

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

Практикум

Рекомендовано методической комиссией для студентов
МФТИ, обучающихся по направлению подготовки
03.04.01 – «Прикладная математика и физика»

Москва

2025

УДК 538.945

ББК 22.37

Ч-67

Рецензент: д. ф.-м. н. Фоминов Яков Викторович

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН

Ч-67 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ. Авторы: Аладышкин А. Ю., Яновская А. С., Бобков А. М., Бобкова И. В., Соловьев А. А., Столяров В. С.: Практикум. – Москва: **Издательство ...**, 2025. – 34 с.

В настоящем пособии представлено описание лабораторной работы, посвящённой численному моделированию квантовых размерных эффектов. Пособие содержит описание метода расчёта энергетических спектров и волновых функций в потенциальных ямах различной размерности, а также некоторые аналитические результаты, описывающие энергетические спектры локализованных состояний в некоторых частных случаях. Даны рекомендации по выполнению практических заданий.

Для студентов младших курсов Физтех-школы физики и исследований им. Л. Д. Ландау (ЛФИ) МФТИ, обучающихся по направлению подготовки «Общая и прикладная физика».

Ответственный за выпуск:

должность, степень, ФИО

УДК 538.945

ББК 22.37

© Московский физико-технический
институт (национальный
исследовательский университет)

Содержание

1. Введение	4
2. Аналитические результаты	4
2.1. Общие свойства локализованных состояний	4
2.2. Частица в прямоугольной потенциальной яме	8
2.3. Частица в параболической потенциальной яме	10
2.4. Частица в треугольной яме	13
2.5. Частица в цилиндрической яме	16
3. Решение краевой задачи методом конечных разностей	17
4. Практические задания	23
4.1. Прямоугольная яма	23
4.2. Параболическая яма	25
4.3. Треугольная яма	26
4.4. Связанные потенциальные ямы	27
4.5. Задача о поверхностной сверхпроводимости	27
4.6. Поверхностные состояния Тамма-Шокли	29
4.7. Цилиндрическая яма	29
Приложение	30
Список литературы	32

1. Введение

Настоящее учебное пособие предназначено для студентов младших курсов, начинающих изучать квантовую механику и физику твёрдого тела. Целями лабораторной работы, которая должна решаться методами численного моделирования, являются:

- знакомство с основными моделями квантовой механики, допускающими аналитические решения для спектра локализованных состояний частицы (точные или приближённые);
- знакомство с принципами составления разностных схем, описывающих краевые задачи математической физики;
- самостоятельное исследование особенностей локализованных состояний в одномерных потенциальных ямах произвольной формы.

Учебное пособие построено следующим образом. В разделе 2.1 рассмотрены общие свойства локализованных состояний в неоднородном потенциале, зависящем от одной координаты. В разделах 2.2, 2.3 и 2.4 представлены аналитические решения для одномерных потенциальных ям прямоугольной, параболической и треугольной форм. Эти решения могут рассматриваться в качестве «эталонных» при отладке численных схем. В разделе 2.5 обсуждаются основные свойства локализованных состояний в цилиндрической потенциальной яме. Основные правила составления разностных схем для краевых задач математической физики разобраны в разделе 3. Раздел 4 посвящён подробному описанию практических заданий. В Приложении приводится пример простейшей программы для исследования спектра и структуры волновых функций в параболической потенциальной яме.

2. Аналитические результаты

2.1 Общие свойства локализованных состояний

Как известно, динамика квантовой системы (например, движение частицы в неоднородном потенциале) может описываться нестационарным уравнением Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где $\Psi(\mathbf{r}, t)$ – волновая функция, $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m^*) + U(\mathbf{r}, t)$ – оператор Гамильтона, представляющий собой сумму операторов кинетической и потенциальной энергий, m^* – эффективная масса. Если потенциальная энергия U не зависит явно от времени, то одним из возможных решений уравнения (1) является состояние с определённой энергией

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

где E – полная энергия частицы. Несложно показать, что координатно-зависящая часть волновой функции $\psi_E(\mathbf{r})$ является решением стационарного уравнения Шрёдингера

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Можно показать, что совокупность всех собственных функций $\psi_E(\mathbf{r})$ с различными E образует ортонормированный базис, по которому может быть разложена волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ нестационарной задачи (1). Далее для компактности индекса E у волновой функции стационарной задачи $\psi_E(\mathbf{r})$ будем опускать.

В нашем пособии мы ограничимся рассмотрением задач, в которых неоднородный потенциал зависит только от одной координаты ($U = U(x)$ в декартовой системе координат или $U = U(r)$ в полярной системе координат). Энергетический спектр и волновые функции частицы в одномерной потенциальной яме $U(x)$ являются решениями задачи Штурма-Лиувилля на собственные значения и собственные функции

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (4)$$

Уравнение (4) представляет собой линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка с переменными коэффициентами. Для уравнений такого вида не существует универсальных аналитических решений для произвольного потенциала $U(x)$, что вынуждает нас развивать методы численного моделирования. Тем не менее, можно выделить некоторые общие свойства решений одномерного стационарного уравнения Шрёдингера (4).

Спектр может быть дискретным или непрерывным

Рассмотрим неоднородный потенциал общего вида (рис. 1). Существует три диапазона энергий (I, II и III) с принципиально различными типами возможных решений [1, гл.2, §16] и [3, §21]. В области I [$E < \min U(x)$] не

существует решений задачи (4). В области II $[\min U(x) < E < \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x)]$, когда потенциал имеет локализирующий характер с двумя стенками, спектр энергий имеет дискретный характер. Дискретные уровни энергии могут быть пронумерованы целочисленным индексом n , при этом в некоторых задачах n удобно отсчитывать от нуля, в некоторых задачах – от единицы.¹ Состояние с наименьшим значением полной энергии называется основным состоянием. В области III $[E > \lim_{x \rightarrow +\infty} U(x)]$ спектр энергий является непрерывным.

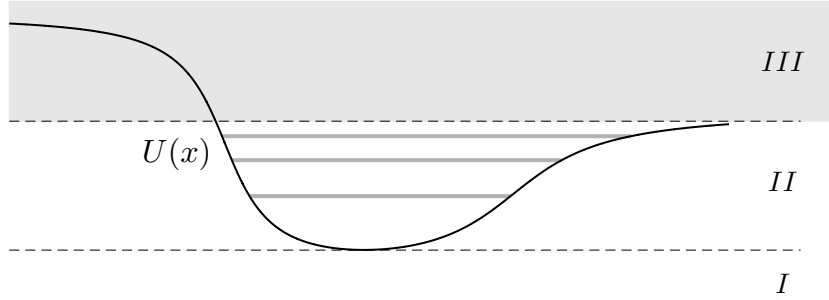


Рис. 1. Три диапазона энергий с различными видами энергетического спектра.

Осцилляционная теорема

Осцилляционная теорема (например, [3, §21]) утверждает, что уровень с номером n ($n = 0, 1, 2, \dots$), соответствующий дискретной части энергетического спектра, имеет ровно n нулей волновой функции внутри области финитного движения внутри потенциальной ямы. Следует подчеркнуть, что нули волновой функции на границах области движения при подсчёте n нулей в такой формулировке не учитываются.

Симметричные свойства решений уравнения Шрёдингера

Обсудим некоторые свойства волновых функций частицы, локализованной в симметричной потенциальной яме.

Докажем общее утверждение: волновые функции в симметричной потенциальной яме могут быть либо чётными, либо нечётными по координате. Для доказательства этого свойства рассмотрим оператор пространственной инверсии \hat{P} :

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x), \quad (5)$$

¹Уровни нумеруются снизу вверх: энергия n -го уровня увеличивается при увеличении n .

который осуществляет преобразование $x \rightarrow -x$. Заметим, что условие $U(x) = U(-x)$ автоматически приводит к инвариантности гамильтониана в уравнении (4) относительно пространственной инверсии: $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$.

Покажем, что оператор \hat{P} и гамильтониан \hat{H} (при условии, что гамильтониан не изменяется при преобразовании $x \rightarrow -x$) имеют общий полный набор собственных функций. Покажем, что коммутатор операторов \hat{P} и \hat{H} равен нулю

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{P}] \psi(x) &= \hat{H}(x) \hat{P} \psi(x) - \hat{P} \hat{H}(x) \psi(x) = \\ &= \hat{H}(x) \psi(-x) - \hat{H}(-x) \psi(-x) = (H(x) - H(-x)) \psi(-x) = 0. \end{aligned}$$

Как известно, два коммутирующих оператора имеют один и тот же набор собственных функций. Следовательно, для нахождения полного набора собственных функций оператора \hat{H} достаточно в качестве таких функций использовать собственные функции \hat{P} .

Теперь найдём собственные числа и собственные функции оператора инверсии. По определению, собственные значения и собственные функции являются решением уравнения $\hat{P} \psi(x) = C \psi(x)$. Применим оператор инверсии к некоторому состоянию дважды, тогда с одной стороны

$$\hat{P}^2 \psi(x) = \hat{P}(\hat{P} \psi(x)) = \hat{P} \psi(-x) = \psi(x),$$

а с другой стороны –

$$\hat{P}^2 \psi(x) = \hat{P}(\hat{P} \psi(x)) = \hat{P}(C \psi(x)) = C^2 \psi(x).$$

Сравнивая правые части полученных соотношений, находим собственные числа оператора инверсии $C = \pm 1$. Следовательно,

$$\begin{aligned} \text{если } C &= +1, & \text{то } \psi(-x) &= \psi(x), \\ \text{если } C &= -1, & \text{то } \psi(-x) &= -\psi(x). \end{aligned}$$

Иными словами, собственные волновые функции в симметричном потенциале являются либо чётными, либо нечётными.

2.2 Частица в прямоугольной потенциальной яме

Рассмотрим стационарные решения уравнения Шрёдингера (4) с потенциалом следующего вида (рис. 2а):

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } |x| \leq w/2, \\ \infty & \text{при } |x| > w/2, \end{cases} \quad (6)$$

где w – ширина ямы. Общее решение уравнения (4) в области постоянного потенциала (т. е. внутри ямы) можно представить в виде

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta), \quad (7)$$

где параметр

$$k = \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar} \quad (8)$$

определяется полной энергией частицы, δ есть фазовый сдвиг, постоянная A при необходимости может быть определена из условия нормировки

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

В области с бесконечным потенциалом волновая функция должна быть равна нулю, поскольку в противном случае среднее значение потенциальной энергии

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) U(x) \psi(x) dx$$

будет бесконечным. Следовательно, на левой и правой стенках потенциальной ямы волновая функция должна быть равна нулю

$$\psi(x) \Big|_{x=-w/2} = 0 \quad \text{и} \quad \psi(x) \Big|_{x=w/2} = 0. \quad (10)$$

После подстановки общего решения (7) в граничные условия (10) получаем спектр разрешённых значений волнового числа

$$k_n w = \pi n, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (11)$$

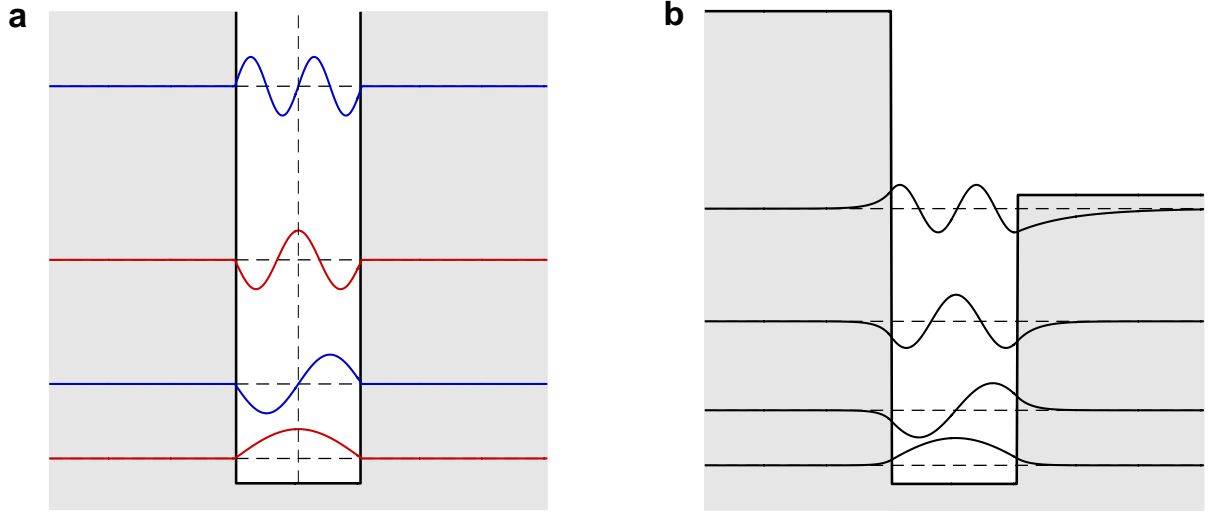


Рис. 2. **а** – Нормированные волновые функции $\psi_n(x)$ в прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками. Симметричные и антисимметричные (относительно центра ямы) волновые функции показаны красными и синими линиями, соответственно. Для удобства представления собственные волновые функции смещены по вертикали на величину, равную энергии соответствующего состояния. **б** – Нормированные волновые функции $\psi_n(x)$ в потенциальной яме со стенками конечной высоты. Волновые функции частицы в несимметричной яме не обладают определённой симметрией (показаны чёрным цветом). Наличие экспоненциально затухающих «хвостов» волновых функций внутри барьеров увеличивает область локализации волновой функции и, в соответствии с принципом неопределённости Гейзенберга, приводит к понижению энергии таких состояний – см. соотношение (12).

При выводе (11) мы учли, что фазовый сдвиг δ равен $\pi/2$ для уровней с нечётными n и равен нулю для уровней с чётными n . Тот же результат (11) можно получить и качественным рассуждением. Действительно, чтобы внутри ямы образовалась стоячая волна, необходимо, чтобы на ширине ямы укладывалось целое число длин полуволен: $w = n\lambda/2 = n\pi/k$ или $kw = \pi n$.

Из соотношений (8) и (11) находим спектр уровней размерного квантования

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m^*} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* w^2}, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (12)$$

Приведём без вывода неявное уравнение на k_n , которое определяет спектр локализованных состояний в асимметричной потенциальной яме с барьерами конечной высоты [3, §22]

$$k_n w = \pi n - \arcsin \left(\frac{\hbar k_n}{\sqrt{2m^* U_1}} \right) - \arcsin \left(\frac{\hbar k_n}{\sqrt{2m^* U_2}} \right), \quad (13)$$

где U_1 и U_2 – высоты левого и правого потенциальных барьеров, формирующих потенциальную яму (рис. 2b).

Структура собственных волновых функций в прямоугольной потенциальной яме со стенками бесконечной и конечной высоты показана на рис. 2.

2.3 Частица в параболической потенциальной яме

Симметричный параболический потенциал

Краевая задача для определения собственных функций и энергий для частицы в параболическом потенциале (рис. 3а) может быть записана в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m^*\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \text{при условии} \quad \psi(x) \Big|_{|x| \rightarrow \infty} = 0, \quad (14)$$

где ω – частота колебаний классической частицы в потенциальной яме.

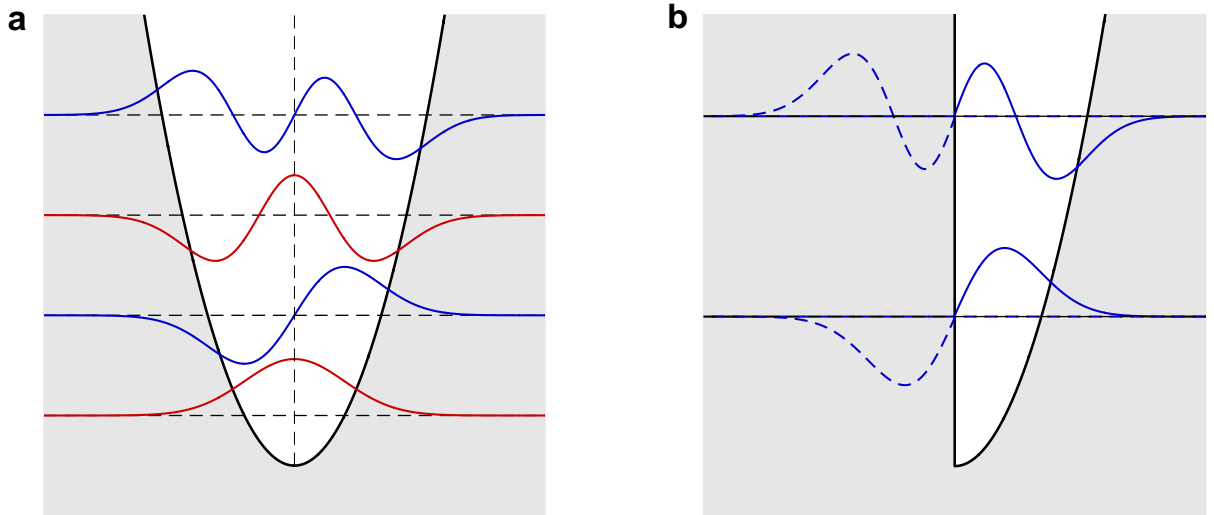


Рис. 3. **а** – Нормированные волновые функции $\psi_n(x)$ в симметричной параболической потенциальной яме. **б** – Нормированные волновые функции $\psi_n(x)$ в полуограниченной параболической потенциальной яме.

Точное решение краевой задачи (14) приведено, например, в [3, §23] и [6, §10]. Как было показано, волновые функции описываются зависимостями вида

$$\psi_n(x) = A_n H_n \left(\sqrt{\frac{m^*\omega}{\hbar}} x \right) e^{-m^*\omega x^2/(2\hbar)}, \quad \text{где} \quad n = 0, 1, \dots \quad (15)$$

где A_n – постоянная, которая может быть определена из условия нормировки, n – номер уровня размерного квантования, $H_n(x)$ – полиномы Эрмита

(Hermite) n -го порядка.² Энергия таких состояний определяется соотношением

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{где } n = 0, 1, \dots \quad (16)$$

Мы будем искать решение краевой задачи (14) методом пробных функций. Предположим, что волновая функция основного состояния является симметричной гауссовой функцией вида

$$\psi(x) = A e^{-bx^2/2}, \quad (17)$$

где A и b – подгоночные параметры. Отметим, что такое решение автоматически удовлетворяет асимптотическому условию (14). Вычислим первую и вторую производные для состояния (17):

$$\frac{d\psi}{dx} = A e^{-bx^2/2} (-bx) \quad \text{и} \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = A e^{-bx^2/2} (-bx)^2 + A e^{-bx^2/2} (-b),$$

подставим найденный результат в уравнение (14) и получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} A e^{-bx^2/2} (-bx)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} A e^{-bx^2/2} b + \frac{m^*\omega^2 x^2}{2} A e^{-bx^2/2} = E A e^{-bx^2/2}. \quad (18)$$

После деления всех слагаемых уравнения (18) на $A e^{-bx^2/2}$ получим простое соотношение

$$-\frac{\hbar^2 b^2}{2m^*} x^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} b + \frac{m^*\omega^2}{2} x^2 = E. \quad (19)$$

Легко видеть, что первое и третье слагаемые уравнения (19) пропорциональны квадрату координаты, в то время как прочие слагаемые от координаты не зависят. Для исключения зависимости E от координаты следует положить $b = m^*\omega/\hbar$, тогда

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} b = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

Полученное значение соответствует формуле (16) при $n = 0$.

Аналогичные рассуждения можно проделать для нахождения волновых функций и собственных энергий возбуждённых состояний. Предлагаем чи-

²Напомним, что $H_0(x) = 1$, $H_1(x) = 2x$, $H_2(x) = 4x^2 - 2$, $H_3(x) = 8x^3 - 12x$.

тательно самостоятельно показать, что справедливы следующие соотношения

$$n = 1 : \quad \psi(x) = A x e^{-bx^2/2} \quad \text{и} \quad E = \frac{3}{2} \hbar \omega,$$

$$n = 2 : \quad \psi(x) = A(2x^2 - 1)e^{-bx^2/2} \quad \text{и} \quad E = \frac{5}{2} \hbar \omega \quad \text{и т. д.}$$

Это позволяет последовательно воспроизвести результаты, следующие из соотношения (16).

Структура собственных волновых функций в симметричной потенциальной яме показана на рис. 3а.

Полуограниченный параболический потенциал

Рассмотрим теперь полуограниченную потенциальную яму, то есть потенциальную яму следующего вида (рис. 3б):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ m^* \omega^2 x^2 / 2 & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (20)$$

Краевая задача для определения собственных функций и спектра энергий для частицы в таком потенциале

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{m^* \omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E \psi(x) \\ \text{при условии} \quad \psi(x) \Big|_{x=0} = 0 \quad \text{и} \quad \psi(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (21)$$

совпадает с краевой задачей в симметричном параболическом потенциале (14) с дополнительным нулевым граничным условием при $x = 0$. Отметим, что любое решение, полученное для полуограниченной параболической ямы, после его продолжения на отрицательные значения x антисимметричным образом, является решением для исходной симметричной параболической ямы. Дополнительное граничное условие приводит к невозможности реализации чётных волновых функций, поскольку вследствие рассмотренной в данном пособии осцилляционной теоремы чётные функции (для симметричной параболической ямы) не обращаются в нуль при $x = 0$. Поэтому решениями задачи в полуограниченной параболической яме являются нечётные функции для симметричной параболической ямы, рассматриваемые в области $x \geq 0$ (сравните рис. 3а и 3б). Следовательно, из всего набора энергетических уровней частицы в симметричной пара-

болической яме (16) нужно взять половину состояний, соответствующих нечётным n и волновым функциям с нулями при $x = 0$. Получается, что энергетический спектр в полуограниченной параболической яме можно записать следующим образом:

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2} \right), \quad \text{где } n = 0, 1, \dots \quad (22)$$

2.4 Частица в треугольной яме

Существуют задачи, для решения которых удобно рассматривать частицы в локализуемом потенциале треугольной формы. Таковыми являются, например, ситуации, когда рассматриваются электроны в двумерном электронном газе в транзисторных гетероструктурах и электроны на границе металл-вакуум в однородном внешнем электрическом поле.

Потенциальная энергия частицы в области, в которой существует постоянное электрическое поле с напряжённостью \mathcal{E} , может быть записана в виде $U(x) = |e|\mathcal{E}x$. Запишем уравнение Шрёдингера для частицы в линейно-растущем потенциале

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + |e|\mathcal{E}x\psi(x) = E\psi(x). \quad (23)$$

Для удобства введём параметры

$$x_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*|e|\mathcal{E}} \right)^{1/3} \quad \text{и} \quad \xi = \frac{1}{x_0} \left(x - \frac{E}{|e|\mathcal{E}} \right).$$

После замены переменных уравнение (23) приводится к уравнению Эйри

$$-\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi\psi(\xi) = 0. \quad (24)$$

Общее решение уравнения (24) может быть записано в виде линейной комбинации двух линейно-независимых функций $\text{Ai}(\xi)$ и $\text{Bi}(\xi)$, которые называются функциями Эйри первого и второго рода, соответственно. Функции $\text{Ai}(\xi)$ и $\text{Bi}(\xi)$ имеют осциллирующий характер при отрицательных ξ , а при положительных ξ эти функции описывают экспоненциально затухающие и нарастающие при $\xi \rightarrow \infty$ решения (рис. 4а).

Рассмотрим полуограниченную треугольную потенциальную яму

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x \leq 0, \\ |e|\mathcal{E}x & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (25)$$

В силу естественного требования ограниченности волновой функции при $x \rightarrow \infty$, общее решение уравнения Шрёдингера для частицы в потенциале вида (25) выражается только через функцию Эйри первого рода:

$$\psi(\xi) = C \operatorname{Ai}(\xi). \quad (26)$$

Принимая во внимание наличие непроницаемой стенки при $x = 0$, получим граничное условие $\psi(x)\big|_{x=0} = 0$ или

$$\operatorname{Ai}\left(\frac{x - E_n/(|e|\mathcal{E})}{x_0}\right)\bigg|_{x=0} = \operatorname{Ai}\left(-\frac{E_n}{|e|\mathcal{E}x_0}\right) = 0, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (27)$$

Пусть ξ_n есть n -й нуль функции Эйри первого рода: $\xi_1 \simeq -2.34$, $\xi_2 \simeq -4.09$, $\xi_3 \simeq -5.52$, $\xi_4 \simeq -6.79$ и т.д. Критерий существования локализованных состояний в полуограниченной треугольной яме может быть записан в следующем виде $-E_n/(|e|\mathcal{E}x_0) = \xi_n$ или

$$E_n = -\xi_n \cdot \left(\frac{\hbar^2 (|e|\mathcal{E})^2}{2m^*}\right)^{1/3}, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (28)$$

Структура собственных волновых функций в треугольной потенциальной яме с бесконечной высокой стенкой показана на рис. 4b.

Для высших уровней ($n \gg 1$) может быть получено более простое выражение. Используем асимптотическое выражение для функции Эйри первого рода, справедливое при $\xi \rightarrow -\infty$:

$$\operatorname{Ai}(\xi) \simeq \frac{1}{\sqrt{\pi}|\xi|^{1/4}} \sin\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (29)$$

Следовательно, положение нулей функции Эйри первого рода описывается приближённым соотношением

$$\xi_n = -\left\{\frac{3}{2}\pi\left(n - \frac{1}{4}\right)\right\}^{2/3}. \quad (30)$$

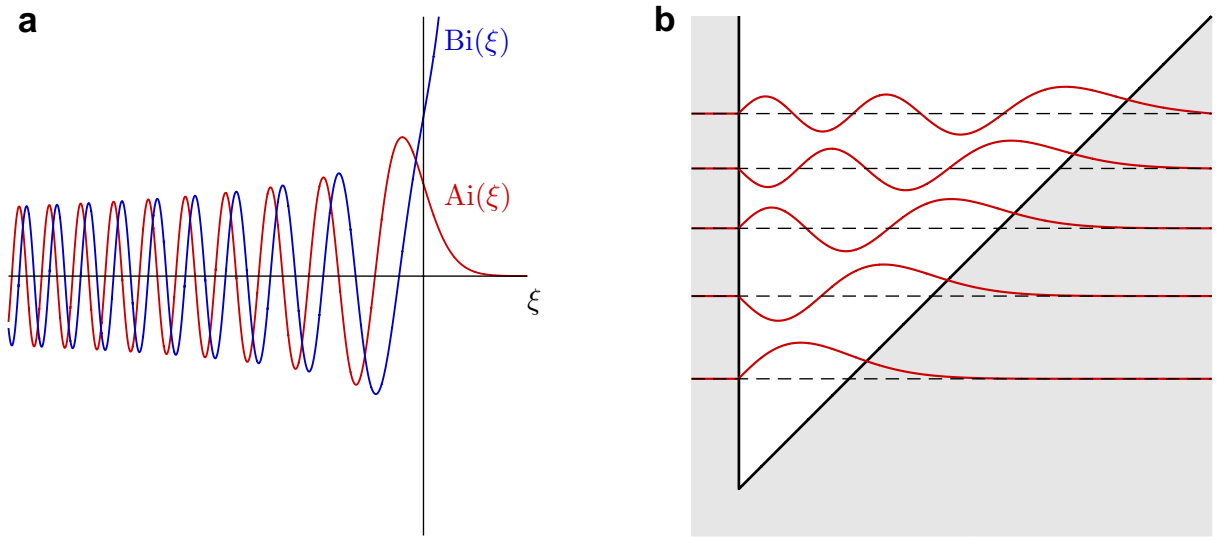


Рис. 4. **a** – Функции Эйри первого и второго рода. **b** – Нормированные волновые функции $\psi_n(x)$ в полуограниченной треугольной потенциальной яме.

Если подставить выражение (30) в формулу (28), то получим

$$E_n \simeq \left(\frac{3\pi\hbar|e|\mathcal{E}}{2\sqrt{2m^*}} \right)^{2/3} \cdot \left(n - \frac{1}{4} \right)^{2/3}, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (31)$$

Кроме этого, энергетический спектр высших состояний можно получить с помощью квазиклассического правила квантования Бора-Зоммерфельда [3, §48]:

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b p(x) dx = n + \gamma, \quad \text{где } n = 0, 1, \dots \quad (32)$$

где $a = 0$ и $b = E/(|e|\mathcal{E})$ – классические точки поворота, $p(x) = \sqrt{2m^*} \sqrt{E - U(x)}$ – классический импульс частицы, параметр γ зависит от формы потенциала в точках поворота. Для потенциальной ямы со стенками, одна из которых имеет конечный наклон в точке поворота, а вторая – бесконечный наклон, параметр γ равен $3/4$ [4, л. 12]. После вычисления интеграла получаем

$$E_n = \left(\frac{3\pi\hbar|e|\mathcal{E}}{2\sqrt{2m}} \right)^{2/3} \left(n + \frac{3}{4} \right)^{2/3}, \quad \text{где } n = 0, 1, \dots \quad (33)$$

Если мы поменяем способ нумерации уровней, то приведём полученное выражение к виду (31).

2.5 Частица в цилиндрической яме

Запишем стационарное двумерное уравнение Шрёдингера в полярных координатах (r, φ) при наличии потенциала, зависящего только от радиальной координаты:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \psi(r, \varphi) + U(r) \psi(r, \varphi) = E \psi(r, \varphi). \quad (34)$$

В силу линейности и аксиальной симметрии потенциала общее решение уравнения (34) может быть представлено в виде линейной комбинации состояний с определённым значением углового момента L :

$$\psi(r, \varphi) = f(r) e^{iL\varphi}. \quad (35)$$

Подставляя решение (35) в уравнение (34), для радиальной части волновой функции получаем дифференциальное уравнение второго порядка с переменными коэффициентами

$$-\frac{d^2 f}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{df}{dr} + \frac{2m^*}{\hbar^2} \left(U(r) + \frac{\hbar^2 L^2}{2m^* r^2} \right) f(r) = \frac{2m^* E}{\hbar^2} f(r), \quad (36)$$

где слагаемое $\hbar^2 L^2 / (2m^* r^2)$ играет роль «центробежного» потенциала. Предлагаем читателю самостоятельно показать, что ограниченное в начале координат решение имеет универсальную асимптотику $f(r) \propto r^{|L|}$ при $r \rightarrow 0$.

Рассмотрим цилиндрическую потенциальную яму

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } r \leq R_0, \\ U_0 & \text{при } r > R_0. \end{cases} \quad (37)$$

Используем радиус ямы R_0 в качестве естественного пространственного масштаба и введём безразмерные параметры $z = r/R_0$, $u_0 = 2m^* U_0 R_0^2 / \hbar^2$ и $\varepsilon = 2m^* E R_0^2 / \hbar^2$. Запишем уравнение (34) в безразмерном виде

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right) f(z) + \left(u_0 \theta(z) + \frac{L^2}{z^2} \right) f(z) = \varepsilon f(z), \quad (38)$$

где функция $\theta(z)$ равна нулю для $z \leq 1$ и единице для $z > 1$. Отметим, что

граничные условия для этой краевой задачи зависят от параметра L :

$$z = 0 : \quad \begin{cases} f'(z) = 0 & \text{при } L = 0, \\ f(z) = 0 & \text{при } L \neq 0; \end{cases} \quad z \rightarrow \infty : \quad f(z) = 0 \quad \forall L. \quad (39)$$

Внутри ямы уравнение (38) можно представить в виде

$$\left(y^2 \frac{d^2}{dy^2} + y \frac{d}{dy} - L^2 + y^2 \right) f \left(\frac{y}{\sqrt{\varepsilon}} \right) = 0, \quad (40)$$

где $y = z\sqrt{\varepsilon}$. Такое уравнение называется уравнением Бесселя L -го порядка, решениями которого являются функции Бесселя первого рода $J_L(z\sqrt{\varepsilon})$. Если стенки цилиндрической ямы бесконечно высокие, то из нулевого граничного условия $J_L(z\sqrt{\varepsilon})|_{z=1} = 0$ получим спектр в следующем виде: $\sqrt{\varepsilon} = \zeta_n$, где ζ_n — n -й нуль функции Бесселя первого рода.³ Таким образом, мы получаем энергию локализованных состояний в цилиндрической потенциальной яме

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^* R_0^2} \zeta_n^2, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (41)$$

Отметим, что энергия уровня локализованного состояния для заданного n обратно пропорциональна квадрату радиуса локализации волновой функции: $E_n \propto 1/R_0^2$.

3. Решение краевой задачи методом конечных разностей

К сожалению, аналитическое решение уравнения Шрёдингера возможно только для ограниченного числа случаев. Это обстоятельство вынуждает нас рассмотреть методы численного моделирования для анализа свойств локализованных состояний в потенциальных ямах произвольного вида. Для упрощения численных расчётов введём безразмерные параметры

$$z = \frac{x}{\ell}, \quad u(z) = \frac{2m^* \ell^2}{\hbar^2} U(z\ell) \quad \text{и} \quad \varepsilon = \frac{2m^* \ell^2}{\hbar^2} E,$$

³Например, первые 5 нулей функции Бесселя первого рода нулевого порядка ($L = 0$) равны: 2.40, 5.52, 8.65, 11.79, 14.93.

где ℓ – характерная ширина ямы. Это позволяет записать уравнение Шрёдингера (4) в безразмерном виде

$$-\psi''(z) + u(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z). \quad (42)$$

Теперь перейдём от континуального дифференциального уравнения (42) к разностному уравнению, определённом на сетке, то есть на дискретном наборе эквидистантно расположенных точек z_n .

Случай 1

Разделим интервал изменения аргумента $z_0 \leq z \leq z_N$ на N сегментов длиной Δz и рассмотрим точки, совпадающие с границами сегментов (рис. 5)

$$z_n = z_0 + \Delta z \cdot n, \quad \text{где } n = 0, 1, \dots, N, \quad (43)$$

где $z_L = z_0$ и $z_R = z_N$ – левая и правая границы рассматриваемого интервала. Для решения задачи (42) нужно найти значение функции во всех внутренних узлах

$$\psi_n \equiv \psi(z_n), \quad \text{где } n = 1, 2, \dots, N-1.$$

Заменяя вторую производную на разностное выражение, мы получаем уравнение

$$-\frac{\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}}{(\Delta z)^2} + u_n\psi_n = \varepsilon\psi_n, \quad \text{где } n = 1, \dots, N-1, \quad (44)$$

где $u_n \equiv u(z_n)$ – значения потенциала в узлах сетки.

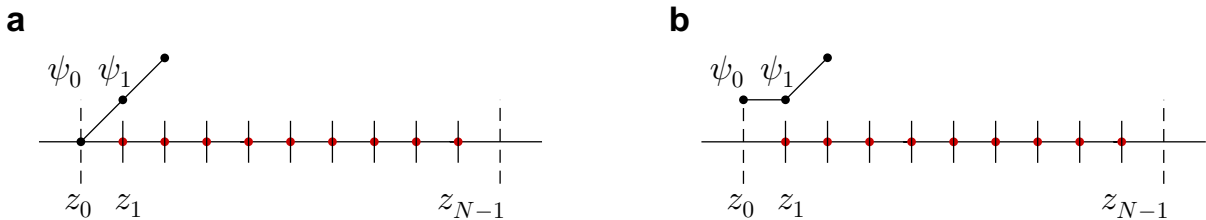


Рис. 5. Иллюстрация схемы вывода граничных условий (45) (рисунок а) и (48) (рисунок б) для сетки, определённой соотношением (43).

Значения неизвестной функции в краевых точках (при z_0 и z_N) могут быть найдены из граничных условий.

Для нулевых граничных условий ($\psi_0 = 0$ и $\psi_N = 0$) разностный оператор, соответствующий второй производной, принимает следующий вид:

$$n = 1 : \quad -\frac{\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2}{(\Delta z)^2} = \frac{2\psi_1}{(\Delta z)^2} - \frac{\psi_2}{(\Delta z)^2}, \quad (45)$$

$$n = N - 1 : \quad -\frac{\psi_{N-2} - 2\psi_{N-1} + \psi_N}{(\Delta z)^2} = \frac{2\psi_{N-1}}{(\Delta z)^2} - \frac{\psi_{N-2}}{(\Delta z)^2}. \quad (46)$$

Объединяя соотношения (44)–(46), получаем матричную форму записи краевой задачи с нулевыми граничными условиями

$$\begin{aligned} \frac{1}{(\Delta z)^2} \begin{pmatrix} A & -1 & 0 & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & -1 & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} + \\ + \begin{pmatrix} u_1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & u_2 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & u_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (47) \end{aligned}$$

где $A = 2$ и $B = 2$.

Для граничных условий, соответствующих нулевым производным ($\psi_0 = \psi_1$ и $\psi_N = \psi_{N-1}$), разностный оператор принимает следующий вид:

$$n = 1 : \quad -\frac{\psi_0 - 2\psi_1 + \psi_2}{(\Delta z)^2} = \frac{\psi_1}{(\Delta z)^2} - \frac{\psi_2}{(\Delta z)^2}, \quad (48)$$

$$n = N - 1 : \quad -\frac{\psi_{N-2} - 2\psi_{N-1} + \psi_N}{(\Delta z)^2} = \frac{\psi_{N-1}}{(\Delta z)^2} - \frac{\psi_{N-2}}{(\Delta z)^2}. \quad (49)$$

Следовательно, краевая задача может быть записана в том же виде (47) при условии, что теперь $A = 1$ и $B = 1$.

Суммируя вышесказанное, заключаем, что для выбранной сетки (43) параметры A и B определяются граничными условиями

$$A = \begin{cases} 2, & \text{если } \psi(z_L) = 0, \\ 1, & \text{если } \psi'(z_L) = 0 \end{cases} \quad \text{и} \quad B = \begin{cases} 2, & \text{если } \psi(z_R) = 0, \\ 1, & \text{если } \psi'(z_R) = 0. \end{cases} \quad (50)$$

Случай 2

Сетку для решения разностной задачи можно ввести по-другому и рассматривать середины интервалов (рис. 6):

$$z_n = z_L - \frac{\Delta z}{2} + \Delta z \cdot n, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots, N, \quad (51)$$

где z_L и $z_R = z_L + \Delta z \cdot N$ – положения левой и правой границ. Отметим, что в этом случае границы образца уже не будут совпадать с узлами сетки. Предлагаем читателю самостоятельно убедиться в том, что краевая задача на такой сетке может быть записана в матричной форме (47) при условии, что

$$A = \begin{cases} 3, & \text{если } \psi(z_L) = 0 \\ 1, & \text{если } \psi'(z_L) = 0 \end{cases} \quad \text{и} \quad B = \begin{cases} 3, & \text{если } \psi(z_R) = 0, \\ 1, & \text{если } \psi'(z_R) = 0. \end{cases} \quad (52)$$

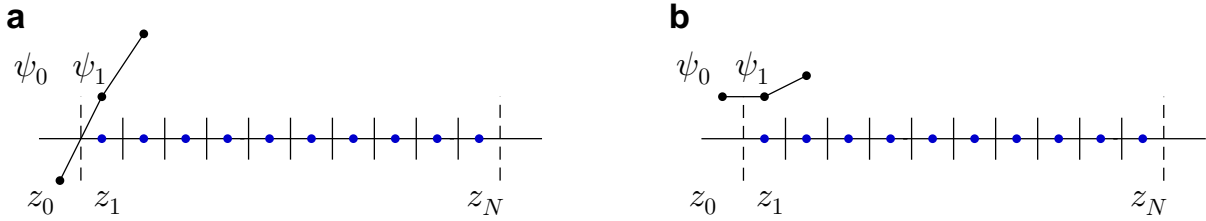


Рис. 6. Иллюстрация нулевых граничных условий ($\psi_0 = -\psi_1$, рисунок а) и условий нулевого градиента ($\psi_0 = \psi_1$, рисунок б) для сетки, определённой соотношением (51).

Определение собственных векторов и чисел квадратной матрицы

Независимо от способа выбора сетки краевая задача, включающая решение стационарного уравнения Шрёдингера с определёнными граничными условиями, сводится к решению матричного уравнения

$$\hat{L} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_M \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_M \end{pmatrix}, \quad (53)$$

где M – число узлов сетки во внутренней области ($N - 1$ или N в зависи-

мости от способа разбиения),

$$\hat{L} = \frac{1}{(\Delta z)^2} \begin{pmatrix} A & -1 & 0 & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & \dots & \dots & -1 & B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & u_2 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & u_M \end{pmatrix} \quad (54)$$

есть квадратная матрица размером $M \times M$, параметры A и B зависят от поставленных граничных условий [см. соотношения (50) и (52)]. Посредством диагонализации матрицы \hat{L} мы можем получить M собственных векторов и соответствующих им собственных значений. Ниже приведены команды, которые можно использовать для решения задачи на собственные функции и собственные значения, на различных языках программирования.

Формат операции диагонализации матрицы на языке Matlab:

$$[V, E] = \text{eig}(L),$$

где L – исходная матрица, V – матрица, каждый столбец которой представляет собой один из собственных векторов, E – матрица, на главной диагонали которой находятся собственные числа. Простейшая Matlab-программа, позволяющая вычислить спектр энергий и соответствующих локализованных волновых функций, приведена в Приложении.

Формат операции диагонализации матрицы на языке Python (необходим пакет `numpy.linalg`):

$$E, V = \text{numpy.linalg.eig}(L),$$

где E – матрица собственных значений, V – матрица собственных векторов.

Формат операции диагонализации матрицы на языке Wolfram Mathematica:

$$\text{Eigensystem}[L],$$

данная команда выдаёт массив $\{\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}, \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}\}$, где λ_i – собственные числа, а \mathbf{a}_i – соответствующие им собственные векторы.

Разностная схема для цилиндрической ямы

Введём сетку, узлы которой совпадают с границами эквидистантно расположенных интервалов (формула (43), рис. 5). Правила перехода от непрерывного оператора второй производной к разностной модели для рас-

смаатриваемой сетки были рассмотрены выше. Очевидно, что оператор первой производной, который входит в уравнение (38), для всех внутренних точек сетки может быть записан в виде

$$-\frac{1}{z} \frac{df}{dz} = \frac{1}{z_n} \cdot \frac{(f_{n-1} - f_{n+1})}{2\Delta z}.$$

Для состояния с $L = 0$ граничное условие в центре ямы соответствует нулевой производной ($f_0 = f_1$), поэтому

$$-\frac{1}{z} \frac{df}{dz} \Big|_{z_1} = \frac{1}{z_1} \cdot \frac{(f_0 - f_2)}{2\Delta z} = \frac{1}{2z_1\Delta z} f_1 - \frac{1}{2z_1\Delta z} f_2.$$

Для всех состояний с $L \neq 0$ граничное условие в центре ямы соответствует нулевому значению функции ($f_0 = 0$), поэтому

$$-\frac{1}{z} \frac{df}{dz} \Big|_{z_1} = \frac{1}{z_1} \cdot \frac{(f_0 - f_2)}{2\Delta z} = -\frac{1}{2z_1\Delta z} f_2.$$

Граничное условие на периметре рассматриваемой области соответствует нулевому значению волновой функции

$$-\frac{1}{z} \frac{df}{dz} \Big|_{z_{N-1}} = \frac{1}{z_{N-1}} \cdot \frac{(f_{N-2} - f_N)}{2\Delta z} = \frac{1}{2z_{N-1}\Delta z} f_{N-2}.$$

Таким образом, краевая задача с разнородными граничными условиями может быть записана в матричном виде

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(\Delta z)^2} \begin{pmatrix} A & -1 & 0 & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & -1 & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} + \\ & + \frac{1}{2\Delta z} \begin{pmatrix} C/z_1 & -1/z_1 & 0 & \dots & \dots \\ 1/z_2 & 0 & -1/z_2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1/z_{N-1} & D/z_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} + \end{aligned}$$

$$+ \begin{pmatrix} u_1 + L^2/z_1^2 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & u_2 + L^2/z_2^2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & u_{N-1} + L^2/z_{N-1}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}, \quad (55)$$

где $A = 1$ для состояния с $L = 0$ и $A = 2$ для состояния с $L \neq 0$; $B = 2$ для $\forall L$; $C = 1$ для состояния с $L = 0$ и $C = 0$ для состояния с $L \neq 0$; $D = 0$ для $\forall L$.

4. Практические задания

Предполагается, что для выполнения практической части читатели будут использовать любой удобный для них язык программирования (Matlab, Python, Wolfram Mathematica и т.п.), сосредотачиваясь не на искусстве программирования, а на анализе квантово-механических эффектов. Все поставленные задачи необходимо решать в безразмерном виде для узлов одномерной сетки, определяемой либо соотношением (43), либо соотношением (51). Также для решения задач может быть полезно воспользоваться примером реализации программы, представленным в Приложении.

4.1 Прямоугольная яма

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в одномерной потенциальной яме.

1. Рассмотрите симметричную потенциальную яму со стенками конечной высоты u_0 (рис. 7а). Пусть интервал изменения координаты z включает и области внутри потенциальных барьеров (рис. 7а). Задайте вектор значений потенциала u_n и постройте его профиль. Используя соотношения (50) и известный шаг сетки Δz , составьте матрицу \hat{L} . Решите краевую задачу с нулевыми граничными условиями: $\psi(z_L) = 0$ и $\psi(z_R) = 0$. Вычислите несколько собственных значений с минимальной энергией и постройте гра-

фики соответствующих им собственных функций (подобно рис. 2).

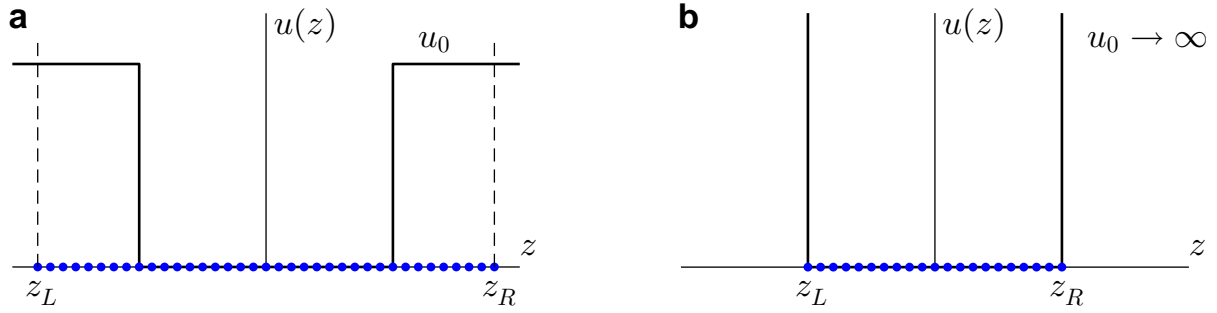


Рис. 7. **а** – Симметричная потенциальная яма со стенками конечной высоты и выбор сетки для решения краевой задачи. **б** – Потенциальная яма с бесконечно высокими стенками и альтернативный выбор сетки для решения краевой задачи.

2. Используя решение задачи из п. 1, рассмотрите симметричную потенциальную яму с бесконечно высокими стенками (рис. 7b). Для задания бесконечного потенциала используйте произвольное большое число u_0 для точек вне потенциальной ямы (например, 10^3 , 10^4 , 10^5 и т.п.)

3. Решите краевую задачу о локализованных состояниях в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками другим способом, рассматривая сетку с узлами внутри ямы (рис. 7b) и накладывая нулевые граничные условия на левой и правой стенках: $\psi(z_L) = 0$ и $\psi(z_R) = 0$. Сравните точность такого решения с решением, полученным ранее в п. 2.

4. Сравните полученный спектр энергий ε_n для частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками для двух разных вариантов выбора сеток с точным решением (12). Исследуйте зависимость получаемых в численном эксперименте значений ε_n от шага сетки Δz и величины потенциала u_0 .

5. Исследуйте зависимость энергии ε_n от номера уровня n и постройте график этой зависимости в спрямляющих координатах $\ln \varepsilon_n - \ln n$. Сопоставится ли полученная зависимость с формулой (12)? Что нужно предпринять, чтобы улучшить согласие?

6. Исследуйте зависимость энергии ε_n от ширины ямы w для нескольких низших уровней и постройте график этой зависимости в спрямляющих координатах $\ln \varepsilon_n - \ln w$. Сопоставится ли полученная зависимость с формулой (12)? Объясните эволюцию энергетического спектра, отталкиваясь от принципа неопределённости Гейзенберга ($\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$).

7. Рассмотрите симметричные и асимметричные потенциальные ямы с барьерами конечной высоты u_1 и u_2 (подобно рис. 2b). Исследуйте трансформацию энергетического спектра и вида волновых функций при изменении формы ямы.

8. Рассмотрите спектр локализованных состояний в «мелкой» яме при $u_1 \rightarrow 0$ и $u_2 \rightarrow 0$. Рассмотрите симметричный ($u_1 = u_2$) и асимметричный ($u_1 \neq u_2$) случаи. Всегда ли в «мелкой» яме будут наблюдаться связанные состояния?

4.2 Параболическая яма

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в одномерной потенциальной яме параболической формы.

1. Рассмотрите потенциальную яму параболической формы (рис. 8а). Задайте вектор значений потенциала $u_n = z_n^2$ и постройте его профиль. Используя соотношения (50) и известный шаг сетки Δz , составьте матрицу \hat{L} . Решите краевую задачу с нулевыми граничными условиями: $\psi(z_L) = 0$ и $\psi(z_R) = 0$. Вычислите несколько собственных значений с минимальной энергией и постройте графики соответствующих им собственных функций (подобно рис. 3).

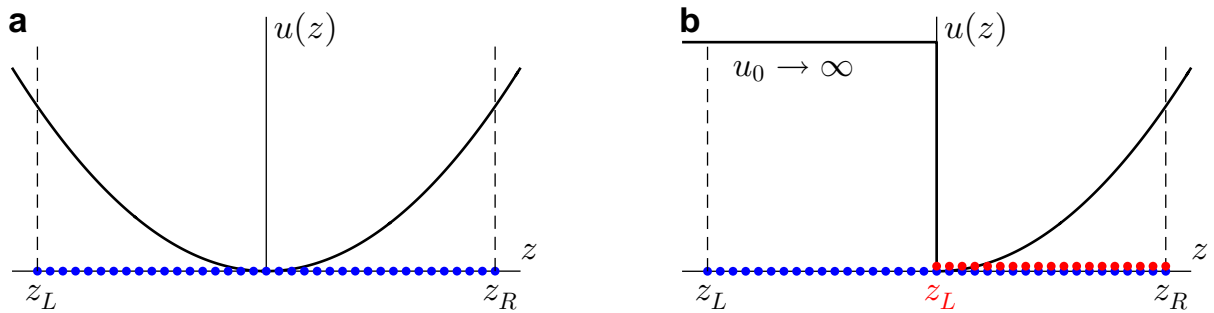


Рис. 8. **а** – Параболическая яма и выбор сетки для решения краевой задачи. **б** – Полуограниченная параболическая яма и два варианта выбора сетки для решения краевой задачи.

2. Сравните полученный спектр энергий ε_n с точным решением (16). Исследуйте зависимость получаемых в численном эксперименте значений ε_n от номера уровня n и постройте график этой зависимости. Согласуется ли полученная зависимость с формулой (16)? Что нужно предпринять, чтобы улучшить согласие?

3. Как изменятся собственные энергии частицы в яме, если рассмотреть потенциал вида $u(z_n) = Az_n^2$, где $A > 0$ – константа?

4. Определите несколько собственных значений с минимальной энергией и постройте графики соответствующих им собственных функций для частицы в полуограниченной параболической яме (рис. 8b). Сравните полученный спектр энергий ε_n с точным решением (22). Сравните полученные

результаты с результатами для частицы в симметричной параболической яме.

4.3 Треугольная яма

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в полуограниченной потенциальной яме треугольной формы ($u_n = \alpha z_n$ для $z_n > 0$ и $u_n = \infty$ для $z_n < 0$).

1. Рассмотрите полуограниченную потенциальную яму треугольной формы (рис. 9а). Пусть интервал изменения координаты z включает область внутри потенциального барьера (рис. 9а). Задайте вектор значений потенциала u_n и постройте его профиль. Используя соотношения (50) и известный шаг сетки Δz , составьте матрицу \hat{L} . Решите краевую задачу с нулевыми граничными условиями: $\psi(z_L) = 0$ и $\psi(z_R) = 0$. Вычислите несколько собственных значений с минимальной энергией и постройте графики соответствующих им собственных функций (подобно рис. 4b).

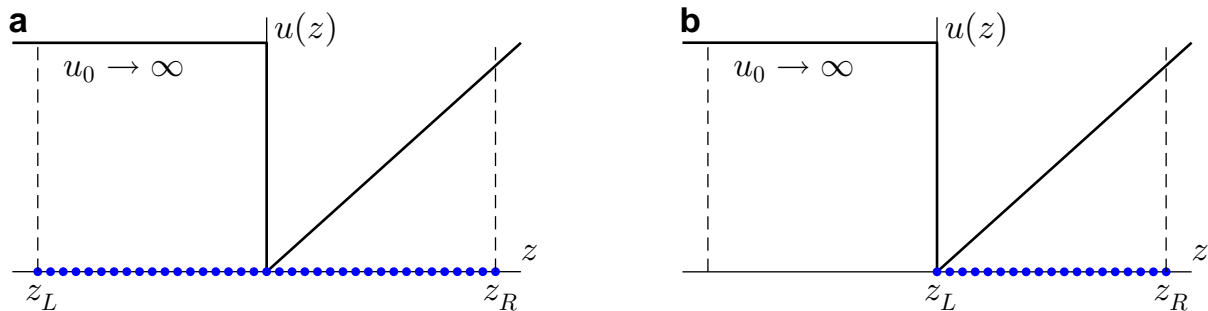


Рис. 9. а – Полуограниченная потенциальная яма треугольной формы и выбор сетки для решения краевой задачи. **б** – Полуограниченная потенциальная яма треугольной формы и альтернативный выбор сетки для решения краевой задачи.

- Сравните полученный спектр энергий со значениями (28), определяемыми нулями функции Эйри первого рода.
- Сравните полученный спектр энергий ε_n с приближённым решением (31), справедливым для больших n . Исследуйте зависимость получаемых в численном эксперименте значений ε_n от номера уровня n и постройте график этой зависимости в спрямляющих координатах $\ln \varepsilon_n - \ln n$. Согласуется ли полученная зависимость с формулой (31)? Что нужно предпринять, чтобы улучшить согласие?
- Получите решение задачи, рассматривая вместо «бесконечного» потенциала при $z = 0$ нулевое граничное условие в точке $z = 0$ (рис. 9b). Как согласуется полученный результат с результатом решения задачи с бесконечным потенциалом в п. 1?

4.4 Связанные потенциальные ямы

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в связанных потенциальных ямах.

1. Рассмотрите одномерную *прямоугольную* потенциальную яму и добавьте внутрь этой ямы дополнительный барьер U_0 прямоугольной или гауссовой формы с центром в произвольной точке z_B (например, рис. 10а). Как зависит спектр энергий ε_n и структура волновых функций ψ_n от высоты и ширины разделяющего барьера? Как зависит спектр энергий ε_n и структура волновых функций ψ_n от положения разделяющего барьера относительно левой и правой стенок ямы?

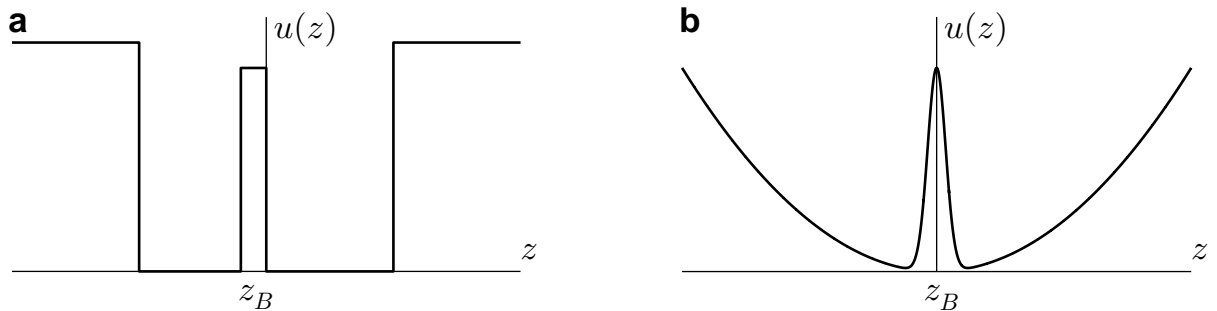


Рис. 10. Примеры прямоугольной потенциальной ямы (рисунок а) и параболической ямы (рисунок б) с дополнительными потенциальными барьерами внутри ям.

2. Рассмотрите одномерную *параболическую* потенциальную яму и добавьте внутрь этой ямы дополнительный барьер U_0 прямоугольной или гауссовой формы с центром в произвольной точке z_B (например, рис. 10б). Как зависит спектр энергий ε_n и структура волновых функций ψ_n от высоты и ширины разделяющего барьера? Как зависит спектр энергий ε_n и структура волновых функций ψ_n от положения разделяющего барьера относительно левой и правой стенок ямы?

4.5 Задача о поверхностной сверхпроводимости

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в двойной параболической яме вида $u_n = (|z_n| - z_0)^2$, где z_0 – варьируемый параметр.

1. Рассмотрите краевую задачу для двойного параболического потенциала (рис. 11) с нулевыми граничными условиями. Исследуйте зависимость энергии низшего уровня ε_0 от параметра z_0 и постройте график этой зависимости. Как можно качественно объяснить полученный результат? При

каком значении z_0 достигается минимум ε_0 ? Чему равно минимальное значение ε_0 ?

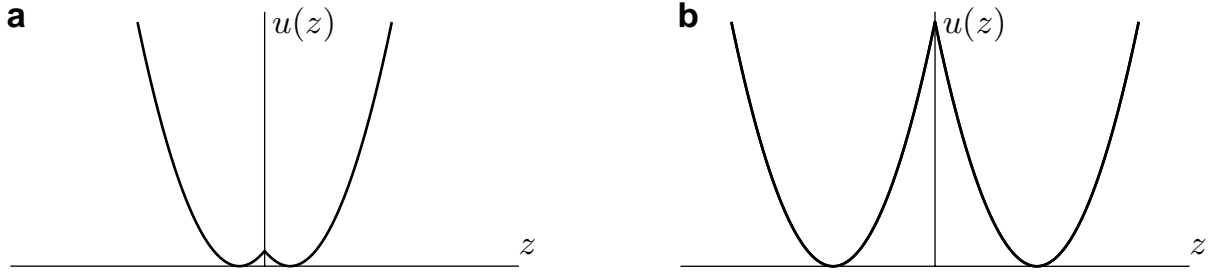


Рис. 11. Потенциальные ямы вида $u_n = (|z_n| - z_0)^2$ для разных значений параметра z_0 .

2. Используя полученный результат, постройте линии фазового перехода, соответствующие зарождению объёмной и поверхностной сверхпроводимости.

Замечание: На начальной стадии формирования сверхпроводимости плотность сверхпроводящего конденсата можно считать малой величиной, что позволяет пренебречь нелинейными эффектами и эффектом экранировки. Это позволяет перейти к линеаризованному уравнению Гинзбурга-Ландау для сверхпроводящего параметра порядка ψ :

$$\left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 \psi = \frac{1}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) \psi, \quad (56)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – векторный потенциал, соответствующий внешнему магнитному полю \mathbf{H} , $\Phi_0 = \pi\hbar c/|e| \simeq 2 \cdot 10^{-7}$ Гс·см² – квант магнитного потока, ξ_0 – материальный параметр (длина когерентности при $T = 0$), T_{c0} – критическая температура сверхпроводящего перехода при $H = 0$. Запишем векторный потенциал следующим образом $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = Hx\mathbf{e}_y$. При такой калибровке дифференциальный оператор в уравнении (56) не зависит явно от переменных y и z , поэтому решение уравнения (56) можно искать в виде $\psi(x, y, z) = f(x)e^{-iky}e^{-iqz}$, где k и q – величины, аналогичные проекциям импульса на оси y и z , соответственно. Поставленная нами задача сводится к поиску максимально возможной температуры T , при которой существует нетривиальное решение краевой задачи

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k\right)^2 f(x) = \left\{ \frac{1}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) - q^2 \right\} f(x) \\ \text{при условии} \quad \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad \text{и} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0. \quad (57)$$

Для удобства введём так называемую магнитную длину $\ell = \sqrt{\Phi_0/(2\pi|H|)}$, переменную $x' = x/\ell$ и запишем задачу (57) в безразмерном виде

$$-f''(x') + (x' - x'_0)^2 f(x) = \varepsilon f(x), \quad \text{где} \quad \varepsilon = \frac{\ell^2}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) - q^2, \quad x'_0 = k\ell, \\ \left. \frac{df}{dx'} \right|_{x'=0} = 0 \quad \text{и} \quad f(x') \Big|_{x' \rightarrow \infty} = 0. \quad (58)$$

Используя свойства симметрии задачи (58) при инверсии, можно записать задачу (58),

определённую для всех значений x'

$$-f''(x') + (|x'| - x'_0)^2 f(x) = \varepsilon f(x), \quad \text{где} \quad f(x') \Big|_{x' \rightarrow -\infty} = 0 \quad \text{и} \quad f(x') \Big|_{x' \rightarrow \infty} = 0. \quad (59)$$

Таким образом, задача о зарождении сверхпроводимости в массивном сверхпроводнике с плоской поверхностью сводится к вычислению минимального собственного числа ε_{\min} краевых задач (58) или (59) при наличии двойного параболического потенциала в зависимости от параметра x'_0 . Параметр ε_{\min} определяет положение линии сверхпроводящего фазового перехода на плоскости «внешнее магнитное поле H – температура (T)»

$$\frac{T_c}{T_{c0}} = 1 - \frac{\xi_0^2}{\ell^2} \varepsilon_{\min}(H) = 1 - \frac{2\pi|H|\xi_0^2}{\Phi_0} \varepsilon_{\min}(H). \quad (60)$$

4.6 Поверхностные состояния Тамма-Шокли

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в одномерной прямоугольной потенциальной яме ширины w с периодическим потенциалом внутри ямы

$$u(z) = \begin{cases} 0, & \text{при } |z| \geq w/2, \\ u_0 + 2u_1 \cos(2\pi z/a), & \text{при } |z| < w/2, \end{cases} \quad (61)$$

где $u_0 < 0$ – среднее значение потенциала внутри потенциальной ямы, $2u_1$ и a – амплитуда и период пространственно-неоднородной составляющей потенциала. Подробное изложение теории поверхностных электронных состояний в приближениях сильной и слабой связей представлено в пособии [7], §6.2 и §6.3.

1. Задайте вектор значений потенциала u_n и постройте его профиль. Используя соотношения (50) и известный шаг сетки Δz , составьте матрицу \hat{L} и диагонализуйте её. Постройте графики собственных функций частицы в таком потенциале. Какие состояния могут быть названы поверхностными электронными состояниями?

2. Проследите эволюцию энергии поверхностных состояний от амплитуды и знака u_1 .

4.7 Цилиндрическая яма

Решите задачу о спектре энергий локализованных состояний и собственных волновых функциях частицы в двумерной аксиально-симметричной

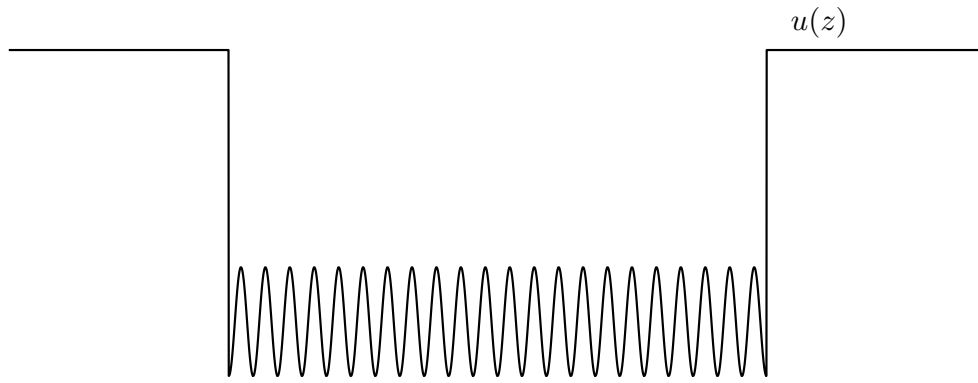


Рис. 12. Модельный потенциал (61).

потенциальной яме.

1. Рассмотрите краевую задачу с потенциальным барьером конечной высоты и разнородными граничными условиями, соответствующими состояниям с нулевым орбитальным моментом. Исследуйте зависимость собственных энергий от номера уровня.
2. Рассмотрите частный случай ямы единичного радиуса с бесконечно высоким потенциальным барьером ($U_0 \rightarrow \infty$). Пусть $L = 0$. Проверьте, совпадают ли значения нормированной энергии ε_n с квадратами нулей функции Бесселя нулевого порядка (5.78, 30.47, 74.89, 139.04 и т.д.)
3. Исследуйте зависимость энергии основного состояния от высоты потенциального барьера U_0 . Всегда ли будут локализованные состояния в мелкой двумерной яме? Помните, что по мере увеличения радиуса локализации волновой функции при $U_0 \rightarrow 0$ нужно расширять границы интервала и смещать положение правой границы (z_R) в сторону больших значений.
4. Рассмотрите краевую задачу с нулевыми граничными условиями, соответствующими состояниям с ненулевым орбитальным моментом. Исследуйте зависимость собственных энергий от номера уровня.
5. Получите матрицу, соответствующую разностной задаче для сетки, определённой соотношениями (51), рис. 6. Убедитесь, что результаты моделирования не зависят от выбора сетки.

Приложение

Приведём пример простейшей программы на языке Matlab для нахождения уровней энергии и волновых функций частицы, локализованной в параболической потенциальной яме. Ко всем этапам реализации программы

даны комментарии. При желании аналогичную программу можно написать на любом языке программирования.

Задаем интервал между соседними точками:

```
dz = 0.01;
```

Задаем границы рассматриваемого отрезка и формируем массив значений безразмерной координаты z :

```
z = [-10 : dz : 10];  
Nz = length(z);
```

В каждой точке сетки вычисляем потенциальную энергию:

```
U = z.^2;
```

Формируем трёхдиагональную матрицу \hat{L}_1 разностного оператора на рассматриваемой сетке:

```
Main_diag = [2 2.*ones(1,Nz-2) 2]./(dz*dz);  
Upp_diag = -ones(1,Nz-1)./(dz*dz);  
Low_diag = -ones(1,Nz-1)./(dz*dz);  
L1 = diag(Low_diag,-1) + diag(Main_diag) + diag(Upp_diag,1);
```

Формируем диагональную матрицу \hat{L}_2 оператора потенциальной энергии:

```
L2 = diag(U);
```

Записываем итоговую матрицу краевой задачи:

```
L = L1 + L2;
```

Находим собственные значения и вектора матрицы L :

```
[V, E] = eig(L);
```

Формируем вектор из найденных собственных чисел, вырезая главную диагональ матрицы E :

```
Energy = diag(E);
```

Вывод на экран пяти низших собственных значений:

```
disp(Energy(1:5));
```

Построим график с зависимостью потенциальной энергии от координаты (линия чёрного цвета) и нормированными волновыми функциями, соответствующими пяти низшим энергетическим уровням (линии красного цвета):

```
figure; hold on;  
plot(z, U, '-k');  
for n = 1 : 5
```

```

E0 = Energy(n);
Psi = V(:, n);
Int = trapz(z, abs(Psi).^2);
Psi_norm = Psi./Int;
plot(z, E0 + 0.1*Psi_norm, '-r');
plot(z, E0 + 0.0*Psi_norm, '-k');
end

```

Указываем предельные значения отображаемой области по горизонтальной и вертикальной осям:

```

set(gca, 'Xlim', [-10 10], 'Ylim', [0 10]);

```

Пояснение: для удобства волновые функции сдвинуты по вертикали на величину, равную собственной энергии данного уровня. Множитель 0.1 введён для того, чтобы волновые функции разных уровней при отображении на графике не перекрывались.

Список литературы

- 1 А. Мессиа, *Квантовая механика. т. 1* – Москва: Издательство «Наука», 1979. – 478 с.
- 2 А. А. Самарский, *Введение в численные методы* – Москва: Издательство «Наука», 1982. – 271 с.
- 3 Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. – 6-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2024. – 800 с.
- 4 В. В. Киселев, *Квантовая механика* – Москва: МЦНМО, 2023. – 720 с.
- 5 В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган, *Задачи по квантовой механике. Учеб.пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доп.* – Москва: Издательство «Наука», 1992. – 880 с.
- 6 В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин, *Курс теоретической физики в двух томах. Том 2. Электромагнитные процессы в веществе. Квантовая механика*. – Государственное издательство физико-математической литературы, 1962 г. – 819 с.
- 7 А. Ю. Аладышкин, А. А. Фраерман, *Лекции по физике поверхности. Введение в физику поверхностных и интерфейсных явлений. Учебное*

пособие. – Издательство Нижегородского госуниверситета, 2024 г. — 286 с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

Авторы:

Алексей Юрьевич **Аладышкин**

Анастасия Сергеевна **Яновская**

Александр Михайлович **Бобков**

Ирина Вячеславовна **Бобкова**

Артем Алексеевич **Соловьев**

Василий Сергеевич **Столяров**

Практикум

Компьютерная вёрстка – А. Ю. Аладышкин

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования

«Московский физико-технический институт

(национальный исследовательский университет)»

141701, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 7

Подписано в печать ...

Отпечатано в типографии

...