

Расчет параметров произвольных квантовых систем на основе реализованного алгоритма поиска собственных значений и собственных функций для уравнения Шрёдингера

Н.В. Юдина, А.В. Апороски, Н.Р. Садыков

Снежинский физико-технический институт Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

E-mail: y_natalya@mail.ru

Аннотация

На основе двухслойной разностной схемы с весами, аппроксимирующей нестационарное уравнение Шрёдингера, был реализован алгоритм поиска собственных значений собственных функций в случае неявной схемы ($\sigma=1$). В качестве примера квантовых систем рассмотрены квантовые ямы с произвольными профилями потенциальной энергии. Проведено сравнение результатов численных решений с аналитическими результатами решения уравнения Шрёдингера.

Введение

Существует большое число методов, позволяющих определить собственные значения и собственные функции (векторы) различных мод [1, 2]. В случае самосопряженного (или эрмитово сопряженного) оператора собственные значения являются вещественными величинами. В этом случае говоря о симметричной проблеме собственных значений. В случае несамосопряженного оператора говорят о несимметричной проблеме собственных значений. Одним из таких методов определения собственных значений и собственных функций является модифицированный метод обратных итераций (или модифицированный метод Виландта [3]). В данной работе показано, что на основе двухслойной разностной схемы с весами, аппроксимирующей нелинейное двумерное (время плюс пространственная координата) уравнение Шрёдингера, реализуется алгоритм поиска собственных значений собственных функций в случае неявной схемы ($\sigma = 1$).

Реализованную программу можно использовать для моделирования процессов в наноструктурах: применительно к гетероструктурам (например, в каскадных лазерах [4, 5]) и к периодическим потенциальным полям [6] данный алгоритм можно использовать для определения собственных значений и собственных функций симметричной и антисимметричной мод для системы из двух потенциальных ям; применительно к квантовым точкам [7] рассмотреть задачу поиска собственных функций и собственных значений энергии для потенциальных полей с произвольным профилем (за счет взаимодействия электронов реализуется потенциальное поле с произвольным профилем, которые заведомо не имеют аналитических решений для мод) и т. д. Реализованный в работе алгоритм может быть полезным, например, при рассмотрении задач из работ [8]. В [8] рассмотрена одномерная квазирелятивистская проблема кулоновского взаимодействия атомного уровня для гамильтониана Дирака, записанного в виде матрицы 2×2 . Рассмотренная в [8] задача аналогична задаче движения спиновой частицы (электрона) в кулоновском поле [9, 10].

Реализованный в этой работе алгоритм определенным образом аналогичен реализованному в [11, 12] алгоритму для световодов цилиндрической формы. Были проведены расчеты параметров одномодовых и многомодовых световодов [11, 12]. Работа [11] является обобщением работы [12]. В [11] на основе численного решения нестационарного скалярного волнового уравнения предложен итерационный метод определения собственных значений и собственных функций LP_{lm} -мод, где $l = 1, 2, \dots, m = 1, 2, \dots$. На основе реализованного метода рассчитаны пятно моды и частота отсечки мод для световодов со степенными профилями показателя преломления [11]. Результаты расчетов сравниваются с результатами расчетов на

основе модели эквивалентного ступенчатого профиля показателя преломления [13, 14, 15]. В работе [12] в отличие от [11] рассмотрены только моды с $l = 1$.

Предложенный в работе метод определения собственных значений и собственных векторов аналогичен процессу нахождения их в методе Виландта [3]. Одним из достоинств такого метода является то, что он позволяет вычислить не весь спектр собственных значений, а только интересующие нас (задача является актуальной для квантовых точек с малым числом стационарных состояний).

Численные методы решения задачи

Будем искать решение волновой функции в виде:

$$\Phi(t, x) = \Psi(t, x) \exp(-iE/\hbar), \text{ где } E = \text{const.}$$

В результате для планарного случая получаем одномерное нестационарное уравнение Шрёдингера с соответствующими краевыми и начальным условиями:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\perp} \Psi + U(x) \Psi, \\ -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}, \quad \Psi\left(t, x = \pm \frac{L}{2}\right) &= 0, \quad \Psi(t=0, x) = f(x), \end{aligned} \quad (1)$$

где m_e – масса электрона, \hbar – постоянная Планка, для планарного (плоского) случая $\Delta_{\perp} = \partial^2 / \partial x^2$, $f(x)$ – регулярная функция от переменной x .

Для уравнения (1) на отрезках $-L/2 \leq x \leq L/2$ и $0 \leq t \leq t_0$ введем равномерную сетку:

$$\omega_h = \begin{cases} x_i = ih - L/2, & i = 0, 1, 2, \dots, i_{\max}, \quad h = L/i_{\max}, \\ t_j = j\tau, & j = 0, 1, 2, \dots, j_{\max}, \quad \tau = t_0/j_{\max}, \end{cases} \quad (2)$$

и аппроксимируем нестационарное уравнение Шрёдингера (1) двухслойной разностной схемой [16]:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi^j(i) - \Psi^{j-1}(i)}{\tau} &= -\frac{i}{\hbar} \delta \hat{A} (\sigma \Psi^j(i) + (1 - \sigma) \Psi^{j-1}(i)), \\ \Psi^j(i=0) &= 0, \quad \Psi^j(i=i_{\max}) = 0, \quad \Psi^{j=0}(i) = f_i, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Psi^j(i) = \Psi(t = t_j, x = x_i)$ – сеточная функция, $0.5 < \sigma \leq 1$, $\delta \hat{A}$ – разностный аналог дифференциального оператора $\delta \hat{H} = \hat{H} - E \hat{I}$.

$$\delta \hat{A} \Psi^j(i) = \left(\frac{\Psi^j(i-1) - 2\Psi^j(i) + \Psi^j(i+1)}{h^2} + U_i \Psi^j(i) \right) - E \Psi^j(i), \quad (4)$$

где \hat{I} – единичный оператор, $U_i = U(x = x_i)$. Поскольку матрица $\delta \hat{A}$ является самосопряженной, то собственные значения матрицы будут вещественными величинами.

Решение будем искать в виде линейной комбинации собственных мод Ψ_m .

$$\Psi^j(i) = \sum_m C_m^j \Psi_m(i), \quad (5)$$

где C_m^j – коэффициенты разложения сеточной функции $\Psi_m(i)$

Несложно показать, что при $\sigma = 1$:

$$C_m^j = \frac{1}{1 - i\tau(E_m - E)} C_m^{j-1}. \quad (6)$$

Результаты численных расчётов

Была написана программа, позволяющая в соответствии с вышеописанной теорией реализовать для неявной разностной схемы ($\sigma=1$) алгоритм поиска собственных значений энергии и собственных функций четных и нечетных мод в потенциальных ямах со степенными профилями:

$$U(x) = \begin{cases} U_0(1 - (2x/l)^\alpha), & |x| \leq l/2, \\ 0, & l/2 \leq |x| \leq L/2. \end{cases} \quad (7)$$

где α – показатель степени, $l = 10 \text{ nm}$ – ширина потенциальной ямы, $L = 2l$, $U_0 = -1 \text{ eV}$.

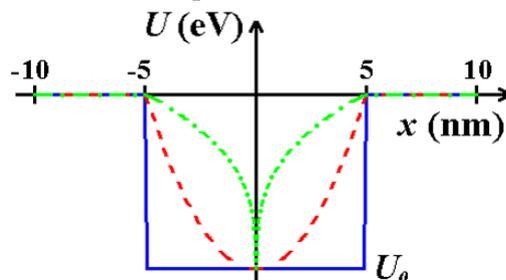


Рис. 1. Профили потенциальных ям: сплошная кривая – прямоугольная потенциальная яма $\alpha \rightarrow \infty$; штриховая кривая – потенциальная яма с параболическим профилем $\alpha = 2$; штрихпунктирная кривая – потенциальная яма со степенным профилем $\alpha = 1/3$.

В таблице 1 приведены собственные значения энергии для мод в прямоугольной потенциальной яме, которые вычислялись численно (2-ой и 4-ый столбцы), и вычисленные аналитически в соответствии с (8) (3-ий и 5-ый столбцы).

$$E_m = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\pi^2}{l^2} m^2, \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad (8)$$

где m – номер моды.

Таблица 1

Номер моды, m	Расчетные собственные значения энергии нечётной моды, $E_m^{\text{неч}}$, eV	Результаты аналитических собственных значений энергии нечетной моды, $E_m^{\text{неч}}$, eV	Расчетные собственные значения энергии чётной моды, $E_m^{\text{чет}}$, eV	Результаты аналитических собственных значений энергии четной моды, $E_m^{\text{чет}}$, eV
1	-0,9845832	-0,9845833	-0,9951257	-0,9951257
2	-0,9424867	-0,9424876	-0,9670287	-0,9670287
3	-0,8725912	-0,8725998	-0,91099225	-0,9109932
4	-0,7753135	-0,7753702	-0,8273413	-0,8273414
5	-0,6512876	-0,6515511	-0,7165940	-0,7166500
6	-0,5014618	-0,5024415	-0,579523	-0,5798362
7	-0,3273863	-0,3308135	-0,4173164	-0,4181811
8	-0,1325459	-0,1327263	-0,2321477	-0,2496604
9			-0,0317866	-0,0318298

На рис. 2 и 3 для случая с прямоугольной потенциальной ямой приведены нормированные на единицу расчетные зависимости (сплошные кривые) распределения плотности вероятностей 1-ой, 2-ой и 3-ей нечетных и четных мод. Маркеры соответствуют аналитическим решениям в бесконечно глубокой потенциальной яме (функции синуса или косинуса).

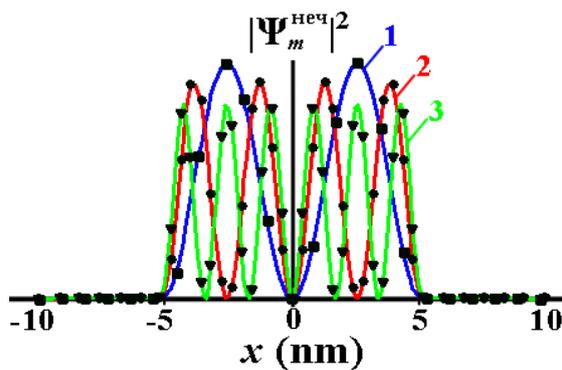


Рис. 2. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{неч}}|^2$ нечетных мод от x : синяя сплошная кривая 1 соответствует первой нечетной моде $m=1$; красная сплошная кривая 2 соответствует второй нечетной моде $m=2$; зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей нечетной моде $m=3$. Метки \blacksquare , \bullet и \blacktriangledown – соответствуют аналитическим решениям для тех же мод.

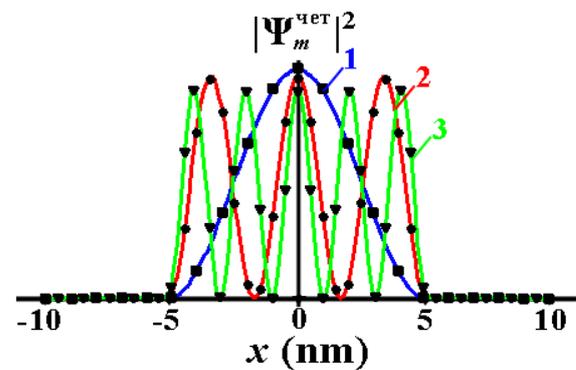


Рис. 3. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{чет}}|^2$ четных мод от x : синяя сплошная кривая 1 соответствует первой четной моде ($m=1$); красная сплошная кривая 2 соответствует второй четной моде ($m=2$); зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей четной моде ($m=3$). Метки \blacksquare , \bullet и \blacktriangledown – соответствуют аналитическим решениям для тех же мод.

В случае бесконечно глубокой потенциальной ямы с параболическим профилем собственные функции и собственные значения энергии являются решениями обобщенного гипергеометрического уравнения:

$$\Psi_m = C_m \phi(x) H_m \left(\frac{(-8mU_0)^{1/4}}{\sqrt{\hbar l}} x \right), \quad \phi = \exp \left(-\frac{\sqrt{-2mU_0}}{\hbar l} x^2 \right), \quad (9)$$

$$E_m = U_0 + \frac{2\sqrt{-2mU_0}}{\hbar l} (2n+1),$$

где $H_m(z)$ – полином Эрмита, постоянная величина C_m определяется из условия нормировки.

В таблице 2 приведены собственные значения энергий для мод в потенциальной яме с параболическим профилем. Во втором и четвертом столбцах таблицы приведены расчетные собственные значения энергий мод, в третьем и пятом аналитические собственные значения энергий.

Таблица 2

Номер моды, m	Расчетные собственные значения энергии нечётной моды, $E_m^{\text{неч}}$, eV	Результаты аналитических собственных значений энергий нечетной моды, $E_m^{\text{неч}}$, eV	Расчетные собственные значения энергии чётной моды, $E_m^{\text{чет}}$, eV	Результаты аналитических собственных значений энергий четной моды, $E_m^{\text{чет}}$, eV
1	-0.8821783	-0.8821783	-0.9598037	-0.9598037
2	-0.7272280	-0.7272280	-0.80465298	-0.80465298
3	-0.5726801	-0.5726801	-0.6499036	-0.6499036
4	-0.4185401	-0.4185401	-0.49555796	-0.49555796
5	-0.2649082	-0.2649082	-0.3416393	-0.3416393
6	-0.1132136	-0.1132136	-0.1885409	-0.1885409
7			-0.04153679	-0.0415367

На рис. 4 и 5 приведены нормированные на единицу расчетные зависимости (сплошные кривые) распределения плотности вероятностей 1-ой, 2-ой и 3-ей нечетных и четных мод в потенциальной яме с ограниченным параболическим профилем. Маркеры соответствуют аналитическим решениям в бесконечно глубокой потенциальной яме с параболическим профилем.

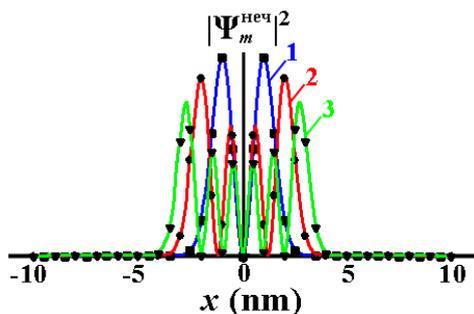


Рис. 4. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{неч}}|^2$ нечетных мод от x для потенциальной ямы параболического профиля: синяя сплошная кривая 1 соответствует первой нечетной моде ($m=1$); красная сплошная кривая 2 соответствует второй нечетной моде ($m=2$); зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей нечетной моде ($m=3$). Метки \blacksquare , \bullet и \blacktriangledown – соответствуют аналитическим решениям (9) для тех же мод.

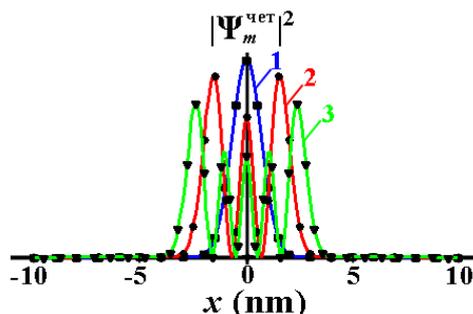


Рис. 5. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{чет}}|^2$ четных мод от x для потенциальной ямы параболического профиля: синяя сплошная кривая 1 соответствует первой четной моде ($m=1$); красная сплошная кривая 2 соответствует второй четной моде ($m=2$); зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей четной моде ($m=3$). Метки \blacksquare , \bullet и \blacktriangledown – соответствуют аналитическим решениям (9) для тех же мод.

Для потенциальной ямы со степенным профилем $1/3$ получены только расчетные результаты. Собственные значения энергии мод приведены в таблице 3

Таблица 3

Номер моды, m	Расчетные собственные значения энергии нечётной моды, $E_m^{\text{неч}}$, eV	Расчетные собственные значения энергии чётной моды, $E_m^{\text{чет}}$, eV
1	-0.36131068	-0.59316118
2	-0.19304497	-0.27610407
3	-0.08345064	-0.1394252
4	-0.004826105	-0.04323956

В случае такого профиля потенциальной энергии число мод меньше, чем для выше приведенных профилей (четыре нечетных и четыре четных мод (см. рис. 6 и 7)).

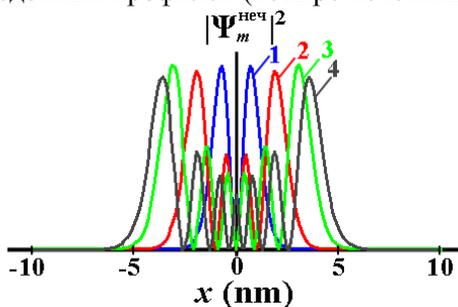


Рис. 6. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{неч}}|^2$ нечетных мод от x для потенциальной ямы со степенным профилем $1/3$: синяя сплошная кривая 1 соответствует первой нечетной моде ($m=1$); красная сплошная кривая 2 соответствует второй нечетной моде ($m=2$); зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей нечетной моде ($m=3$); серая сплошная кривая 4 соответствует четвертой нечетной моде ($m=4$).

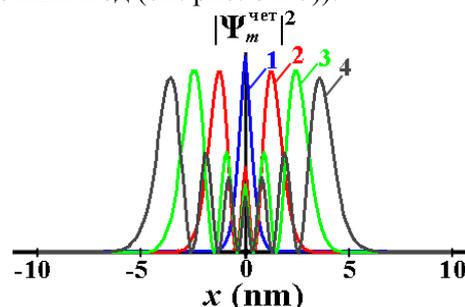


Рис. 7. Зависимость нормированных волновых функций $|\Psi_m^{\text{чет}}|^2$ четных мод от x для потенциальной ямы со степенным профилем $1/3$: синяя сплошная кривая 1 соответствует первой четной моде ($m=1$); красная сплошная кривая 2 соответствует второй четной моде ($m=2$); зеленая сплошная кривая 3 соответствует третьей четной моде ($m=3$); серая сплошная кривая 4 соответствует четвертой четной моде ($m=4$).

Заключение

При аппроксимации нестационарного уравнения Шрёдингера двухслойной разностной схемой с весами σ при $\sigma = 1$ реализуется алгоритм поиска собственных значений и собственных функций в одномерной потенциальной яме (планарный случай).

Результаты расчетов совпали с известными аналитическими результатами для потенциалов со степенными профилями. Это позволяет нам использовать эту программу для задач с произвольными профилями потенциальных ям.

Предлагается обобщить рассмотренный алгоритм на потенциальные поля с цилиндрической и сферической формами.

Список литературы:

1. Х. Д. Икрамов. Несимметричная проблема собственных значений: Перевод с английского- М.: Мир, 1983.
2. Б. Парлет. Симметричная проблема собственных значений: Перевод с английского- М.: Мир, 1983.
3. H. Wielandt. *Math. Z.*, 1944, v. 60, p. 93-143
4. Kazarinov R. F., Suris R.A.: Possibility of amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice. *Fiz. Tekh. Poluprov.* 5, 797–800 (1971).
5. N. R. Sadykov, A. V. Aporoski, D. A. Peshkov. Terahertz radiation generation process in the medium based on the array of the noninteracting nanotubes.// *Opt. Quant. Electron.*, V. 48:358 (2016).
6. С.-Н. Park, L. Yang, Y.-W. Son, M. L. Coohen and S. G. Louie, *Nature Physics*, V. 4, 213 (2008).
7. Бугров В. Е., Константинов, О. В. Учет кулоновского взаимодействия электронов и дырок в квантовых точках на основе InGaN // *Физика и техника полупроводников* 1998. Т. 32. № 10. С. 1235.
8. С. А. Downing, М. Е. Portnoi, *Phys. Rev. A* 90, 052116 (2014).
9. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. *Квантовая электродинамика* (М.: Наука, 1989, 728 с.).
10. А. Ф. Никифоров, В. Б. Уваров, *Специальные функции математической физики*, Физматлит, М., 1978.
11. А. Н. Афанасьев, Л. А. Мяслицин, Н. Р. Садыков, М. О. Садыкова. Численный метод определения частоты отсечки и пятна моды световодов. *Известия Высших Учебных Заведений. Физика*, т. 48, №1, с.11-16 (2005).
12. Ардашева Л. И., Садыков Н. Р., Черняков В. Е., // *Квантовая электроника*, т. 19, с. 903 (1992).
13. Гурджи С. П., Каток В. Б. // *Радиотехника*, №3, с. 64 (1989).
14. Marcuse D. // *J. Opt. Soc. Am.*, v. 68, № 1, p. 103-109 (1978).
15. Белов А. В., Дианов Е. М., Игнатъев С. В. и др. Сравнение различных методов измерения параметров эквивалентного ступенчатого профиля ОВС // *Квантовая электроника*. 1981. Т. 8, № 8, С. 1802.
16. А. А. Самарский, *Теория разностных схем*, Наука, М., 1989.