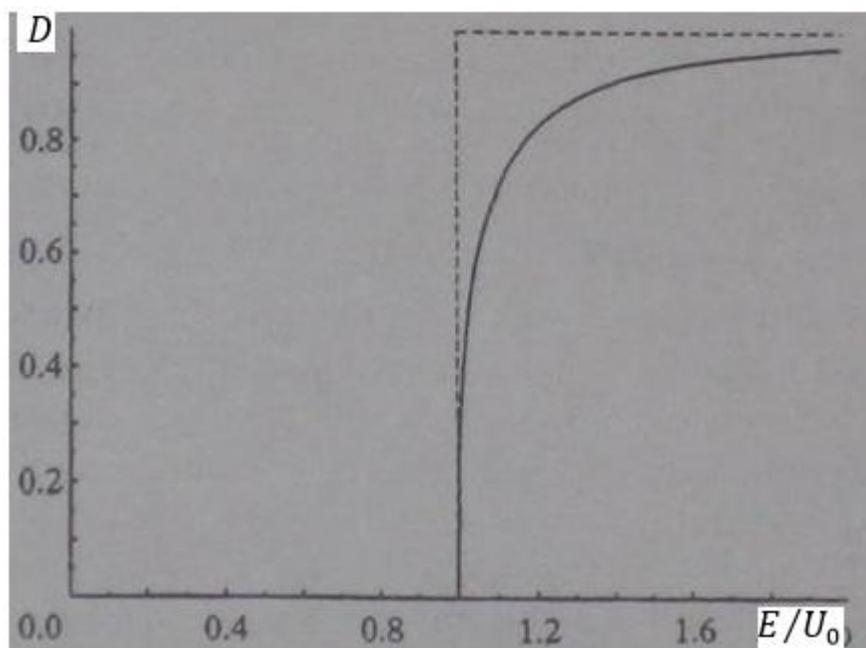


Рисунок 2.9 – Коэффициент прозрачности потенциальной ступеньки в зависимости от энергии частицы

В процессе решения стационарного уравнения Шрёдингера используется представление о потоке частиц с заданной энергией, т.е. состоянию частицы соответствует плоская волна. При этом исключается вопрос о локализации частицы в какой-либо точке пространства. Поэтому стационарный подход не даёт пространственно-временной картины движения частицы в потенциальном поле. Кроме того, не удаётся ответить на ряд принципиальных вопросов: где локализована частица в момент рассеяния на потенциальной ступеньке, какова

длительность этого процесса, какова вероятность обнаружить частицу в конкретный момент времени в данной области пространства, каковы скорости прошедших и отражённых частиц.

Ответы на эти вопросы можно получить при решении нестационарного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U(x). \quad (2.15)$$

Волновая функция начального состояния выбирается в виде [6]

$$\psi_0 = \frac{1}{(a\sqrt{\pi})^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{a}\right)^2\right\} e^{ik_0x}, \quad (2.16)$$

который соответствует частице, находящейся в точке  $x = x_0$  и движущейся со скоростью  $v = \hbar k/m$  по направлению ступеньки. В результате решения нестационарного уравнения Шрёдингера можно определить состояние системы и все ее характеристики в любой момент времени.

В процессе выполнения компьютерного эксперимента можно изучить влияние соотношения между энергией налетающей частицы и высотой барьера на коэффициент прозрачности потенциальной ступеньки. В программе доступно также варьирование начальной ширины волнового пакета. Представляет интерес случай, когда потенциал является отрицательным, что соответствует «скатыванию» частицы в потенциальную яму.

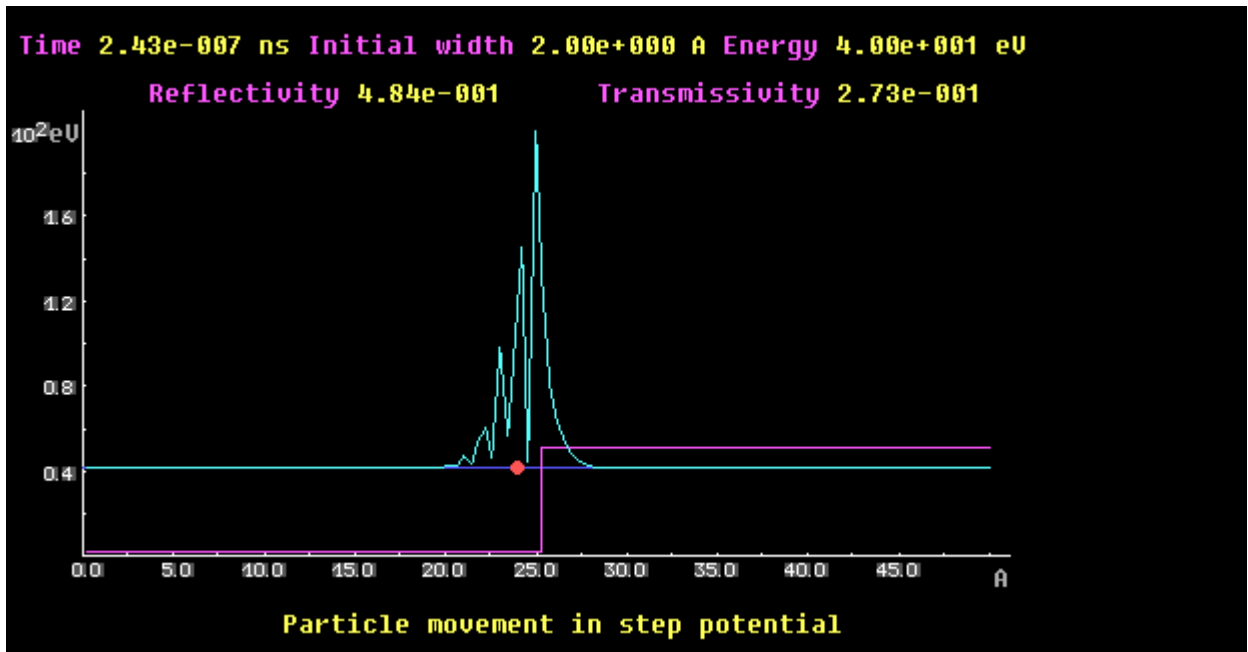


Рисунок 2.10 – движение частицы через потенциальную ступеньку

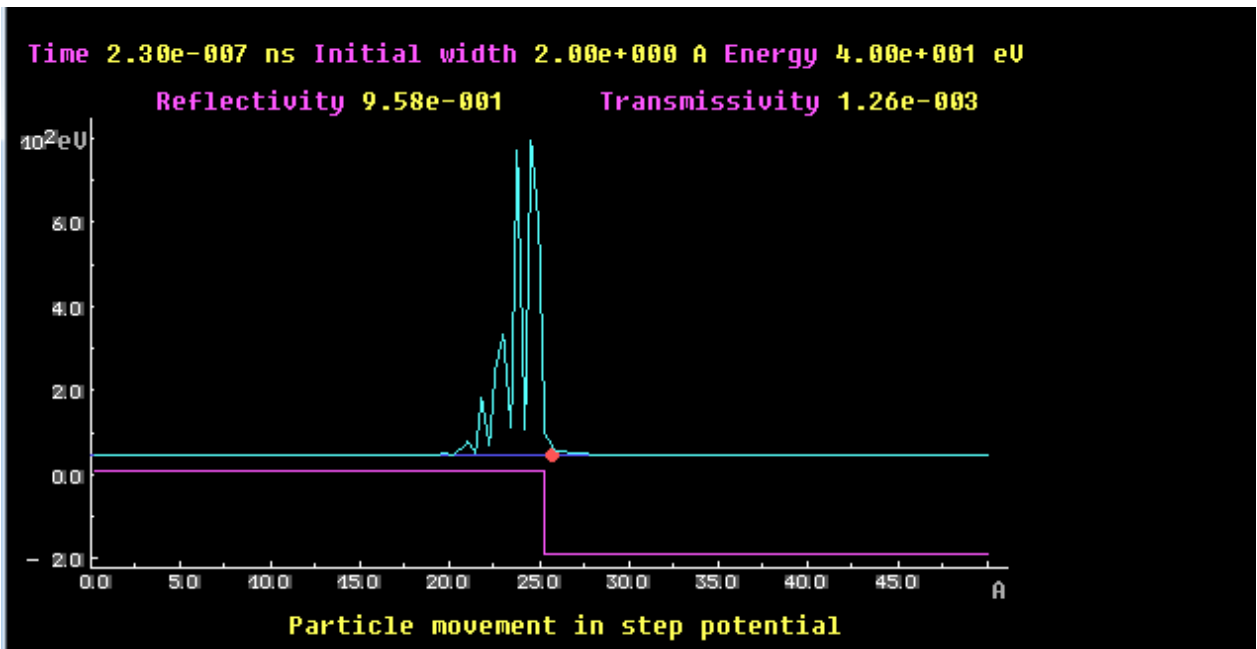


Рисунок 2.11 – «Скатывание» в потенциальную яму ( $U_0 = -200 \text{ eV}$ )

Из сравнения рисунков следует, что знак потенциала не влияет на эффект: вне

зависимости от знака  $U_0$  имеется большая вероятность появления отражённого потока на «краю» ступеньки или ямы.

## 2.5 Распад связанного состояния

С помощью компьютерного эксперимента можно исследовать квазистационарные состояния, для которых вероятность местонахождения частицы будет зависеть от времени, уменьшаясь по экспоненциальному закону.

Примером такой задачи может служить поведение частицы в потенциале вида

$$U(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2}{2} \cdot (x - a)^2, & x \leq x_1 \\ \frac{m\omega^2}{2} \cdot (x - a)^2 \cdot \exp\left(-\frac{x - x_1}{r}\right), & x > x_1. \end{cases} \quad (2.17)$$

В отсутствие экспоненциального множителя мы имели бы потенциал линейного гармонического осциллятора с известным набором стационарных состояний. А согласно (2.17) при  $x > x_1$  потенциал монотонно убывает и в пределе  $x \rightarrow \infty$  обращается в нуль. В этом случае вероятность обнаружить частицу внутри параболической квантовой ямы не остаётся постоянной, а меняется по закону

$$P(t) = P_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (2.18)$$

С классической точки зрения микрочастица, имеющая энергию

$$E < \frac{m\omega^2}{2} \cdot (x_1 - a)^2,$$

не может покинуть яму. А с точки зрения квантовой механики это возможно за счёт туннельного эффекта. При возрастании величины  $x_1$  вероятность



туннелирования уменьшается по экспоненте, а среднее время жизни  $\tau$  квазистационарного состояния растёт. При этом уровни энергии частицы уже не являются строго определёнными. Ширина размытия уровней подчиняется соотношению неопределённостей Гейзенберга для энергии и времени:

$$\Delta E \Delta t \geq h,$$

где  $\Delta t = \tau$ . С ростом проницаемости потенциального барьера время жизни состояния уменьшается, что приводит к возрастанию ширины размытия уровня. В случае абсолютно непрозрачного барьера время жизни  $\tau \rightarrow \infty$ , что соответствует точно определённому значению энергии.

При условии конечной прозрачности барьера энергия уровня имеет вид [6]

$$E = E_0 - \frac{1}{2} \hbar \delta, \quad (2.19)$$

где

$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$  – энергия уровня в случае нулевой прозрачности барьера. Из (2.19) видно, что энергия содержит мнимую часть, связанную с экспоненциальным убыванием вероятности обнаружить частицу в пределах потенциальной ямы

$$|\psi(x, t)|^2 \sim e^{-\delta t}, \quad (2.20)$$

где постоянная распада  $\delta$  связана с коэффициентом прозрачности потенциального барьера  $D$  соотношением

$$\delta = \frac{\hbar k_0}{2ma} D.$$

Распад связанного состояния можно изучить с помощью компьютерной

модели из пакета программ NSSE [6]. Программа позволяет получить временную зависимость вероятности распада связанного состояния и вероятность обнаружить частицу в пределах потенциальной ямы (рисунки 2.12 и 2.13).

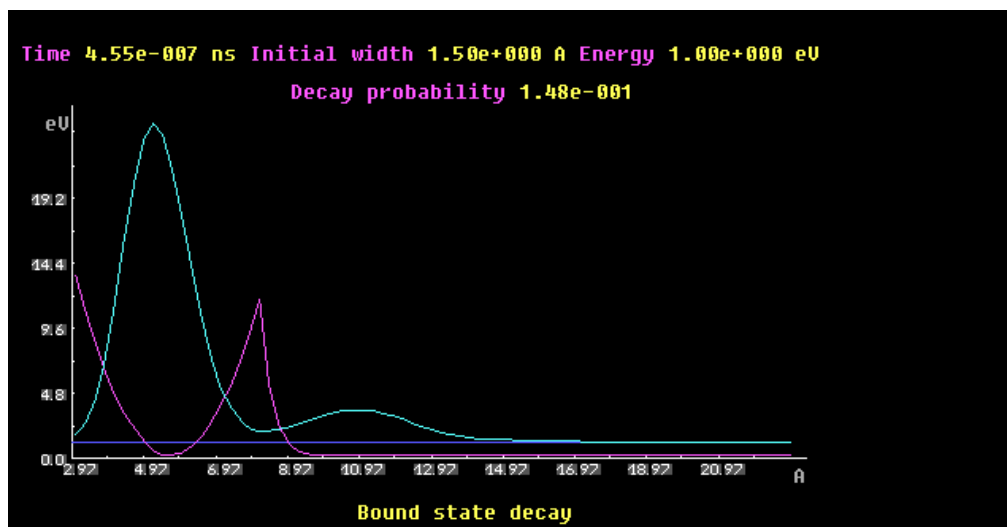


Рисунок 2.12 – Распад связанного состояния

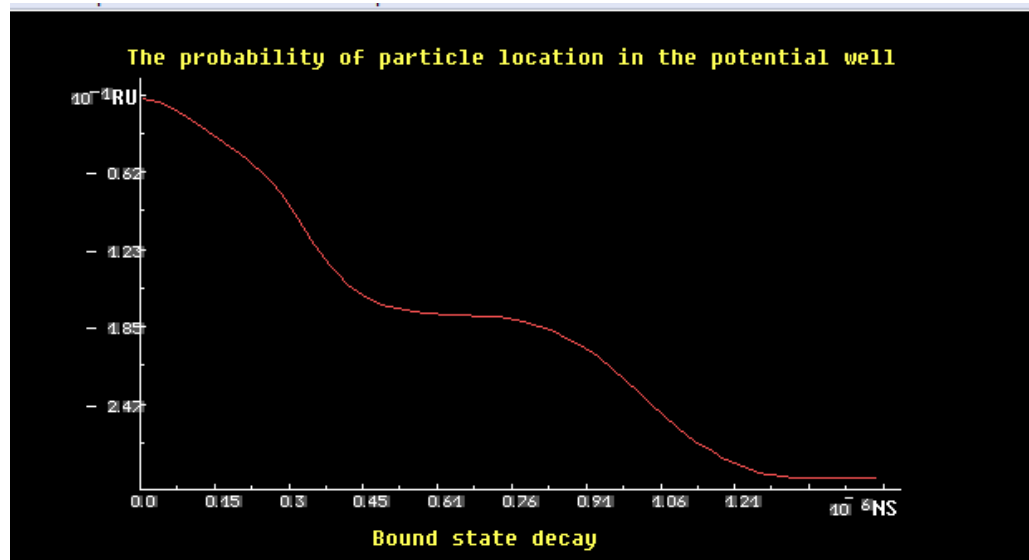


Рисунок 2.13 –Вероятность обнаружить частицу в яме в зависимости от времени

## 2.6 Прохождение электрона через туннельные резонансные структуры

Туннельные резонансные структуры (ТРС) широко используются в полупроводниковой технике. Типичным примером такой структуры является двухбарьерная структура, содержащая квантовую яму (рисунок 2.14).

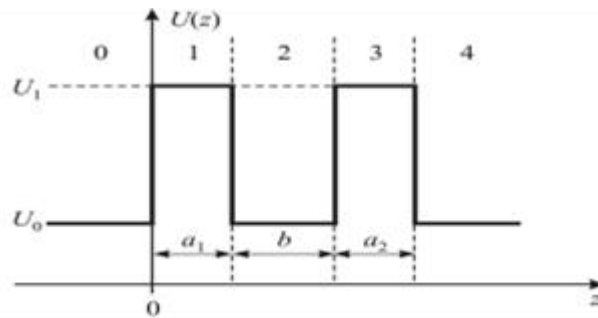


Рисунок 2.14 – Гетероструктура с двухбарьерной квантовой ямой

Такой потенциальный рельеф может быть создан, например, путём последовательного напыления на подложку слоёв GaAs и AlGaAs (рисунок 2.15).

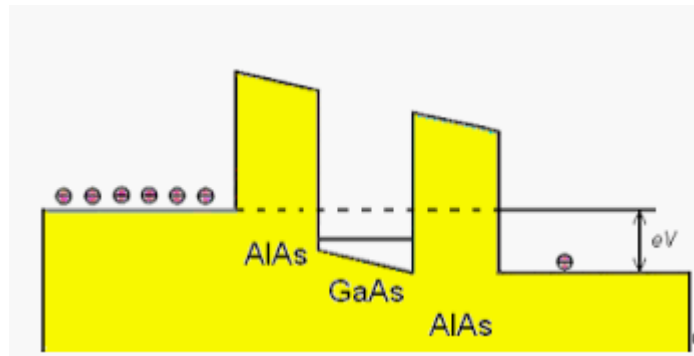


Рисунок 2.15 – Гетероструктура на основе GaAs и AlGaAs

В квантовой яме могут существовать одно или несколько квазистационарных состояний, ширина и время жизни которых, определяются толщиной потенциальных барьеров. Если энергия электронов совпадает с

энергетическими уровнями в квантовой яме (КЯ), возникает резонанс прозрачности.

Резонансы прозрачности могут появляться и с энергиями, превышающими высоту потенциального барьера. Они связаны с возбуждением виртуальных состояний из непрерывного энергетического спектра. Ярко выраженные резонансы прозрачности могут наблюдаться при условии, когда ширина энергетического спектра волнового пакета  $\Delta E \ll \Gamma$ , где  $\Gamma$  – ширина квазистационарного состояния в КЯ. Иначе большая часть пакета не сможет «пролезть» через полосу прозрачности КЯ. Если же ширина спектра  $\Delta E$  будет превосходить расстояние между соседними уровнями в КЯ, тогда пакет будет туннелировать сразу через несколько состояний в КЯ, что приведёт к полному исчезновению резонансных максимумов на зависимости  $D(E)$ .

Моделирование движения электрона через двухбарьерную структуру с квазипараболической КЯ осуществляется с помощью программы из пакета NSSE. Энергетический спектр такой ямы близок к энергетическому спектру линейного гармонического осциллятора (рисунок 2.16)

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.21)$$

Программа позволяет наблюдать пространственно-временное распределение плотности вероятности обнаружить электрон в разных точках пространства (рисунок 2.17), изучить зависимость коэффициента прохождения частицы через КЯ от её энергии и получить спектр состояний внутри КЯ при резонансном туннелировании (рисунок 2.18).

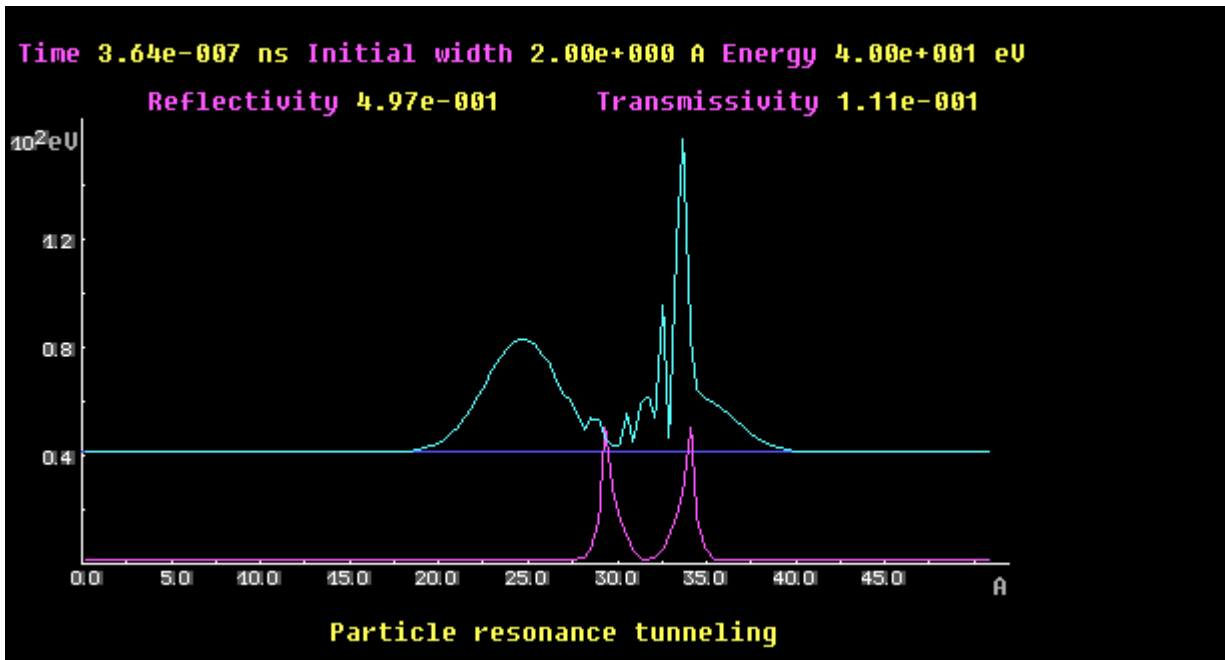


Рисунок 2.16 – Резонансное туннелирование электрона

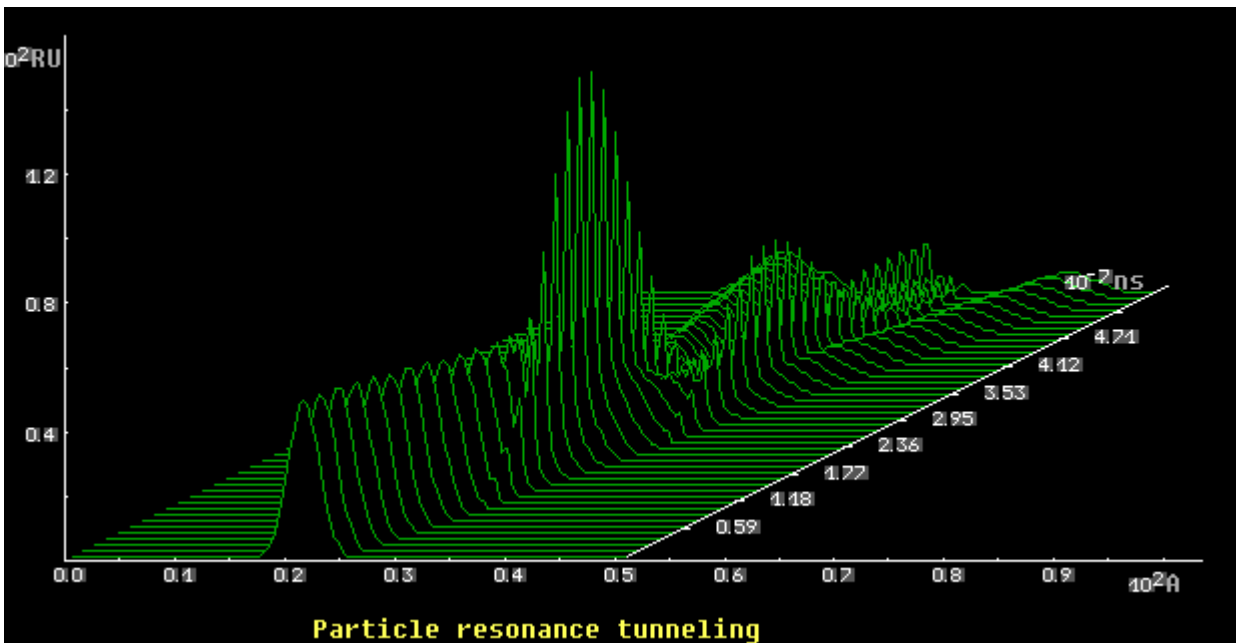


Рисунок 2.17 – Пространственно-временная картина распределения плотности вероятности обнаружения электрона при резонансном туннелировании

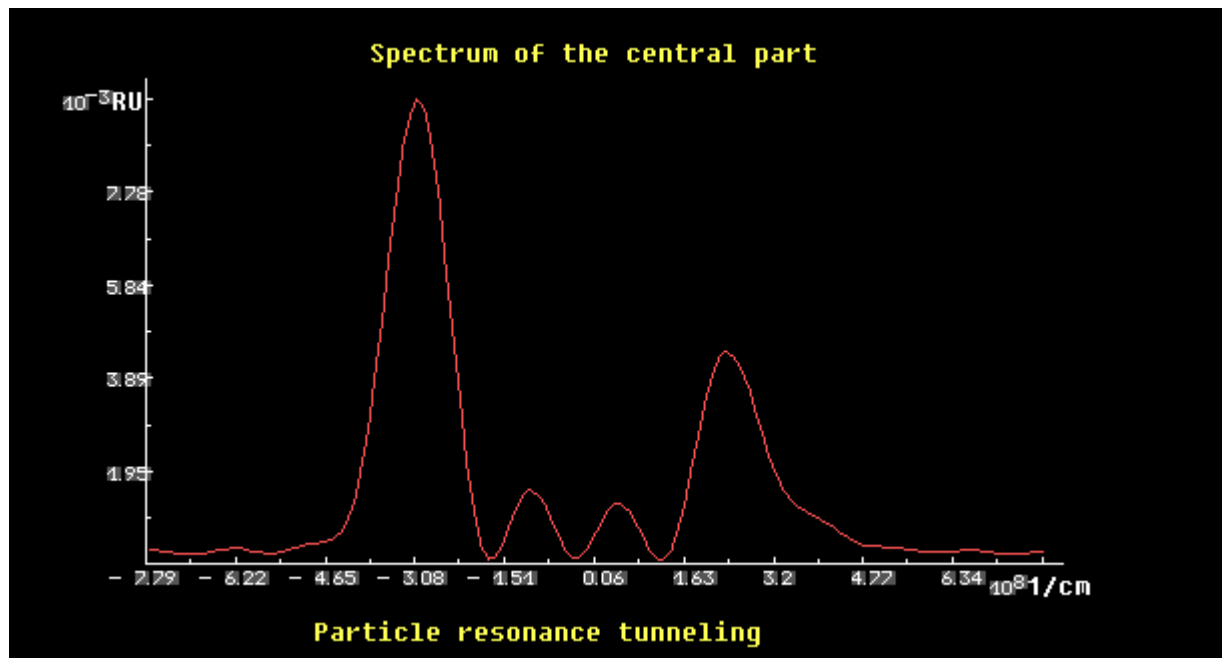


Рисунок 2.18 – Спектр состояния электрона в квантовой яме  
в пространстве волновых векторов

Примером системы, в которой наблюдается резонансное туннелирование электронов является наносистема  $EuO_{1.06} - SrO_{0.94}O_{0.06} - EuO_{1.06}$  (рисунок 2.19) с шириной запрещённой зоны  $E_g = 1.7$  эВ. [5]. Если к наносистеме приложено напряжение смещения, экситонные электроны, образующиеся при лазерном облучении с энергией  $\hbar\omega < 2.6$  эВ, испытывают резонансное туннелирование из первого барьера  $EuO_{1.06}$  во второй  $EuO_{1.06}$ . Зависимость коэффициента пропускания от энергии туннелирующего электрона представлена на рисунке 2.20 (ширина барьера  $30 \text{ \AA}$ , ширина КЯ равна  $60 \text{ \AA}$ ; высота барьеров относительно дна ямы  $\sim 1$  эВ

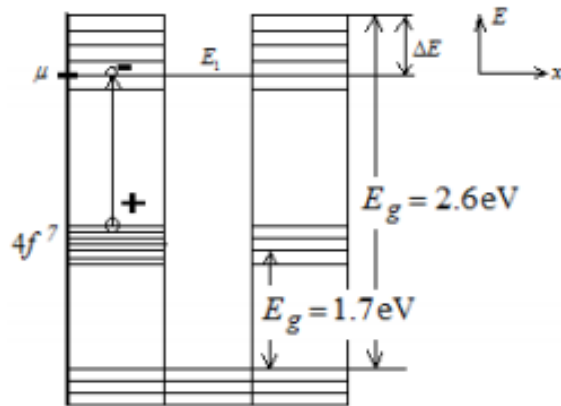


Рисунок 2.19 – наносистема  $EuO_{1.06} - SrO_{0.94}O_{0.06} - EuO_{1.06}$

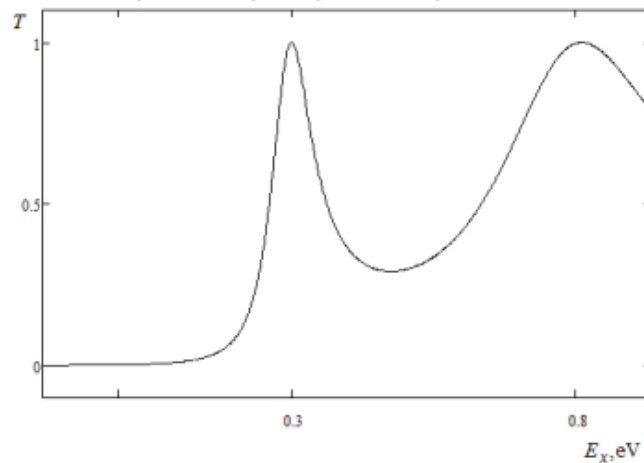


Рисунок 2.20 – Энергетическая зависимость коэффициента пропускания  
электрона через наноструктуру

Графическая иллюстрация некоторых компьютерных экспериментов, рассмотренных в данной главе, представлена в Приложении 1.

## ГЛАВА III. МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ БАРЬЕРНЫХ КВАНТОВО - МЕХАНИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

3.1 Методика организации исследовательской работы по изучению поведения микрочастицы в поле потенциальных барьеров

В данной главе рассматривается методика организации занятий, связанных с применением компьютерного эксперимента для изучения барьерных эффектов.

Потребность в применении компьютерного эксперимента при изучении квантовой механики обусловлена тем, что число аналитически решаемых квантовых задач невелико.

Выбор направления исследований осуществляется с помощью меню (рисунок 3.1).

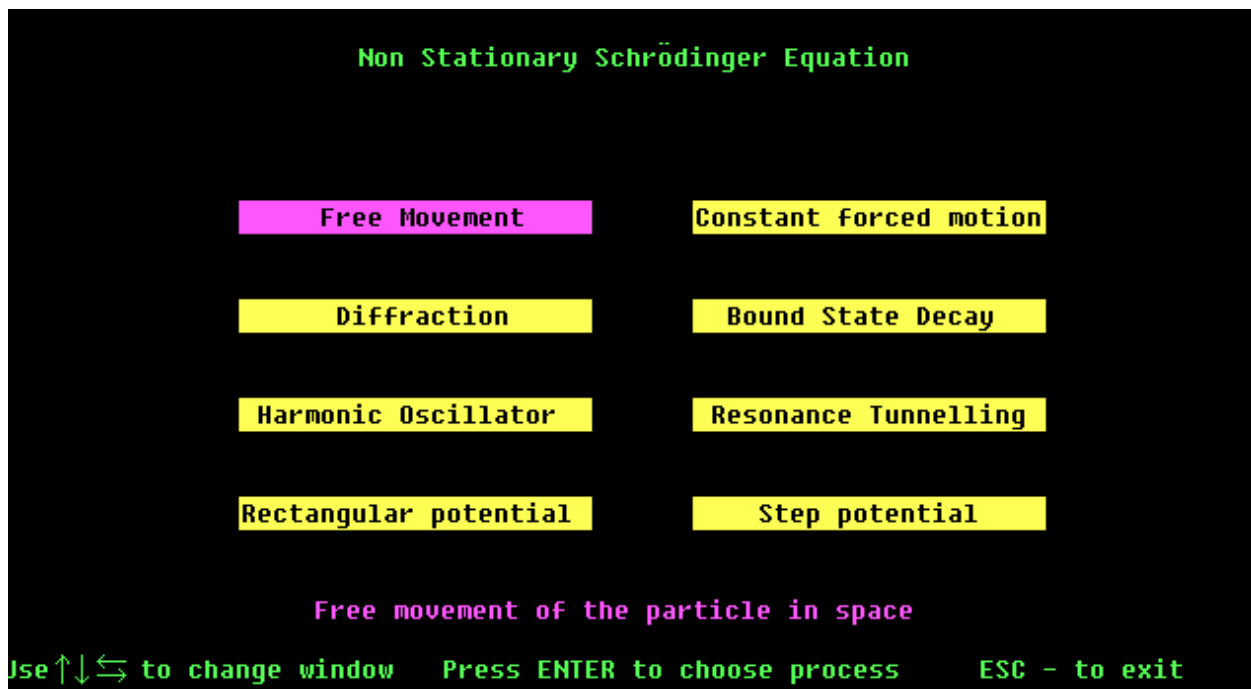


Рисунок 3.1 – Меню пакета программ «NSSE»



В каждом исследовании изучается поведение волнового пакета гауссовой формы в поле со скачками потенциала. В процессе демонстрации на дисплее появляется потенциальный профиль  $U(x)$ ,  $|\psi(x, t)|^2$  (измеряемая в относительных единицах), определяющая плотность вероятности обнаружения частицы в разных точках пространства, начальная ширина волнового пакета, а также изменяющиеся во времени коэффициенты прозрачности и отражения.

Ниже приведены конкретные задания для исследований по 6 направлениям. Результаты эксперимента заносятся в таблицу, по данным которой строятся графики зависимости от времени коэффициента отражения  $R(t)$  и коэффициента прозрачности  $T(t)$ .

t,ns	
R	
T	

Таблица 2 – изменение во времени коэффициентов отражения и прозрачности

Направление 1. Туннельный эффект при инфинитном движении частицы в потенциале прямоугольной формы

Для проведения эксперимента необходимо задать начальное состояние частицы (величины  $x_0$  и  $E_0$ ), а также параметры потенциала. В программе используется потенциал прямоугольной формы, характеризуемый двумя параметрами: шириной  $d$  и высотой  $V_0$ . При этом потенциальный барьер соответствует случаю  $U_0 > 0$ .

1. Влияние высоты потенциального барьера  $U_0$ .

Ввести значения:

$$x_0 = 2, d = 2, E_0 = 40.$$

$$U_0 = 41, 60, 120.$$

2. Влияние ширины потенциального барьера  $d$ .

Ввести значения:

$$E_0=40, x_0=1, U_0=50.$$

$$x_0 = 0.1; 1; 2.$$

3. Влияние степени начальной локализации частицы  $x_0$ .

Ввести значения:

$$E_0=40, d=2, U_0=50.$$

$$x_0 = 1; 1.5; 2.$$

### Направление 2. Надбарьерное рассеяние

1. Влияние начальной энергии частицы  $E_0$ .

Ввести значения:

$$d = 2, x_0 = 2, U_0 = 50.$$

$$E_0 = 50; 75; 150.$$

2. Влияние ширины барьера  $d$ .

Ввести данные:

$$x_0 = 2, U_0 = 50, E_0 = 150.$$

$$d = 0.1; 1; 3.$$

3. Влияние степени начальной локализации частицы  $x_0$ .

Ввести данные:

$$d = 2, U_0 = 50, E_0 = 150.$$

$$x_0 = 1; 1.5; 2.$$

### Направление 3. Отражение от потенциальной ямы

Этот эффект наблюдается для потенциала  $U_0 < 0$ .

1. Влияние глубины ямы  $U_0$ .

Ввести данные:

$$x_0 = 2, d = 2, E_0 = 40.$$

$$U_0 = -10; -100; -180.$$

2. Влияние ширины ямы  $d$ .

Ввести данные:

$$x_0=1; U_0 = -200; E_0=40.$$

$$d = 0.1; 1; 5.$$

3. Влияние начальной энергии налетающей частицы  $E_0$ .

Ввести данные:

$$x_0=2; d=2, V_0 = -120.$$

$$E_0=10, 50, 150.$$

Можно попытаться получить аналог эффекта Рамзауэра – минимум вероятности отражения частицы от ямы при определённых энергиях частицы.

Направление 4. Движение частицы в поле прямоугольной потенциальной ступеньки

В процессе решения задач на дисплей выводятся графики функций  $\langle x \rangle$ ,  $|\psi(x)|^2$  а также положение классической частицы. При нажатии клавиши F1 на экран выводятся также вероятности обнаружить частицу справа (transmittivity) и слева (reflectivity) от «потенциальной ступеньки», определяющие коэффициенты отражения и прохождения соответственно.

Рекомендуется рассмотреть следующие варианты:

1.  $E_0=40$  эВ,  $x_0=2$ А,  $U_0=30$  эВ;

2.  $E_0 = 25$  эВ,  $x_0 = 2$ А,  $U_0 = 30$  эВ;

3.  $E_0 = 25$  эВ,  $x_0 = 4$ А,  $U_0 = 30$  эВ;

4.  $E_0 = 25$  эВ,  $x_0 = 2$ А,  $U_0 = -100$  эВ (скатывание частицы в потенциальную яму).

Как можно объяснить происходящее? Сравнить классическую и квантовую вероятности отражения от «ступеньки». В каких случаях эти вероятности совпадают?

Почему даже в случае  $E_0 > U_0$  коэффициент отражения оказывается отличным от нуля?

Данные для каждого эксперимента занести в таблицу, по данным которой построить графики  $R(t)$ ,  $T(t)$ .

### Направление 5. Распад связанного состояния

Данная программа предназначена для наблюдения распада связанного состояния в потенциале вида

$$U(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2}{2} \cdot (x - a)^2, & x \leq x_1, \\ A \cdot \exp\left(-\frac{x}{r}\right) & x > x_1, \end{cases}$$

где

$$A = \frac{m\omega^2}{2} \cdot (x_1 - a)^2.$$

В начальный момент времени волновой пакет локализован в яме вблизи координаты  $a$ . Величины  $\omega$ ,  $a$  и  $r$  в программе фиксированы. При этом величина  $\omega$  совпадает со значением частоты осциллятора.

Для запуска программы необходимо задать параметры волнового пакета  $x_0$  и  $E_0 = p_0^2 / 2m$ , а также параметр потенциала  $A$  (окно «height»).

В процессе демонстрации помимо функций  $U(x)$ ,  $|\psi(x)|^2$  и параметров начального волнового пакета на дисплей выводится вероятность распада состояния  $W$ , вычисляемая как вероятность обнаружить частицу в классической области инфинитного движения. Величина  $P = 1 - W$  определяет вероятность обнаружения частицы в потенциальной яме. Нажав

клавишу F6, можно проследить за временной зависимостью вероятности обнаружить частицу в яме.

Задания:

1. Проанализировать зависимость вероятности распада состояния от времени при различных параметрах потенциала и начального волнового пакета. Обратить внимание на распределение вероятности обнаружить частицу вне потенциальной ямы в различные моменты времени.

а)  $x_0 = const$ . Исследовать влияние  $A$  ( $A=12; 15; 20$ ).

б)  $A = const$ . Исследовать влияние  $x_0$ .

2. Подобрать параметры волновой функции начального состояния, соответствующие основному стационарному состоянию осциллятора, пронаблюдайте распад квазистационарного состояния. Определить вероятность обнаружить частицу в яме в зависимости от времени. Обратить внимание на неэкспоненциальный характер распада квазистационарного состояния в начальный период распада. Какова длительность этого распада?

#### Направление 6. Прохождение электрона через туннельные резонансные структуры

Данная программа позволит изучить основные особенности транспорта электронов через туннельные резонансные структуры на примере параболической квантовой ямы (КЯ):

$$U(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2}{2} \cdot x^2 & |x| \leq a, \\ 0 & |x| > a. \end{cases}$$

В начальный момент времени пакет локализован слева от области действия потенциала ( $x < -a$ ).

В программе потенциал задается двумя параметрами: энергией кванта

гармонического осциллятора  $\hbar\omega$  (окно «quant») и величиной

$$U = U(x = a) = \frac{m\omega^2}{2}$$

(окно «height»). Таким образом, можно менять не только положение энергетических уровней в КЯ, но и их ширину, определяемую прозрачностью барьеров, разделяющих КЯ и области инфинитного движения. Для запуска программы необходимо задать параметры начального волнового пакета:  $x_0$  и энергию частицы  $E_0 = p_0^2/2m$ .

В процессе демонстрации на дисплей выводятся функции  $U(x)$ ,  $|\psi(x)|^2$ . Нажимая клавишу F1, можно получить вероятность обнаружить частицу слева и справа от области действия потенциала. Нажимая F9, можно определить спектр состояния электрона (в пространстве волновых векторов) локализованного в областях справа, внутри и слева от КЯ.

В процессе выполнения данного компьютерного эксперимента можно провести следующие исследования:

1. Зависимость коэффициента прохождения частицы через квантовую яму от её энергии ( $E < U$ ,  $E = U$ ,  $E > U$ ). Задать следующие параметры:

$$x_0 = 1\text{\AA}, \quad U = 60 \text{ эВ}, \quad \hbar\omega = 5.1 \text{ эВ}.$$

$$E = 40.8; 51; 60; 76,5 \text{ эВ}.$$

Каков характер кривой зависимости коэффициента прозрачности от энергии частицы (монотонный или резонансный)?

При каких условиях возникают резонансы прозрачности?

Согласуются ли резонансы прозрачности с энергетическим спектром осциллятора  $E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ ? Частота собственных колебаний осциллятора  $\omega = 8.162 \cdot 10^{15} 1/c$ .

2. Зависимость коэффициента прохождения от ширины волнового пакета.

$$\hbar\omega = 5.1 \text{ эВ}, \quad U = 60, \quad E = 40,8 \text{ эВ}.$$

$$x_0 = 1\text{\AA}, \quad 2\text{\AA}, \quad 3\text{\AA}.$$

3. Влияние величины кванта энергии на процесс туннелирования.

$$x_0 = 1\text{\AA}, \quad U = 41 \text{ эВ}, \quad E = 40.8 \text{ эВ}.$$

$$\hbar\omega = 5.1 ; 15.3; 20.4 \text{ эВ}.$$

4. Проверьте справедливость соотношения неопределённостей для энергии и времени (связь времени жизни состояния с шириной уровня энергии  $\Delta E$ )

$$\Delta E \cdot \tau = \hbar.$$

Все проводимые эксперименты наглядно демонстрируют общие особенности описания квантовых явлений: вероятностный характер, корпускулярно-волновой дуализм и дискретность значений физических величин в случае финитного движения.

Выполнение экспериментальных исследований сопровождалось контрольными вопросами, поставленными до и после эксперимента. Анализ ответов на эти вопросы даётся в пункте 3.2.

### 3.2 Итоги компьютерного эксперимента

Компьютерный эксперимент проводился студентами 451 группы физико-математического факультета после изучения теоретического материала по теме «Нестационарное уравнение Шрёдингера».

Перед началом эксперимента студентам предлагаются для письменного ответа следующие вопросы:

1. Что такое потенциальный барьер и потенциальная яма?
2. Что такое коэффициент прозрачности и коэффициент отражения частицы от области действия потенциала?

3. Как влияют высота потенциального барьера и его толщина на вероятность прохождения частицы через потенциальный барьер?
4. Чем обусловлен эффект отражения частицы от потенциальной ямы? Влияет ли знак потенциала на возможность туннелирования частицы?
5. Запишите стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного движения. Почему оно оказывается недостаточным для изучения барьерных квантовых эффектов? Запишите нестационарное уравнение Шрёдингера. В чём состоит его преимущество в решении барьерных задач?

В опросе приняли участие 15 студентов. Результаты ответов на поставленные вопросы приведены на рисунке 3. 2, из которого можно сделать заключение о наличии некоторого минимального уровня знаний, полученных при первом (теоретическом) знакомстве с барьерными эффектами (правильные ответы на поставленные вопросы составили от 68 до 86 %).

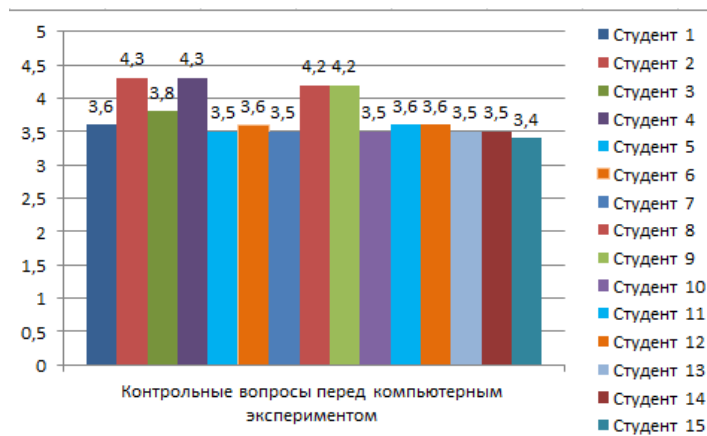


Рисунок 3.2 – Результаты ответов на контрольные вопросы перед выполнением компьютерного эксперимента

После выполнения эксперимента формулируются следующие вопросы:

1. Какие эффекты возникают при движении частицы через потенциальную ступеньку в зависимости от соотношения между энергией частицы  $E$  и высотой  $U_0$  ступеньки, с классической и квантовой точек зрения?

	Классическая картина	Квантовая картина
а) $E > U_0$		



б)	$E < U_0$		
в)	$E = U_0$		

2. Как влияют на коэффициент прозрачности потенциального барьера следующие параметры: а) высота барьера  $U_0$ ; б) толщина барьера; в) начальная ширина волнового пакета  $x_0$ ?
3. Какие эффекты можно наблюдать при движении микрочастицы в поле потенциальной ямы?
4. Какую картину можно наблюдать при движении частицы в поле прямоугольного потенциального барьера при условии  $E < U_0$  (слева, справа и внутри барьера)? Что означает «застревание» частицы в области действия потенциала?
5. В начальный момент времени волновой пакет локализован в параболической квантовой яме (КЯ), переходящей в экспоненциально убывающий потенциал. Как зависит вероятность обнаружить частицу вне КЯ в зависимости от а) высоты барьера; б) ширины начального волнового пакета? Что можно сказать о вероятности обнаружения частицы внутри КЯ в зависимости от времени?
6. При каких условиях возникают резонансы прозрачности в двухбарьерной структуре, содержащей квантовую яму (два потенциальных барьера, разделяющих КЯ и области инфинитного движения частицы)?
7. В чём заключается преимущество использования нестационарного уравнения Шрёдингера перед стационарным подходом при изучении барьерных эффектов?

Результаты ответов на второй блок вопросов приведены на рис. 3.3. Каждый правильный ответ, раскрытый в полном объеме, оценивался в 1 балл.

Оценивая возможности применения компьютерного эксперимента при изучении квантовой механики, студенты отмечали, что

а) проведённый компьютерный эксперимент, основанный на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера, позволил обнаружить новые закономерности поведения микрочастиц в различных потенциальных полях, которые не «открываются» в рамках анализа стационарного уравнения;

б) желательно использовать компьютерный эксперимент при изучении отдельных тем с целью наблюдения динамики рассматриваемых процессов;

в) желательно ввести дополнительный спецкурс «Квантовая механика на компьютере».

Рисунок 3.3 позволяет сделать заключение о положительном влиянии исследовательской работы, выполненной студентами в рамках компьютерного эксперимента (правильные ответы на поставленные вопросы составили от 64.3 до 97.1 %). На специально организованном семинаре каждая исследовательская группа имела возможность представить свои сообщения. Подготовленные презентации вызвали живой интерес участников семинара, при этом в качестве докладчиков (либо содокладчиков) выступили 75 % студентов группы. Последовавший за этими мероприятиями коллоквиум также показал достаточно высокие результаты усвоения материала. При этом практически все студенты отмечали, что проведение семинара по обсуждению результатов компьютерного эксперимента позволило значительно глубже понять сущность физических эффектов, наблюдаемых при движении в среде со скачками потенциала.

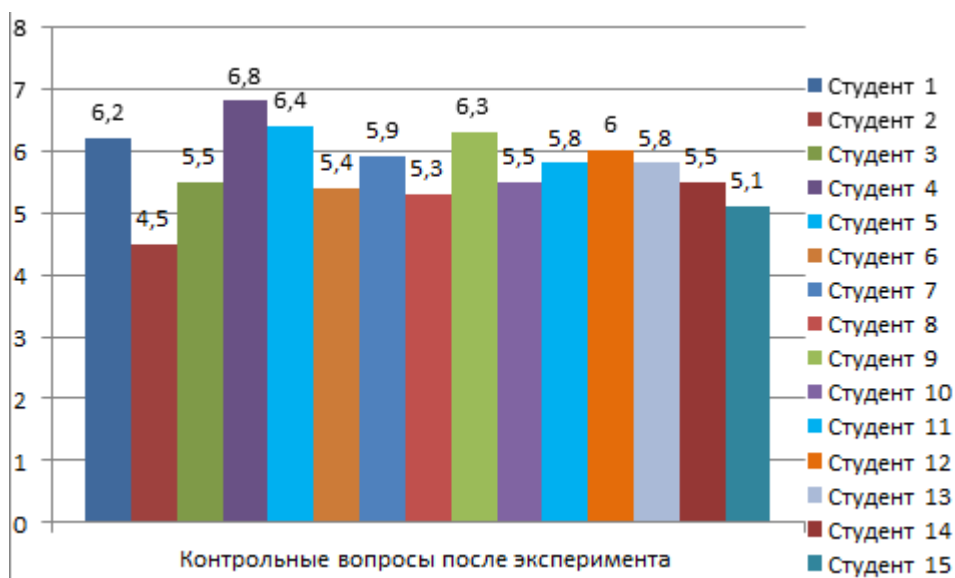


Рисунок 3.3 – Результаты ответов на контрольные вопросы после эксперимента.

Анализируя рассчитанные коэффициенты успешности выполнения каждого задания, можно сделать выводы о том, насколько успешно был проделан эксперимент и усвоены его результаты. В каждом блоке вопросов был определен самый сложный и самый доступный вопрос. Эти данные вытекают из анализа диаграмм 3.4 – 3.7.

На рисунках 3.4. и 3.5. представлены диаграммы, где можно увидеть успешность и полноту ответа на вопрос, вызвавший наибольшее затруднение в каждом блоке. По результатам диаграмм можно сделать вывод о том, что:

– на четвертый вопрос «Чем обусловлен эффект отражения частицы от потенциальной ямы? Влияет ли знак потенциала на возможность туннелирования частицы?» (рисунок 3.4.) вызвал у студентов затруднения. Самый низкий балл 0.3 за этот вопрос получили 3 студента. Более половины студентов ответили на 50 %. Следовательно, студенты не в полной мере усвоили материал, касающийся данного вопроса;

– на второй вопрос из блока 2 «Как влияют на коэффициент прозрачности потенциального барьера следующие параметры: а) высота барьера  $U_0$ ; б) толщина барьера; в) какие эффекты можно наблюдать при движении микрочастицы в поле потенциальной ямы?» только три студента дали полностью правильный ответ. Половина группы продемонстрировала знания по данному вопросу на 30 %. Один студент получил очень низкий балл – 0.2 (20 %).

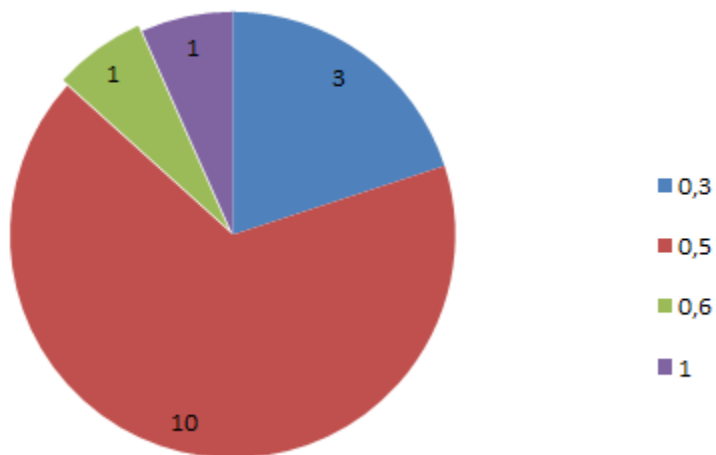


Рисунок 3.4 – Распределение ответов на вопрос № 4 (1 блок)

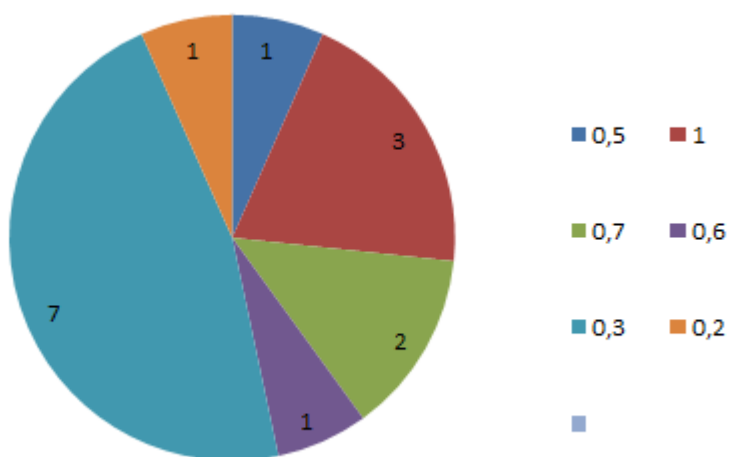


Рисунок 3.5 – Распределение ответов на вопрос № 2 (2 блок)

Диаграммы 3.6 – 3.7 дают представление о степени усвоения материала по самым «успешным» вопросам каждого блока.

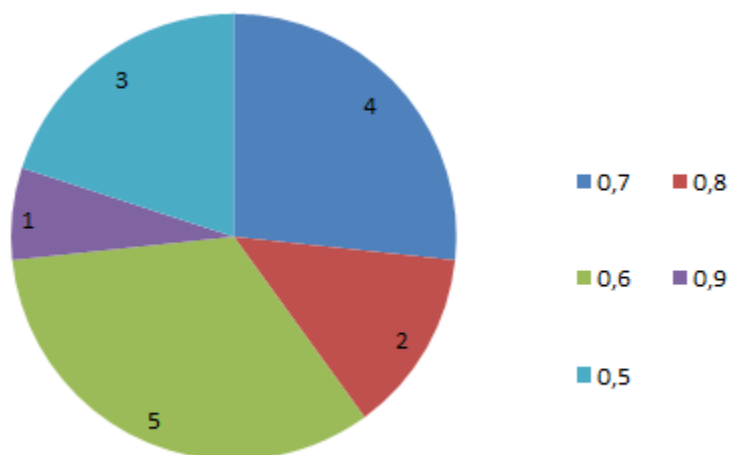


Рисунок 3.6 – Распределение ответов на вопрос № 5 (1 блок)

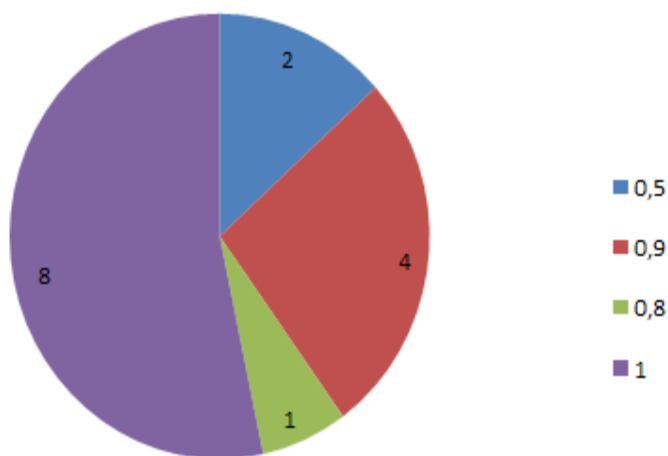


Рисунок 3.7 – Распределение ответов на вопрос № 7 (2 блок)

Можно сделать вывод о том, что:

– по пятому вопросу «Запишите стационарное уравнение Шрёдингера для одномерного уравнения движения. Почему оно оказывается недостаточным для изучения барьерных квантовых эффектов? Запишите нестационарное уравнение Шрёдингера. В чём состоит его преимущество в решении барьерных задач?» большинство студентов успешно справились с

заданием. Самый низкий балл составил 0.5. т.е. 50 % (его имеют всего 3 студента). Полностью справился с заданием 1 студент;

– на седьмой вопрос из второго блока «В чём заключается преимущество использования нестационарного уравнения Шрёдингера перед стационарным подходом при изучении барьерных эффектов?» восемь студентов справились с этим вопросом на все 100%.

До начала компьютерного эксперимента правильные ответы на поставленные вопросы составили от 68 до 86 %. Оценка проводилась по пятибалльной системе. При этом минимальный балл составил 3.4, а максимальный – 4.3. После выполнения компьютерного эксперимента максимальный балл составил 6.8, а минимальный – 4.5 (при семибалльной шкале). Наиболее сложные для понимания вопросы в последующих видах работы были подвергнуты дополнительному обсуждению. Анализ полученных результатов позволил сделать заключение о положительном влиянии исследовательской работы, выполненной студентами в рамках компьютерного эксперимента (правильные ответы на поставленные вопросы составили от 64.3 до 97.1 %).

Ожидать более высоких результатов в условиях ограниченного количества часов, которые можно выделить на изучение темы «Нестационарное уравнение Шрёдингера» вероятно, нельзя. Но, может быть, более важным является положительное эмоциональное восприятие предложенного вида работы: студенты получили большое удовлетворение от выполненного компьютерного эксперимента, позволившего им открыть новые горизонты в изучении квантовых эффектов.

После выполнения обязательного списка заданий студенты имели возможность выйти за рамки лабораторной работы и приступить к самостоятельному экспериментированию. Тем самым, компьютерный

эксперимент обрёл по-настоящему исследовательский характер, в ходе его выполнения удалось выявить интересные закономерности, которые теоретически предсказать заранее было невозможно.

Коэффициент успешности усвоения материала оценивался по 4 видам работ. Он определялся по формуле:

$$K_y = 0.15 * K_1 + 0.25 * K_2 + 0.35 * K_3 + 0.25 * K_4,$$

где  $K_1$  – коэффициент успешности ответов на теоретические вопросы до эксперимента,  $K_2$  – коэффициент успешности ответов на теоретические вопросы после эксперимента,  $K_3$  – коэффициент успешности представления доклада на семинаре,  $K_4$  – коэффициент успешности, отражающий результаты коллоквиума.

Оценка уровня сформированности компетенций (знать, уметь, владеть) рассчитывалась по формуле:

$$K_{\text{комп.}} = 0.36 * Z + 0.28 * Y + 0.36 * B.$$

Множители 0.36, 0.28 и 0.36 взяты из работ Беспалько В.П. [2], Симонова В.П. [23] и Потаповой М.В. [20] для трехуровневой системы оценки сформированности компетенций.

Формулировка формируемых компетенций содержится в таблице 3 Приложения 2. Чек-лист по итогам работ, связанных с изучением барьерных квантово-механических эффектов, содержится в Приложении 3.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В данной работе рассмотрена проблема применения компьютерного эксперимента для изучения барьерных эффектов, основанного на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера.

2. Разработана методика организации занятий, связанных с применением компьютерного эксперимента для изучения барьерных задач.

3. Показана эффективность разработанного метода на примере нестационарного уравнения Шрёдингера.

4. По материалам ВКР опубликованы 2 статьи: в сборнике материалов V Всероссийской научно-методической конференции «Проблемы современного физического образования» (г. Уфа, 24-26 октября 2019 г.) и в XVI Межвузовском сборнике научных трудов «Актуальные проблемы развития среднего и высшего образования» (г. Челябинск, 2020 г.).

5. Материалы исследований в рамках ВКР были представлены на VI Международной научно-практической конференции «Новации и традиции в преподавании физики: от школы до вуза» (г. Тула, 26 - 27 марта 2020 года).

В заключение хотелось бы привести слова Б.Н. Захарьева, где он цитирует Р. Фейнмана: «Наше общество очень нуждается сейчас в “квантовой пропаганде”, чтобы “оценить красоту нашего прекрасного мира, понять, что составляет сейчас главную часть истинной культуры нашей эпохи, ... подключиться к этому величайшему дерзанию, на которое когда-либо пускался человеческий ум” (Р. Фейнман)» [11].



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Байков, Ю.А. Квантовая механика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов – Электрон. текстовые данные – Москва : Лаборатория знаний, 2020 – 292 с. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/24137.html>. — ЭБС «IPRbooks».
2. Беспалько, В.П. Педагогика и прогрессивные технологии обучения [Текст] / В.П. Беспалько. – Москва : ИПОМО России, 1995. – 336 с.
3. Блохинцев, Д.И. Основы квантовой механики [Текст] / Д.И. Блохинцев. – Москва : Наука, 1983. – 664 с.
4. Власова, В.В. Изучение нестационарной теории возмущений в курсе квантовой механики педагогического вуза с помощью компьютерного эксперимента [Текст] / В. В. Власова, Л.М. Свирская – XI Межвузовский сборник научных трудов «Актуальные проблемы развития среднего и высшего образования»; под ред. О.Р. Шефер. – Челябинск: Изд-во Край Ра, 2015. – с. 123-128.
5. Власова, Я.В. Резонансное туннелирование экситонных электронов в наносистеме  $Eu_{1.06} - SrO_{0.94}O_{0.06} - EuO_{1.06}$  / Я.В. Власова, Ю.Ф. Головнев, Д.А. Нургулеев [Текст] // Новации и традиции в преподавании физики от школы до вуза: Материалы V Международной научно – практической конференции, г. Тула, 5 – 6 ноября 2015 г. – Изд.-во ТГПУ им. Л.Н. Толстого, 2015. – с. 43-47.
6. Волкова, Е.А. Квантовая механика на персональном компьютере [Текст] / Е.А. Волкова, АМ. Попов, А.Т. Рахимов. – Москва: URSS, 1995 – 215 с.
7. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике. Ч.2 [Текст] / Х Гулд, Я. Тобочник. – Москва : Мир, 1990. – 400 с.

8. Давыдов, А.С. Квантовая механика [Текст] / А.С. Давыдов. – Санкт – Петербург : БХВ – Петербург, 2011. – с. 704.
9. Елютин, П.В. Квантовая механика с задачами [Текст] / П.В. Елютин, В.Д. Кривченков. – Москва : Наука, 1976. – 336 с.
10. Захарьев, Б.Н. Новая ситуация в квантовой механике (о возможностях управления спектрами, рассеянием, распадами) [Текст] // Соросовский образовательный журнал, 1996. – № 7. – с. 81 – 87.
11. Захарьев, Б.Н. Уроки квантовой интуиции [Текст] / Б.Н. Захарьев. – Дубна : ОИЯИ, 1996. – 300 с.
12. Коэн – Таннуджи, К. Квантовая механика пер. с фр. Л.Н. Новикова [Текст]. В 2 т. Т.1 / К. Коэн – Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоз; пер. с фр. Л.Н. Новикова. – Екатеринбург : Изд-во Уральского университета, 2000. – 911 с.
13. Ландау, Л.Д. Курс теоретической физики. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) [Текст]: учебное пособие для вузов/ Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. – Москва: Физматлит, 2004. – 798 с.
14. Левич, В.Г. Курс теоретической физики [Текст]. В 2 т. Т. 2. / В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. – Москва : Наука, 1971. – 936 с.
15. Мандельштам, Л.И. Лекции по основам квантовой механики (Теория косвенных измерений, 1939 г.) [Текст] / Л.И. Мандельштам // Полное собрание трудов в 5 т. Т.5; под ред. акад. М.А. Леонтовича, – Ленинград : АН СССР, 1950. – 468 с.
16. Матвеев, А.Н. Атомная физика [Текст] / А.Н. Матвеев – Москва : Высшая школа, 1989. – 439.
17. Мессиа, А. Квантовая механика [Текст]. В 2 т. Т. 1. / А. Мессиа. – Москва : Наука, Физматлит, 1978. – 478 с.

18. Мултановский, В.В. Курс теоретической физики. Квантовая механика [Текст] / В.В. Мултановский, А.С. Василевский. – Москва : Просвещение, 1991. – 320 с.
19. Петрова, О.А. Демонстрация решения простейших задач квантовой механики с помощью компьютерных моделей системы Wolfram Mathematica [Электронный ресурс] / О.А. Петрова // Молодой ученый. – 2015. – №12. – с. 63-65 – URL <https://moluch.ru/archive/92/17791> (дата обращения 23.10.2019).
20. Потапова, М.В. Современный инструментарий отслеживания компетенций и универсальных учебных действий обучающихся [Текст] / М.В. Потапова // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2014. – №2 – с. 181 – 193.
21. Савельев, И.В. Основы теоретической физики. Т.2. Квантовая механика [Текст]: учебное пособие для вузов / И.В. Савельев. – Санкт – Петербург: Изд-во Лань, 2016. – 430 с.
22. Свирская, Л.М. Квантовая механика. Курс лекций в 2 ч. Ч.1. [Текст] / Л.М. Свирская. – Челябинск: Изд-во ЮУрГГПУ, 2018. – 270 с.
23. Симонов, В.П. Образовательный минимум: измерение, достоверность, надёжность [Текст] / В.П. Симонов, Е.Г. Черненко // Педагогика. – 1994. – № 4. – С. 30 —34.
24. Соколов, А.А. Квантовая механика [Текст] / А.А. Соколов, И.М. Тернов, В.Ч. Жуковский. – Москва : Наука, 1979. – 530 с.
25. Томко, Е.В. Изучение барьерных эффектов в курсе квантовой механики с помощью компьютерного эксперимента [Текст] / Е.В. Томко // Проблемы современного физического образования. Материалы V Всероссийской научно-практической конференции. – Уфа : Изд-во БашГУ, 2019. – С. 108 – 109.

26. Томко, Е.В. Методика организации компьютерного эксперимента по изучению барьерных эффектов в курсе квантовой механики [Текст] / Е.В. Томко // XVI Межвузовский сборник научных трудов «Актуальные проблемы развития среднего и высшего образования»; под. ред. О.Р. Шефер. – Челябинск: Изд-во Край Ра, 2020. – с. 226 – 230.

27. Тяжельникова, О.Ю. Использование пакета Maple в курсе квантовой механики педагогических вузов [Текст] // Сборник научных трудов аспирантов и соискателей НТГСПА. Вып. 6. Нижний Тагил, 2004. – с. 95 – 101.

28. Тяжельникова, О.Ю. Методика обучения решению задач по квантовой механике студентов педагогических вузов с использованием систем символьных вычислений [Текст] : дис.... канд. пед. наук: 13.00.02 / Тяжельникова Ольга Юрьевна. – Нижний Тагил, 2006. – 214 с.

29. Усова, А.В. Проблемы теории и практики обучения в современной школе: Избранное [Текст] / А.В. Усова. – Челябинск: ЧГПУ, 2000. – 221 с.

30. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки) (уровень бакалавриата), утв. 09.02.2016 [Электронный ресурс] – <http://fgosvo.ru/440305>.

31. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике. В 2 т. Т.1. [Текст] / З. Флюгге.– Москва : Мир, 1974. – 343 с.

32. Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике [Текст] / Д.В. Хеерман – Москва: Наука, 1990. – 176 с.

33. Шпольский, Э.В. Атомная физика. В 2 т. Т.2. [Текст] / Э.В. Шпольский. – Москва : Наука, 1984. – 440 с.

34. Brandt, S. The Picture Book of Quantum Mechanics [Электронный ресурс] / S. Brant., H.D. Dahmen. – Springer – Verlag. New York, 2012. – 472 p. <https://www.springer.com/gp/book/9781461439509>.

35. Fuller, R.G. Computers in physics edication [Текст] / Robert G. Fuller  
// Am. J. Phys. – v.54. – 1986 – p. 782.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Графическая иллюстрация результатов компьютерных экспериментов

В данном приложении приведено несколько графиков, иллюстрирующих отдельные компьютерные эксперименты.

Поведение коэффициентов прозрачности (transmissivity) и отражения от потенциальной ступеньки (reflectivity) показано на рисунке 1.

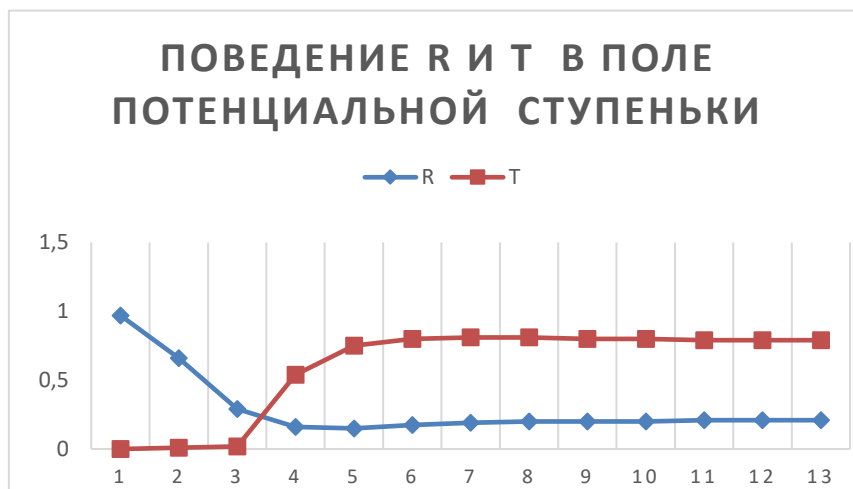


Рисунок 1 – Динамика вероятностей прохождения и отражения от потенциальной ступеньки

Время в компьютерном эксперименте измеряется в наносекундах. Длительность процесса туннелирования имеет порядок величины  $10^{-16}$  секунд.

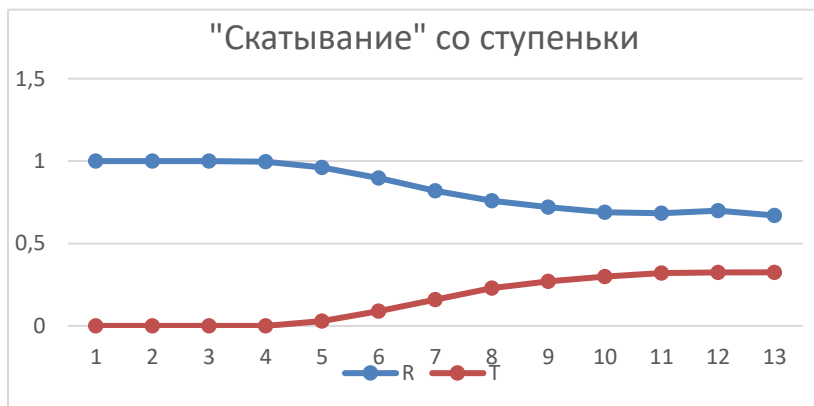


Рисунок 2 – «Скатывание» в потенциальную яму

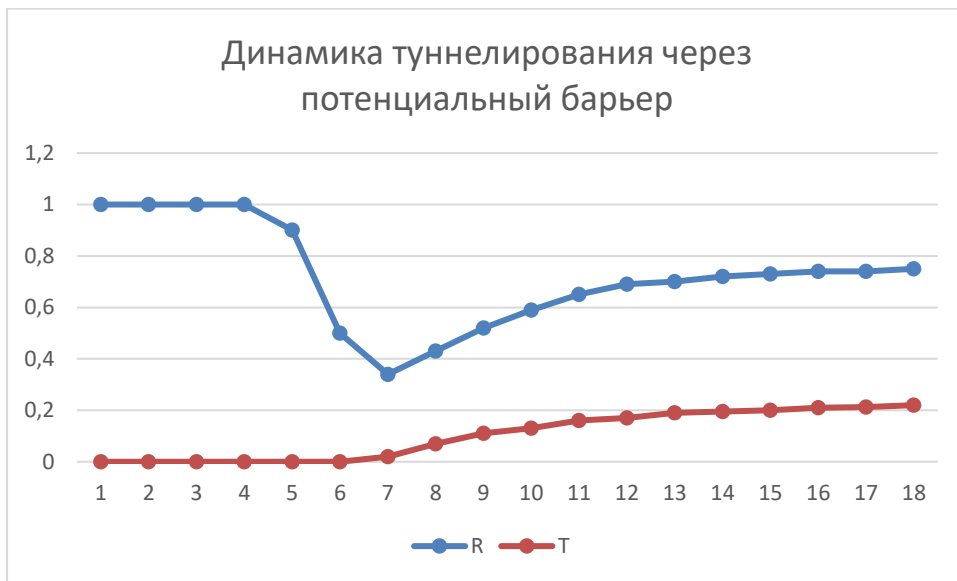


Рисунок 3 – Туннельный эффект в случае  
 $a = 2 \text{ \AA}, E = 40 \text{ eV}, U = 41 \text{ eV}$

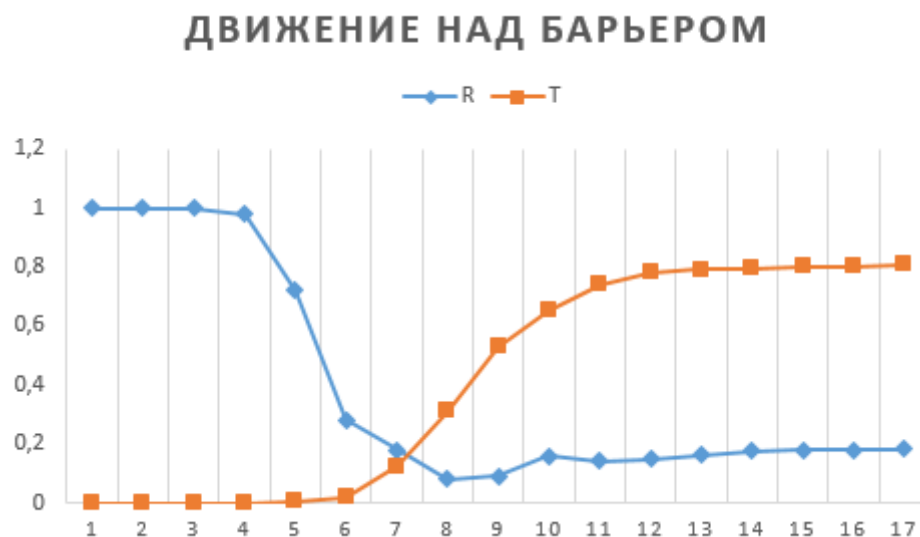


Рисунок 4 – Надбарьерное отражение для случая  
 $a = 2 \text{ \AA}, E = 70 \text{ eV}, U = 41 \text{ eV}$



Рисунок 5 – Динамика вероятностей прохождения и отражения от ямы  
 $U = -30 \text{ eV}, E = 50 \text{ eV}$

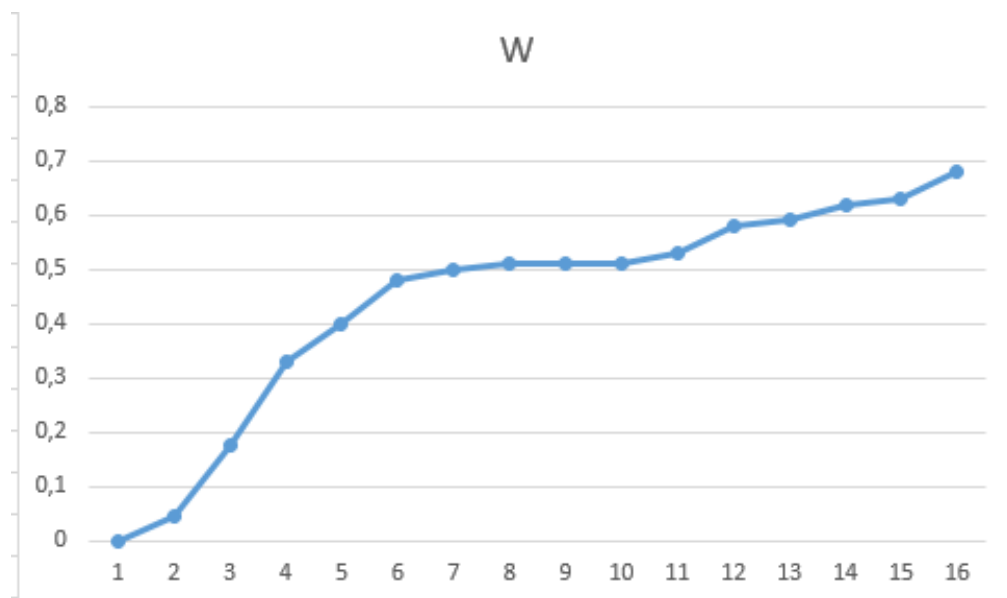


Рисунок 6 – Вероятность распада связанного состояния как функция времени



## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### Компетенции, формируемые при изучении барьерных эффектов

ЗНАТЬ	УМЕТЬ	ВЛАДЕТЬ
1. Стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера.	1. Выявлять преимущество использования нестационарного уравнения Шрёдингера для компьютерного моделирования барьерных эффектов.	1. Способами представления результатов компьютерного эксперимента (на заключительном семинаре).
2. Понятие потенциального барьера и потенциальной ямы.	2. Предсказывать возможные квантовые эффекты при движении частицы через потенциальную ступеньку.	2. Методами теоретического анализа барьерных эффектов (на коллоквиуме).
3. Туннельный эффект.	3. Объяснять поведение микрочастицы в потенциальном поле прямоугольного барьера.	3. Методикой обоснования поведения микрочастицы в квантовой яме на основе результатов компьютерного эксперимента.
4. Надбарьерное рассеяние.	4. Устанавливать влияние параметров потенциала и начальной ширины волнового пакета на возможности квантового туннелирования.	4. Способами обоснования возникновения резонансов прозрачности в комбинированных потенциальных структурах.
5. Коэффициенты прозрачности и отражения.	5. Объяснять поведение микрочастицы в поле потенциальной ямы.	

Таблица 3 – Формулировка компетенций

## ПРИЛОЖЕНИЕ 3

### Чек-лист успешности усвоения знаний

Студент	Теоретические вопросы														Семинар	Коллоквиум	Кoeff. успешн.	1	2	3	Кoeffиц. сформир. компетенций
	До компьютерного эксперимента						После компьютерного эксперимента											Уровень ЗНАТЬ	Уровень Уметь	Уровень ВЛАДЕТЬ	
Максимальный балл						Максимальный балл								max	max	K <sub>y</sub>	Число заданий			1	
№1	№2	№3	№4	№5	K <sub>y</sub>	№1	№2	№3	№4	№5	№6	№7	K <sub>y</sub>				5	5	4		
1	1	1	1	1		1	1	1	1	1	1	1		5	5						
1	1	1	0,5	0,5	0,6	0,72	1	1	0,7	0,5	1	1	1	0,88571429	1	1	0,92942857	1	1	0,8	0,928
2	1	1	1	0,6	0,7	0,86	0,6	0,7	0,5	0,9	0,3	1	0,5	0,64285714		0,8	0,48971429	0,6	0,6	0,6	0,6
3	1	1	0,5	0,5	0,8	0,76	1	0,3	1	1	0,7	1	0,5	0,78571429		1	0,56042857	0,6	0,6	0,6	0,6
4	1	1	0,5	1	0,8	0,86	1	1	1	0,8	1	1	1	0,97142857	1	1	0,97185714	1	0,8	0,8	0,872
5	1	1	0,5	0,5	0,5	0,7	1	1	1	0,5	1	1	0,9	0,91428571		1	0,58357143	0,8	1	0,6	0,784
6	1	1	0,5	0,5	0,6	0,72	1	0,6	1	0,3	0,6	1	0,9	0,77142857	1	0,8	0,85085714	1	0,6	0,8	0,816
7	1	1	0,5	0,5	0,5	0,7	1	0,2	1	0,3	1	1	0,9	0,77142857		0,8	0,49785714	0,8	0,6	0,6	0,672
8	1	1	0,8	0,5	0,9	0,84	1	0,3	0,7	0,5	1	1	1	0,78571429	1	0,6	0,82242857	0,8	0,8	0,8	0,8
9	1	1	0,5	0,5	0,5	0,7	1	0,3	1	0,5	1	1	1	0,82857143	1	0,8	0,86214286	0,6	0,6	0,8	0,672
10	1	1	0,5	0,5	0,6	0,72	1	0,7	1	0,5	1	1	0,8	0,85714286	1	0,8	0,87228571	0,8	0,8	0,8	0,8
11	1	1	0,5	0,5	0,6	0,72	1	0,3	1	0,8	0,7	1	1	0,82857143	1	1	0,91514286	0,8	0,6	0,8	0,744
12	1	1	0,5	0,3	0,7	0,7	1	0,5	1	0,5	1	1	0,9	0,84285714	1	0,8	0,86571429	0,8	0,8	0,8	0,8
13	1	1	0,5	0,3	0,7	0,7	1	0,3	0,7	0,5	1	1	1	0,78571429	1	0,8	0,85142857	0,8	0,8	0,8	0,8
14	1	1	0,3	0,5	0,6	0,68	1	0,3	1	0,5	0,3	1	1	0,72857143	1	0,8	0,83414286	1	0,6	0,8	0,816
15	1	1	0,5	0,3	0,7	0,7	1	0,3	1	0,3	1	1	1	0,8	1	0,8	0,855	1	0,8	0,8	0,872

Таблица 4 – Чек-лист успешности усвоения знаний