
Математическое моделирование

УДК 51-72:530.145

Модели квантовых ям низкоразмерных структур в виде ангармонических осцилляторов с двумя и тремя минимумами

И. Н. Беляева*, Н. А. Чеканов†

* *Кафедра математического анализа
Белгородский государственный университет
ул. Студенческая 14, Белгород, 308007, Россия*

† *Кафедра физики
Старооскольский технологический институт
Национального исследовательского технологического университета МИСиС
м-н Макаренко, 42, Старый Оскол, 309516, Россия*

Символьно-численным методом решено одномерное уравнение Шрёдингера с потенциалом с двумя и тремя ямами в виде степенных рядов. В зависимости от параметров потенциала вычислены энергетические спектры и волновые функции. Показано, что величина расщепления энергетических уровней из-за эффекта туннелирования чрезвычайно чувствительна к форме потенциальной функции.

Ключевые слова: наноструктуры, квантовые ямы, уравнение Шрёдингера, ангармонические осцилляторы, размерное квантование, степенные ряды, волновые функции, энергетический спектр, избегнутые пересечения.

1. Введение

В настоящее время объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований являются твердотельные наноструктуры (см. например, [1–3]), в которых движение электронов ограничено, и в результате существенно меняются большинство электронных свойств из-за возникновения так называемых размерных эффектов. Свободные электроны оказываются локализованными в одном, двух или трёх направлениях в области с размерами порядка дебройлевской длины волны и поэтому необходимо использовать законы квантовой механики. Энергетический спектр из-за ограниченного пространства движения становится дискретным.

Например, при соединении двух или более полупроводников с различными запрещёнными зонами носители заряда локализованы в плоскости, их движение происходит в так называемых квантовых ямах. Для описания таких систем можно использовать математическую модель как, например, ангармонический осциллятор с несколькими локальными минимумами. Протекание электрического тока из одной ямы в другую происходит из-за туннелирования — чисто квантового эффекта. К таким устройствам относятся, например, резонансные туннельные диоды и триоды. Физические характеристики таких наноструктур крайне чувствительны к спектральным параметрам носителей заряда в потенциальной яме. Положением энергетических уровней, а значит и величиной протекающего электрического тока можно управлять, изменяя нужным образом значения параметров ангармонических осцилляторов. В связи с этим возникает необходимость теоретического исследования энергетического спектра и волновых функций.

Для описания квантовых ям в наноструктурах в настоящей работе рассмотрены потенциалы с двумя и тремя минимумами, для которых решается соответствующее уравнение Шрёдингера. Известно, что если ангармонический потенциал имеет форму двойной ямы, то возникает квазипересечение кривых собственных значений. Следует отметить, что этот эффект является экспоненциально малым относительно высоты барьера [4, 5]. Это означает, что обычная теория возмущений, которая реально является разложением по степеням малого параметра, неспособна правильно описать этот эффект.

Имеются различные методы и подходы, например [6–8], для интегрирования уравнения Шрёдингера. В работе [9] были вычислены энергетические уровни и волновые функции для симметричного двойного потенциала. В работе [3] в квазиклассическом приближении, а в работах [10, 11] на основе уравнения Гойна были получены и исследованы избегнутые пересечения энергетических уровней в асимметричном двухъямном потенциале.

В настоящей работе для асимметричного потенциала с двумя и симметричного с тремя ямами решено уравнение Шрёдингера с использованием степенных рядов и применением системы компьютерной алгебры Maple и проведено исследование зависимости первых энергетических уровней от величины асимметрии.

2. Общая схема решения уравнения Шрёдингера

Пусть дано уравнение

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + F(x, E)\psi(x) = 0, \quad F(x, E) = 2(E - V(x)), \quad (1)$$

где функция $F(x, E)$ может иметь полюс не выше второго порядка в окрестности точки $x = x_0$, которое надо решить на собственные значения E с заданными граничными условиями $\psi(\pm\infty) = 0$.

Для решения задачи (1) на собственные значения вначале находим два линейно независимых решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ задачи Коши

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} + F(x, E)y(x) = 0 \quad (2)$$

со следующими начальными условиями

$$y_1(x_0) = 1, \quad \left. \frac{dy_1(x)}{dx} \right|_{x=x_0} = 0, \quad y_2(x_0) = 0, \quad \left. \frac{dy_2(x)}{dx} \right|_{x=x_0} = 1. \quad (3)$$

Так как в нашей работе потенциальная функция $V(x)$ не содержит особенностей, то решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ ищем в виде следующих степенных рядов

$$y_1(x) = 1 + \sum_{k=2}^N c_k^{(1)}(x - x_0)^k, \quad y_2(x) = (x - x_0) + \sum_{k=2}^N c_k^{(2)}(x - x_0)^k, \quad (4)$$

которые автоматически удовлетворяют начальным условиям (3). Коэффициенты $c_k^{(1)}$ и $c_k^{(2)}$ определяются единственным образом посредством подстановки рядов (4) в уравнение (2) и приравняванием к нулю коэффициентов при различных степенях независимой переменной в левой части полученного равенства.

Как известно (см., например, [12]), общее решение уравнения (2) находится по формуле

$$y(x) = C_1 y_1(x) + C_2 y_2(x), \quad (5)$$

где C_1 и C_2 — произвольные постоянные, которое содержит и решение $\psi(x)$ задачи (1).

Согласно условиям исходной краевой задачи её собственные значения E и собственные функции $\psi(x)$ определяются из следующей однородной линейной системы алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} C_1(E) \cdot \psi_1(-R, E) + C_2(E) \cdot \psi_2(-R, E) &= 0, \\ C_1(E) \cdot \psi_1(+R, E) + C_2(E) \cdot \psi_2(+R, E) &= 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где бесконечный интервал $(-\infty, +\infty)$ редуцируется на отрезок $[-R, +R]$, и величина R является варьируемым параметром.

Нетривиальное решение алгебраической системы (6) определяется из равенства нулю соответствующего детерминанта $D(E)$:

$$D(R, E) = \begin{vmatrix} \psi_1(-R, E) & \psi_2(-R, E) \\ \psi_1(+R, E) & \psi_2(+R, E) \end{vmatrix} = 0, \quad (7)$$

которое выполняется не при всех, а при определённых значениях энергии $E = E_n$, составляющих энергетический спектр уравнения Шрёдингера (1). Для построения волновых функций $\psi_n(x)$ необходимо решить однородную линейную систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} C_1(E_n) \cdot \psi_1(-R, E_n) + C_2(E_n) \cdot \psi_2(-R, E_n) &= 0, \\ C_1(E_n) \cdot \psi_1(+R, E_n) + C_2(E_n) \cdot \psi_2(+R, E_n) &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

относительно $C_1(E_n)$, $C_2(E_n)$ и удовлетворить условию нормировки

$$\int_{-R}^{+R} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (9)$$

Волновые функции представляются аналитически в виде сходящихся степенных рядов с заданным числом членов N .

3. Ангармонический осциллятор с двумя минимумами

Приведённый выше метод был применён для вычисления энергетических уровней и волновых функций асимметричного ангармонического осциллятора четвёртой степени, для которого в уравнении (1) потенциальная функция равна

$$V(x) = -2x^2 + \frac{1}{4}x^4 - px, \quad (10)$$

где p — параметр. На рис. 1 показано поведение потенциальной функции (10) в зависимости от значений параметра p . Этот потенциал был исследован в работе [6] и выбран нами для сравнения.

При помощи разработанной программы EWA [9] для уравнения Шрёдингера (1) с потенциалом (10) найдены энергетические спектры и волновые функции в виде степенных рядов. Вычисленные значения уровней энергии представлены в табл. 1, и их структура в потенциале (10) при двух значениях параметра p показана на рис. 2, а волновые функции нижайших состояний при этих же значениях параметра — на рис. 3, 4.

На рис. 5 приведена зависимость значений энергетических уровней от параметра p в диапазоне от -3 до 3 для асимметричного ангармонического осциллятора (10). Как видно из этого рисунка, в поведении энергетических линий возникают избегнутые пересечения (квазипересечения), для которых величина расщепления

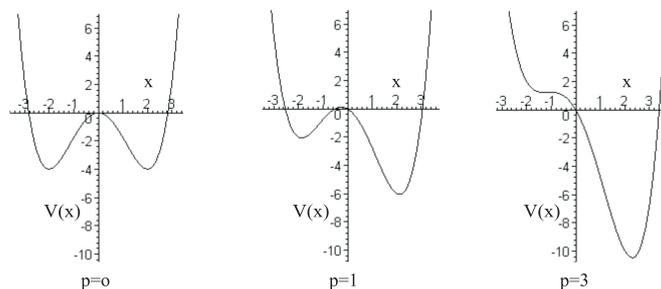


Рис. 1. Поведение потенциальной функции (10) в зависимости от значений параметра p

Таблица 1

Энергетический спектр асимметричного ангармонического осциллятора (10) при различных значениях параметра p при $R = 3.7$, $N = 116$

n	E_n	$p = 0$	$p = 0,5$	$p = 1$	$p = 1,5$	$p = 2$	$p = 2,5$	$p = 3$
0	E_0	-2,6613	-3,5984	-4,5775	-5,5895	-6,6312	-7,7004	-8,7945
1	E_1	-2,6516	-1,7594	-1,8745	-2,7340	-3,6454	-4,6011	-5,5789
2	E_2	-0,5098	-1,0791	-0,9166	-0,4105	-1,0762	-1,8918	-2,6537
3	E_3	-0,1796	0,2082	0,1927	-0,0692	0,4609	0,2269	-0,1346
4	E_4	1,1717	1,0806	1,1259	1,2321	1,0524	1,2551	1,5660
5	E_5	2,3734	2,3971	2,3941	2,3267	2,2676	2,2897	2,5742
6	E_6	3,8617	3,8606	3,8141	3,6282	3,5327	3,7079	4,0931

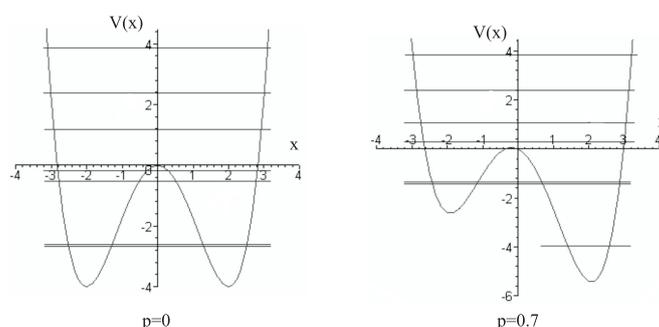


Рис. 2. Структура спектра асимметричного ангармонического осциллятора (10) при $p = 0$ и $p = 0,7$

является экспоненциально малым относительно высоты барьера. Полученная картина поведения энергетических уровней от параметра p полностью согласуется с результатами работы [6], в которой авторы получили эту зависимость только для первых пяти уровней энергии.

Потенциал (10) можно представить в виде $V(x) = \alpha(x^2 - a^2)^2 - px - 4$, при $\alpha = 0,25$ и $a = 2$. Тогда величина расщепления между энергиями основного и первого возбуждённого состояний $\Delta E = E_1 - E_0$ при $p = 0$ может быть вычислена

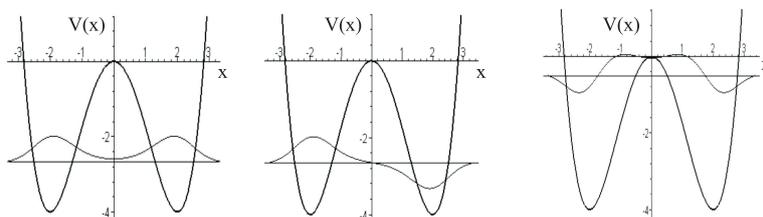


Рис. 3. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (10) для $E_0 = -2,6613$, $E_1 = -2,6516$ и $E_2 = -0,5098$ при $p = 0$

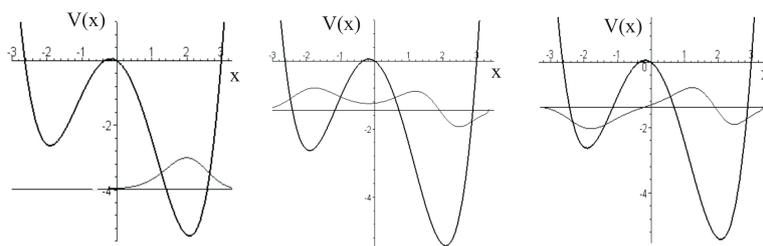


Рис. 4. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (10) для $E_0 = -3,9859$, $E_1 = -1,4373$ и $E_2 = -1,3646$ при $p = 0,7$.

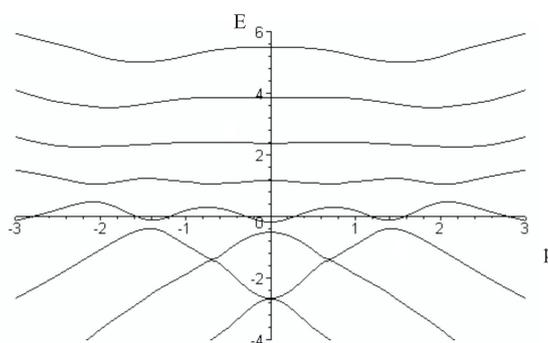


Рис. 5. Зависимость значений энергетических уровней от параметра p асимметричного ангармонического осциллятора (10)

по асимптотической формуле из работ [4, 5]:

$$\Delta E = 16a^2 \left(\frac{2a^2\alpha^3}{\pi^2} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{4}{3}a^3(2\alpha)^{1/2} \right). \quad (11)$$

Из наших расчётов следует, что для потенциала (10) величина расщепления $\Delta E = 0,0097$, в то время как вычисления по формуле (11) приводят к величине равной $0,0114$, отличаюсь на 15%.

Далее рассмотрим ещё один асимметричный ангармонический осциллятор четвёртой степени с двухъямным потенциалом

$$V(x) = \alpha(x^2 - a^2)^2 - px, \quad (12)$$

при $\alpha = 0,8$, $a = 2$, p — параметр. На рис. 6 показано поведение потенциальной функции (12) в зависимости от значений параметра p . Второе слагаемое в потенциале (12) описывает внешнее возмущение, амплитуда которого управляет положением энергетических уровней.

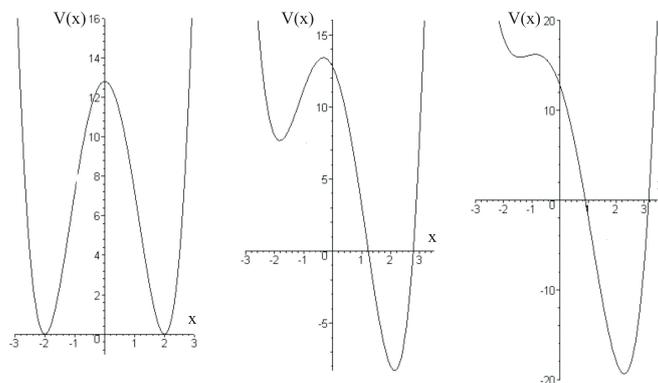


Рис. 6. Поведение потенциальной функции (12) в зависимости от значений параметра p

При помощи той же символьно-численной программы [9] для уравнения Шрёдингера (1) с функциями (12) найдены волновые функции в виде степенных рядов и энергетические спектры, представленные в табл. 2.

Заметим, что для симметричного потенциала с двойной ямой (12) величина расщепления между уровнями энергии основного и первого возбуждённого состояний, полученная в нашей работе, равна $\Delta E = 0,000066$, в то время как эта величина, вычисленная по формуле (11), равна $\Delta E = 0,000070$ и отличие этих значений в 6%.

Таблица 2

Энергетический спектр асимметричного ангармонического осциллятора (12) при различных значениях параметра p при $R = 3$, $N = 132$

n	E_n	$p = 0$	$p = 0,5$	$p = 1$	$p = 1,5$	$p = 2$	$p = 2,5$	$p = 3$
0	E_0	2,4755	1,5126	0,5391	-0,4444	-1,4378	-2,4406	-3,4524
1	E_1	2,4756	3,4274	4,3677	4,5380	3,6416	2,7340	1,8158
2	E_2	7,1458	6,2932	5,4221	5,2959	6,2112	7,1130	6,7854
3	E_3	7,1538	7,9906	8,8134	9,0991	8,3458	7,5735	8,0003
4	E_4	11,0875	10,5361	9,8339	9,6185	10,3954	11,1298	11,1462
5	E_5	11,3693	11,8720	12,3917	12,5787	12,2624	11,7751	11,9021
6	E_6	13,8651	13,7634	13,5367	13,4745	13,7607	14,0467	14,1609

На рис. 7–14 приведена зависимость значений энергетических уровней от параметра p , который принимает значения от -9 до 9 , для асимметричного ангармонического осциллятора (12), а также структура расположения энергетических уровней для некоторых параметров p и волновые функции.

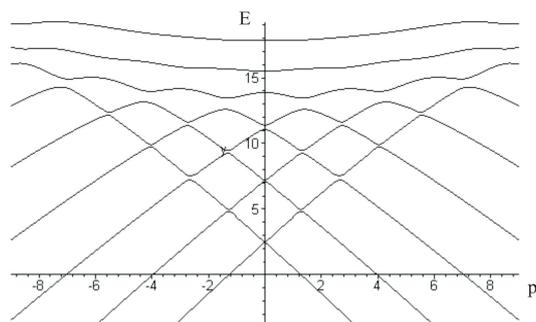


Рис. 7. Зависимость значений энергетических уровней от параметра p асимметричного ангармонического осциллятора (12)

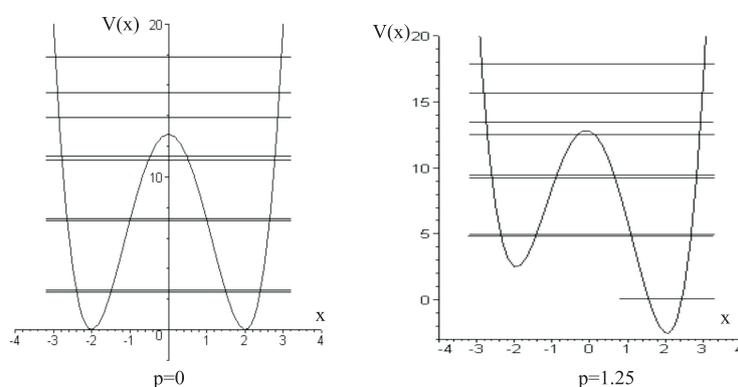


Рис. 8. Структура спектра асимметричного ангармонического осциллятора (12) при $p = 0$ и $p = 1,25$

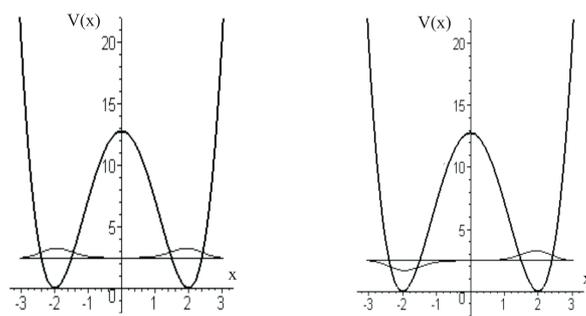


Рис. 9. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_0 = 2,4755$, $E_1 = 2,4756$ при $p = 0$

4. Ангармонический осциллятор с тремя минимумами

Рассмотрим симметричный ангармонический осциллятор шестой степени, для которого в уравнении (1) потенциальная функция равна

$$V(x) = Ax^2 - Bx^4 + Cx^6, \tag{13}$$

при $A > 0$, $B > 0$, $C > 0$.

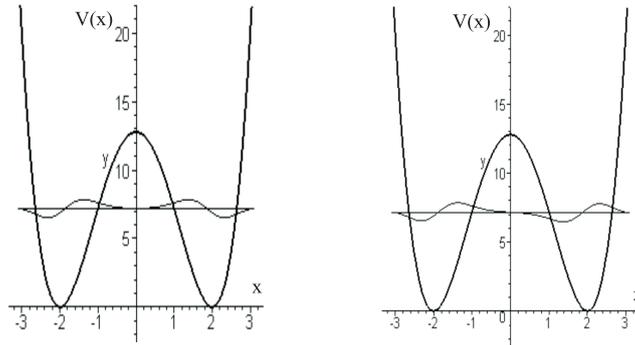


Рис. 10. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_2 = 7,1458$, $E_3 = 7,1538$ при $p = 0$

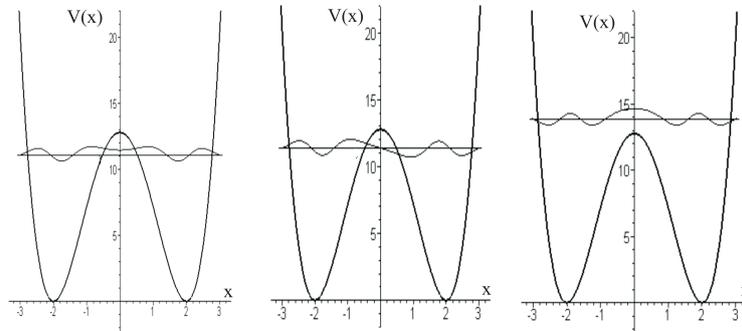


Рис. 11. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_4 = 11,0875$, $E_5 = 11,3693$ и $E_6 = 13,8651$ при $p = 0$

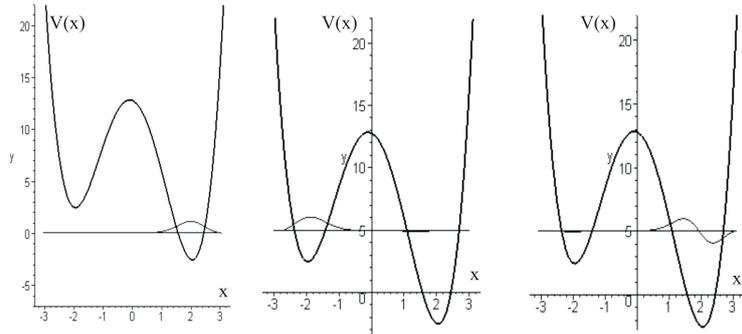


Рис. 12. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_0 = 0,0486$, $E_1 = 4,8334$ и $E_2 = 4,9816$ при $p = 1,25$

Условие $C > 0$ обеспечивает дискретность энергетического спектра. При $B^2 \geq 3AC$ и $B > 0$, $A > 0$ потенциал (13) имеет три локальных минимума в точках $x = 0$, $x = \pm\sqrt{A(1 + \sqrt{1 - \xi})/B\xi}$, два максимума в точках $x = \pm\sqrt{A(1 - \sqrt{1 - \xi})/B\xi}$, в которых значения функции (13) равны, соответственно, $A^2/(3B\xi^2)(3\xi - 2 + 2(1 - \xi)\sqrt{1 - \xi})$ и $-A^2/(3B\xi^2)(-1 + \sqrt{1 - \xi})(2\xi - 1 + \sqrt{1 - \xi})$.

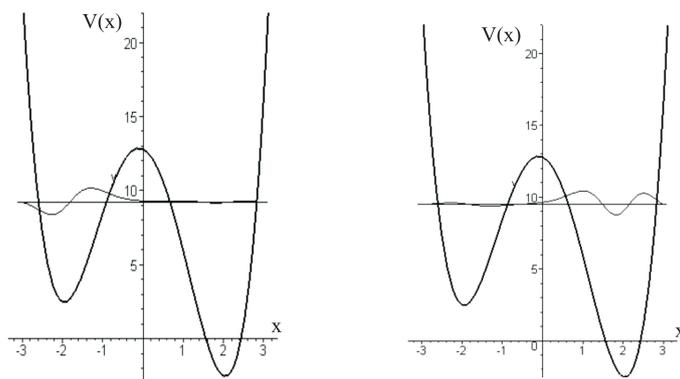


Рис. 13. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_3 = 9,2154$, $E_4 = 9,4729$ при $p = 1,25$

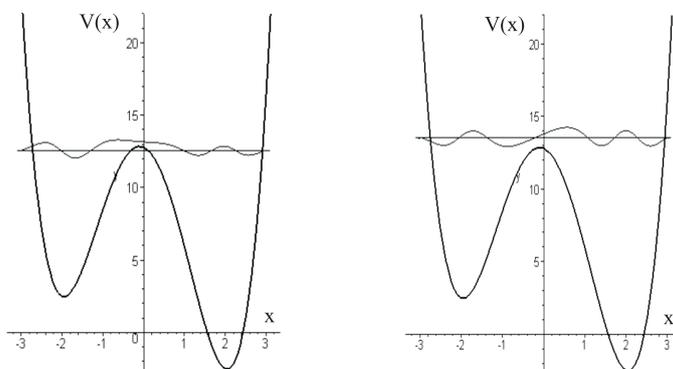


Рис. 14. Потенциал и волновая функция асимметричного ангармонического осциллятора (12) для $E_5 = 12,5550$, $E_6 = 13,4551$ при $p = 1,25$

Ниже проведённые расчёты выполнены при $\xi = 3/4$ и $A = 16,2$, $B = 10,2$, $C = B^2/4A$, для которых значения потенциальной функции в точках минимума равны нулю. При помощи символьно-численной программы [9] для уравнения Шрёдингера (1) с функцией (13) найдены волновые функции в виде степенных рядов и энергетические спектры (см. табл. 3).

Таблица 3

Энергетический спектр симметричного ангармонического осциллятора шестой степени (13), где $A = 16,2$, $B = 10,2$, $C = B^2/4A$ при $R = 2,2$, $N = 220$

n	0	1	2	3	4	5	6
E_n	2,5278	4,9156	5,0886	7,2667	10,4400	13,1899	16,4806

На рис.15 приведена структура расположения энергетических уровней для ангармонического осциллятора шестой степени (13).

Как видно, в симметричном потенциале с тройной ямой (13) избегнутое пересечение из-за квантового эффекта туннелирования наблюдается для первого и второго возбуждённых уровней и величина расщепления очень большая, что существенно отличается от случая симметричного потенциала с двойной ямой. В самом деле, из численных расчётов волновых функций (см. рис. 16, 17) следует,

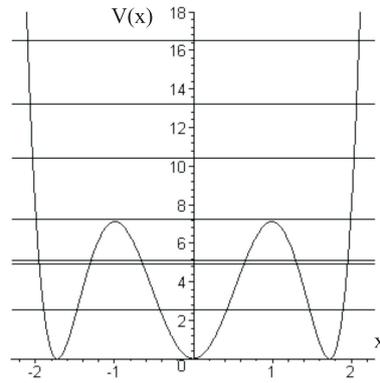


Рис. 15. Структура спектра симметричного ангармонического осциллятора шестой степени (13)

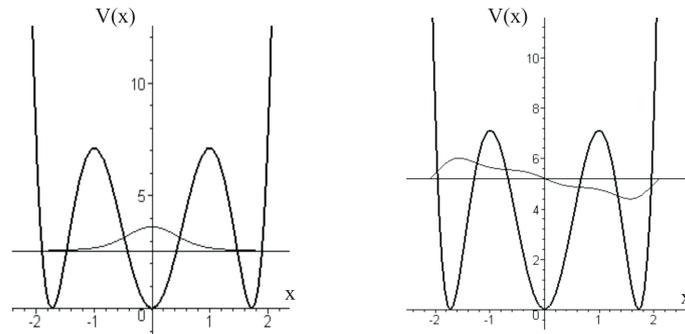


Рис. 16. Потенциал и волновая функция симметричного ангармонического осциллятора шестой степени (13) для $E_0 = 2,5278$, $E_1 = 4,9156$

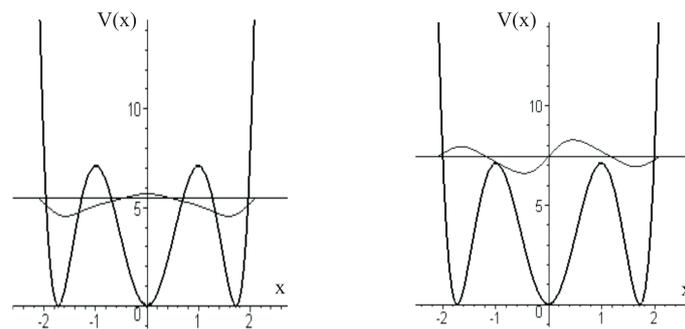


Рис. 17. Потенциал и волновая функция симметричного ангармонического осциллятора шестой степени (13) для $E_2 = 5,0886$, $E_3 = 7,2667$

что избегнутое пересечение уровней случается именно для первых двух возбуждённых состояний, в которых, соответственно, их волновые функции обращаются в нуль один и два раза, а волновая функция основного состояния узлов не имеет.

5. Заключение

В работе получены энергетические спектры и волновые функции одномерных уравнений Шрёдингера с потенциальной функцией, имеющей два и три локальных минимума. Показано, что в этих системах имеет место квазипересечения энергетических уровней, и величина расщепления уровней из-за эффекта туннелирования крайне чувствительна к виду потенциальной функции.

Литература

1. Шик А. Я. и др. Физика низкоразмерных систем. — С.-П.: Наука, 2001. [Shik A. Ya. i dr. Fizika nizkorazmernykh sistem. — S.-P.: Nauka, 2001.]
2. Демиковский В. Я., Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. — М.: Логос, 2000. [Demikhovskiy V. Ya., Vugal'ter G. A. Fizika kvantovykh nizkorazmernykh struktur. — M.: Logos, 2000.]
3. Khuat-duy D., Leboeuf P. Multiresonance Tunneling Effect in Double-Well Potentials // Appl. Phys. Lett. — 1993. — Vol. 63, No 14. — Pp. 1903–1905.
4. Славянов С. Ю. Асимптотика решений одномерного уравнения Шрёдингера. — Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1990. [Slavyanov S. Yu. Asimptotika resheniy odnomernogo uravneniya Shredingera. — Leningrad: Izd-vo LGU, 1990.]
5. Доброхотов С. Ю., Колокольцов В. Н., Маслов В. П. Расщепление нижних энергетических уровней уравнения Шрёдингера и асимптотика фундаментального решения уравнения // Теоретическая и математическая физика. — 1991. — Т. 87, № 3. — С. 323–375. [Dobrokhotov S. Yu., Kolokol'tsov V. N., Maslov V. P. Rastheplenie nizhnikh ehnergeticheskikh urovney uravneniya Shredingera i asimptotika fundamental'nogo resheniya uravneniya // Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika. — 1991. — T. 87, No 3. — S. 323–375.]
6. Straeten E., Naudts J. The Quantum Double-Well Anharmonic Oscillator in an External Field // J. Phys. A: Math. Gen. — 2006. — Vol. 39. — Pp. 933–940.
7. Турбинер А. В. Задачи о спектре в квантовой механике и процедура «нелинеаризации» // УФН. — 1984. — Т. 144, № 1. — С. 35–78. [Turbiner A. V. Zadachi o spektre v kvantovoy mekhanike i procedura «nelinearizacii» // UFN. — 1984. — T. 144, No 1. — S. 35–78.]
8. Обобщённый непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей / И. В. Пузынин, И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, В. Н. Первущин // ФЭЧАЯ. — 1999. — Т. 30, № 1. — С. 210–265. [Obobzhyonniy nepnerivniy analog metoda Njyutona dlya chislennogo issledovaniya nekotorykh nelineynykh kvantovopolevyykh modeley / I. V. Puzihnin, I. V. Amirkhanov, E. V. Zemlyanaya, V. N. Pervushin // FEhChAYa. — 1999. — T. 30, No 1. — S. 210–265.]
9. Беляева И. Н., Кузнецова И. С., Чеканов Н. А. Аналитически-численный метод решения краевой задачи для уравнения Шрёдингера // Вестник ХНТУ. Херсон: ХНТУ. — 2006. — Т. 2, № 25. — С. 40–46. [Belyaeva I. N., Kuznesova I. S., Chekanov N. A. Analiticheski-chislennyj metod resheniya kraevoy zadachi dlya uravneniya Shredingera // Vestnik KhNTU. Kherson: KhNTU. — 2006. — T. 2, No 25. — S. 40–46.]
10. Славянов С., Лай В. Специальные функции: Единая теория, основанная на анализе особенностей. — Спб.: Невский Диалект, 2002. [Slavyanov S., Lay V. Special'nihe funkcii: Edinaya teoriya, osnovannaya na analize osobennostey. — Spb.: Nevskiyj Dialekt, 2002.]
11. Bay K., Lay W., Akopyan A. Avoided Crossings of the Quartic Oscillator // J. Phys. A: Math. Gen. — 1997. — Vol. 30. — Pp. 3057–3067.
12. Матвеев Н. М. Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: Высшая школа, 1963. [Matveev N. M. Metodih integrirovaniya obihknovennykh differencialnykh uravneniy. — M.: Vihsshaya shkola, 1963.]

UDC 51-72:530.145

Quantum Well Models for Low-Dimensional Structures as Anharmonic Oscillators with Two and Three Minima**I. N. Belyaeva^{*}, N. A. Chekanov[†]**

^{} Department of Mathematical Analysis
Belgorod State University
Studencheskaya 14, Belgorod, Russia, 308007*

*[†] Department of Physics
Stary Oskol Technological Institute
of the Moscow Institute of Steel and Alloys
Makarenko, 42, Stary Oskol, Russia, 309516*

By symbolic-numeric power series method the one-dimensional Shrödinger's equation with double- and triple-well potentials is solved. The energy spectra and wave function depending on the potential parameters are calculated. It is shown that magnitude of energy splitting is very sensitive to the form of the potential function.

Key words and phrases: nanostructures, quantum wells, Shrödinger's equation, anharmonic oscillators, power series, wave functions, energy spectra, avoided crossings.