Цымбалов Денис Сергеевич
старший преподаватель
Цымбалова Виктория Михайловна
магистрант
ФГБОУ ВО «Донской государственный
технический университет»
г. Ростов-на-Дону, Ростовская область

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ МИКРОСИСТЕМ: СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТРЕУГОЛЬНОЙ ЯМЕ

***Аннотация**: в данной статье детально изучены решения уравнения Шредингера для симметричного и асимметричного треугольных потенциалов, актуальные в физике элементарных частиц и физике полупроводников. В исследовании использовались аналитические и численные методы, интегрированные в современные вычислительные пакеты. Разработку предполагается внедрить в учебный процесс вуза по дисциплине «Теоретические основы микроэлектроники».*

***Ключевые слова**: частица, треугольный потенциал, функция, краевая задача.*

Объектом исследования выберем задачу о микрочастице в потенциальном поле. Особенностью таких задач является то, что в зависимости от запаса энергии частица может быть как локализована в пространстве, так и совершать инфинитное движение. Характер локализации в большей или меньшей степени отличается от такового в классической механике и определяется видом потенциала. Здесь ограничимся рассмотрением двух треугольных связывающих потенциалов $U(x)$, которые имеют непосредственное отношение к реальным объектам или же представляют заметный методический интерес.

Треугольная асимметричная потенциальная яма. В физике полупроводников представляет интерес следующая постановка краевой задачи для уравнения Шредингера (УШ):

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+(E-q\varepsilon x)\cdot\psi(x)=0,\quad 0\le x\le\infty,\quad \psi(0)=\psi(\infty)=0. \qquad (1)$$

Несимметричный треугольный потенциал отражает действие электричекого поля напряженностью ε на заряд q (см. рисунок 1).

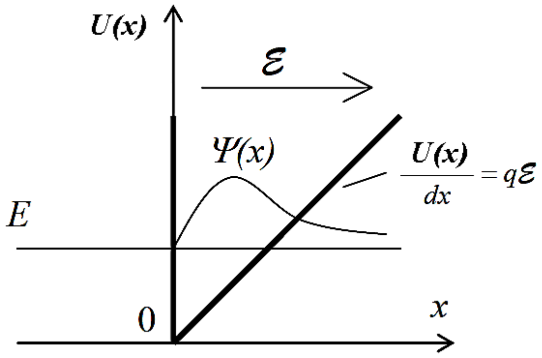

Рис. 1. Несимметричный треугольный потенциал в краевой задаче для УШ

Уравнение (3.1) линейной заменой переменных приводится к виду:

$$y''(x) - x \cdot y(x) = 0 \quad . \tag{3.2}$$

Решением последнего служит специальная функция Эйри, связанные с функциями Бесселя порядка -2/3, -1/3, 1/3 и 2/3 (рис. 2).

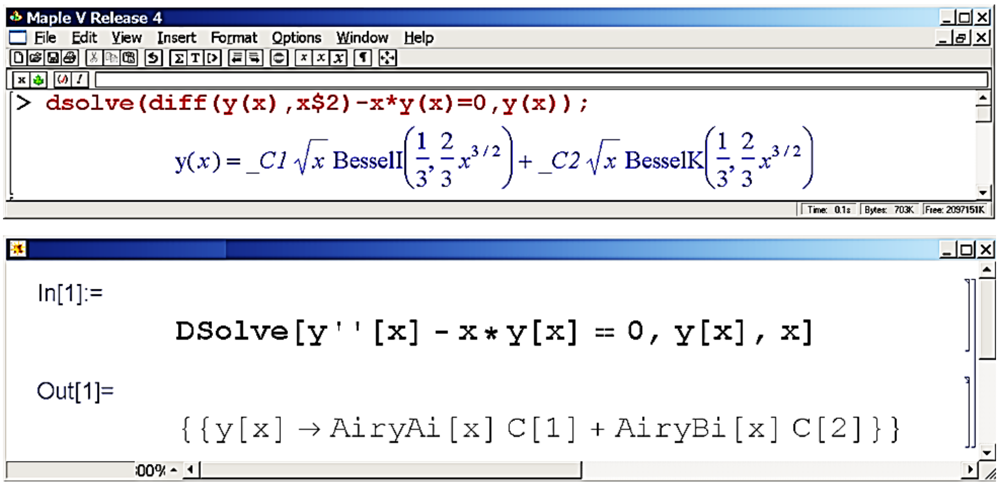

Рис. 2. Решение краевой задачи для УШ в постановке (2)

В исходных физических переменных соответствующее решение имеет вид:

$$\psi(x) = A \cdot \mathrm{Ai}[(\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2})^{1/3} \cdot (q \cdot \varepsilon \cdot x - E_n)] \ , \quad E_n = -(\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2})^{1/3} a_n \ , \tag{3}$$

где a_n – нули функции Эйри. Характер решения показан на рисунке 3.

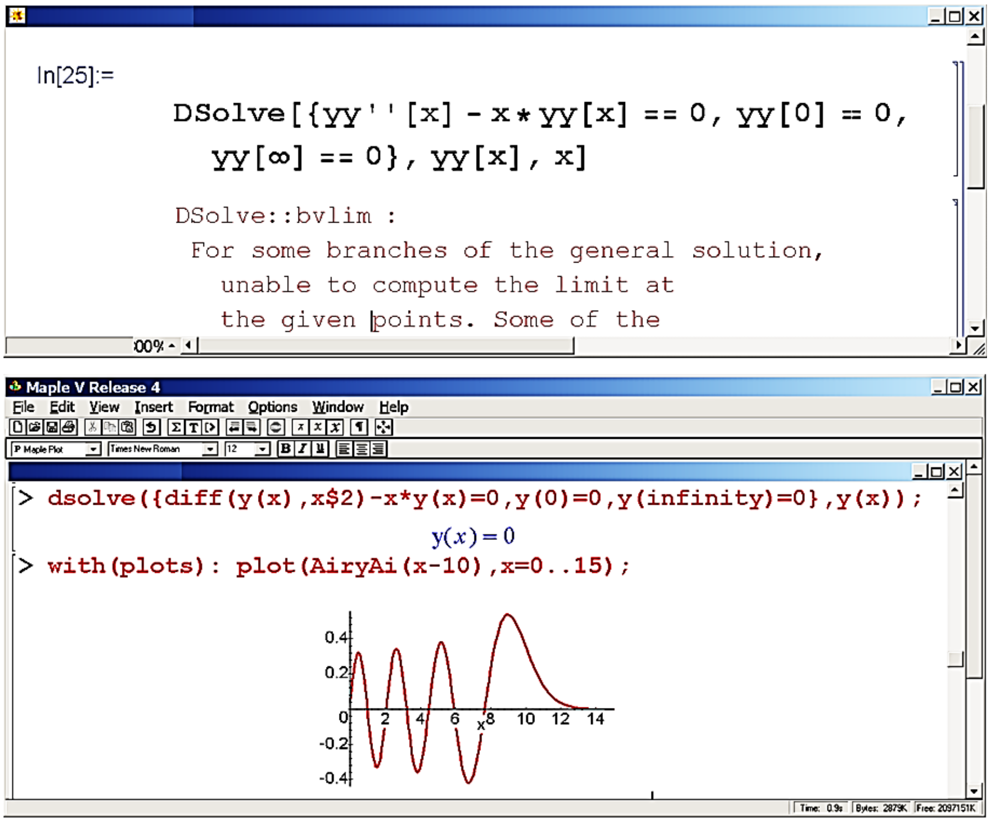

Рис. 3. Волновая функция – решение краевой задачи для УШ в постановке (2)

Практически определить нули функции Эйри и соответственно собственные значения задачи (2) можно приближенно, воспользовавшись асимптотическими формулами:

$$a_n \approx -[\frac{3\pi}{2}\cdot(n-\frac{1}{4})]^{2/3}, \quad E_n \approx (\frac{2m}{\hbar^2 q^2 \varepsilon^2})^{1/3}\cdot[\frac{3\pi}{2}\cdot(n-\frac{1}{4})]^{2/3}, \quad n=1,2,... \qquad (4)$$

Несколько младших волновых функций задачи (2) показаны на рисунке 4.

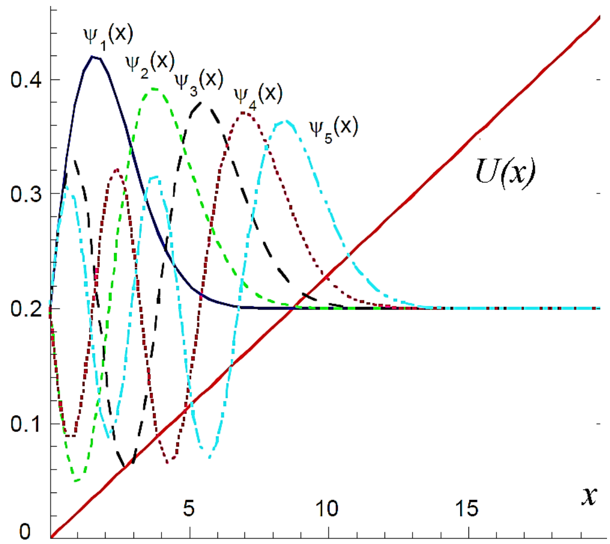

Рис. 4. Решения УШ с асимметричным треугольным потенциалом

Треугольная симметричная потенциальная яма. Отличие данной математической постановки от предыдущей в бесконечной области определения искомых решений. Потенциальная функция при этом задается формулой $U(x) = k\cdot|x|$. Оказалось, что постановка:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+(E-k\cdot|x|)\cdot\psi(x)=0,\quad -\infty\le x\le\infty,\quad \psi(-\infty)=\psi(\infty)=0, \tag{5}$$

описывает взаимодействие субэлементарных частиц (кварков). Очевидно, здесь по сравнению с предыдущей постановкой возникают еще четные решения $\psi(x)$, удовлетворяющие условию $\psi'(0) = 0$. Объединяет четные и нечетные решения (5) формула:

$$\psi(x)\approx A\cdot \mathrm{Ai}[(\frac{2m}{\hbar^2k^2})^{1/3}\cdot(k\cdot|x|-E_n)],\quad E_n\approx(\frac{2m}{\hbar^2k^2})^{1/3}\cdot[\frac{3\pi}{2}\cdot(n-\frac{1}{4})]^{2/3}, \tag{6}$$

$$E_n\approx(\frac{2m}{\hbar^2k^2})^{1/3}\cdot[\frac{3\pi}{2}\cdot(n-\frac{2}{4})]^{2/3},$$

где первая последовательность E_n отвечает нечетным решениям, вторая – четным.

При вычислениях функцию Эйри можно заменить асимптотическими:

$$\mathrm{Ai}(x<0)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cdot(-x)^{-1/4}\cdot\sin(-2/3\cdot x\sqrt{-x}),\quad \mathrm{Ai}(x>0)\approx\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\cdot x^{-1/4}\cdot e^{-2/3\cdot x\sqrt{x}}. \tag{7}$$

Качество приближения (7) показано на рис. 5.

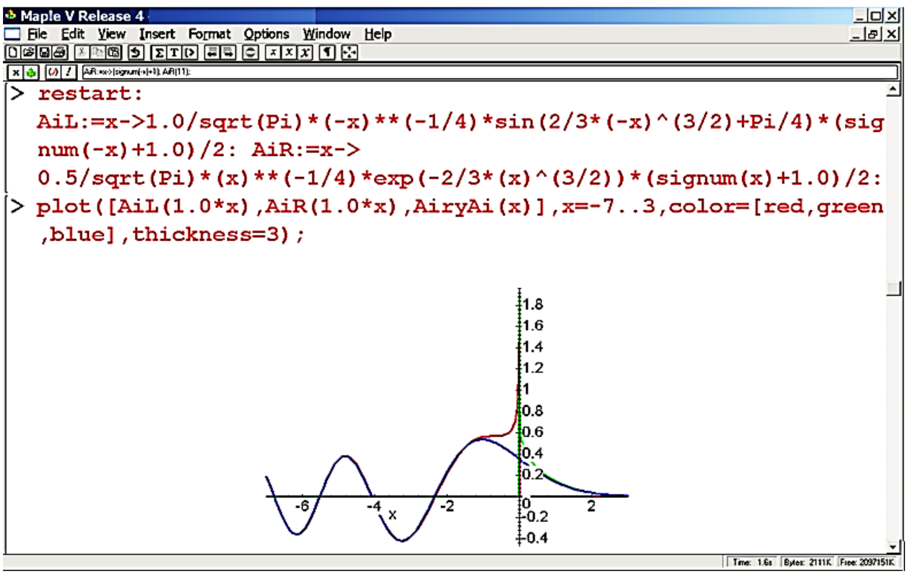

Рис. 5. Асимптотическое поведение функции Эйри

Рассмотрены краевые задачи для уравнения Шрёдингера с актуальными для науки и техники потенциалами: асимметричным и симметричным треугольными потенциалами.

Список литературы

1. Fowler M. Schrödinger's Equation in 1-D: Some Examples [Электронный ресурс]. – Режим доступа: galileo.phys.virginia.edu/classes/751.mf1i.fall02/OneDimSchr.htm

2. Lucha W. Solving the Schroedinger equation for bound states with Mathematica 3.0 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://library.wolfram.com/infocenter/Articles/2455

3. Майер Р.В. Использование компьютерных моделей при изучении квантовой физики [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://cdn.scipeople.com/materials/57195/Mayer_Komp_mod_mikcromir_ DL.pdf