

Компьютерное моделирование 3 семестр.

1-й модуль

Задание

1. Используя уравнение Шредингера, найти связанные состояния и соответствующие им собственные значения в случае прямоугольной потенциальной ямы

$$V(x) = \begin{cases} -U, & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

где a - ширина ямы. Построить графически собственные функции.

2. Для потенциального барьера произвольной формы, задаваемого аналитической или таблично заданной функцией $U(x) > 0$ в диапазоне от 0 до h , определить вероятность прохождения такого барьера частицей с произвольной энергией E и массой m .

2-й модуль

Задание

На основании модели Кронига-Пени промоделировать зонную структуру одномерного кристалла. Проанализировать изменение ширины запрещенных зон для двух крайних случаев, когда электрон совершенно свободен и когда электрон заперт внутри одной потенциальной ямы, т.е. стенки непроницаемы, а также промежуточные случаи.

$$V(x) = \begin{cases} U, & nc + a < x < (n+1)c \\ 0, & nc < x < nc + a \end{cases}, \text{ где } a - \text{ ширина ямы, } c - \text{ постоянная}$$

кристаллической решетки, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Сроки и требования к выполнению км

1. В течение семестра должно быть выполнено моделирование двух физических задач/эффектов, по одному за каждый модуль.
2. Защита результатов моделирования должна быть произведена не позднее 12-й и 17 недели для первого и второго задания соответственно.
3. Моделирование выполняется численным методом решения дифференциальных уравнений с осмысленным выбором модели и области варьирования параметров задачи.
4. Отчет должен содержать:
 - теоретическую часть с обоснованием выбора модели, и если это необходимо получения уравнений движения из базовых уравнений при учете упрощений (ограничений), обусловленных выбранной моделью;
 - принцип выбранного численного алгоритма для решения уравнения;
 - результаты численного решения с графической визуализацией при различных параметрах;
 - проверка по асимптотике с аналитическими выражениями;
 - сравнение с экспериментальными результатами (если есть, например, соответствующая лабораторная работа или реальные экспериментальные данные из литературы или интернета);
 - заключительная часть, содержащая обсуждение полученных результатов и выводы.