

# Решение одномерного стационарного уравнения Шрёдингера методом модельного псевдопотенциала с использованием матриц рассеяния

Шеин Роман, 545 группа

Руководитель:

д.ф.-м.н., в.н.с. СПб АУ НОЦНТ РАН Горай Л.И.

Рецензент:

д.ф.-м.н., профессор Рябов В.М.

# Полупроводниковые гетероструктуры

- Гетероструктура — структура из нескольких слоёв различных материалов / растворов
- Малая толщина слоёв (~атомарные расстояния)
- Одномерность (приближение бесконечных слоёв)
- Предполагается наличие экспериментальных данных по материалам

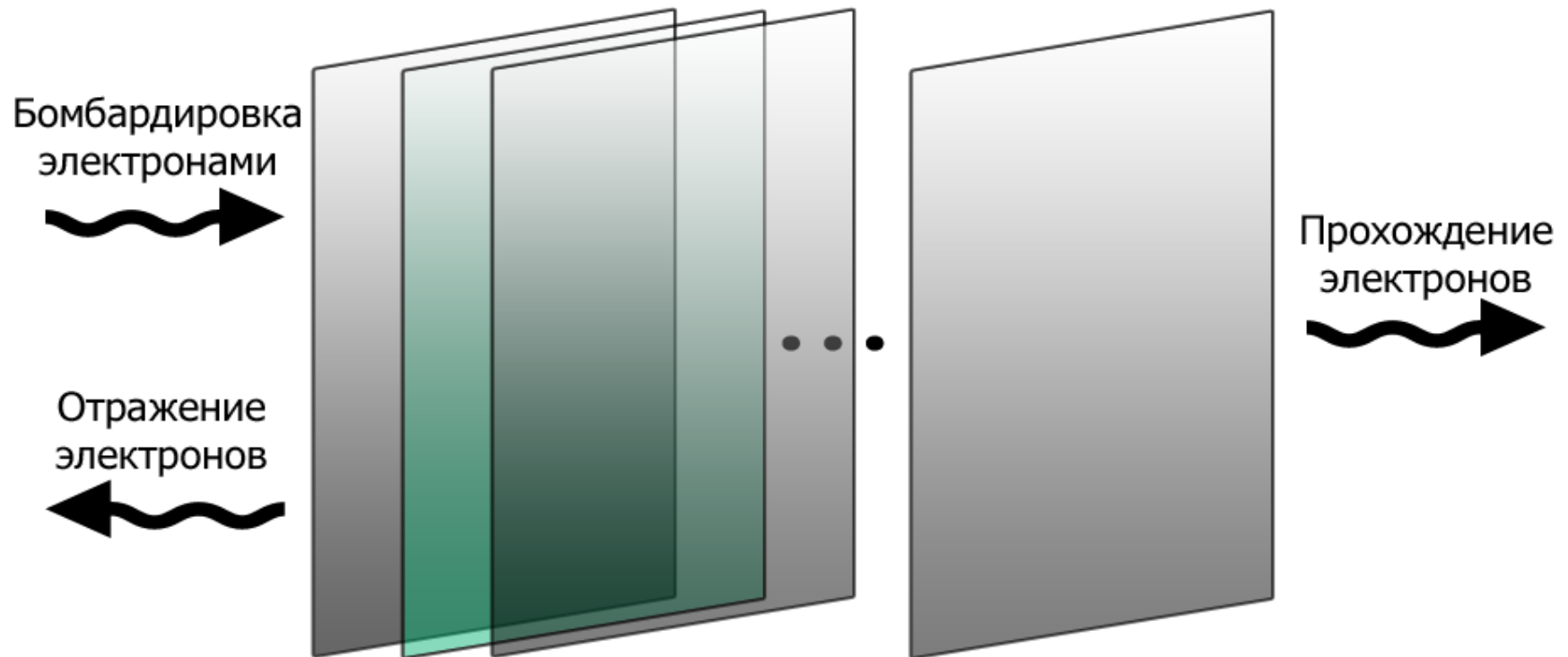
# Уравнение Шрёдингера

- Волновая функция и уровни энергии удовлетворяют уравнению Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} + U(r) \psi(r) = E \psi(r)$$

- Потенциал одномерный (проекция трёхмерного на ось / предположение сферической симметрии)
- Знание волновой функции позволяет определять основные свойства полупроводника
- Аналитически не решается в общем случае

# Волновые функции



# Постановка задачи

- Изучить предметную область и существующие подходы нахождения зонной структуры и волновой функции
- Выбрать быстрый и устойчивый метод нахождения зонной структуры и волновой функции
  - Целевые материалы слоёв – AlAs, GaAs
- Реализовать выбранный метод
- Протестировать реализацию

# Обзор методов

- Метод эффективной массы
  - Не подходит для слоёв ~атомарной толщины
  - Ограниченное число энергетических уровней
- Методы «ab initio»
  - Не подходят для гетероструктур на базе GaAs, AlAs: несовпадение с экспериментом из-за дефектов структур
  - Требуют больших вычислительных мощностей
- Метод сильной связи
  - Не применим к состояниям, хорошо описываемым приближением почти свободных электронов

# Метод модельного псевдопотенциала

- Истинный потенциал заменяется псевдопотенциалом
- Уравнение Шрёдингера решается численно относительно уровней энергии для каждого материала
- По найденным уровням энергии ищутся амплитуды проходящих и отражённых волн с использованием матриц рассеяния

# Реализация

- 3 независимых подзадачи:
  - Построение псевдопотенциала
  - Решение уравнения Шрёдингера
  - Матрицы рассеяния



# Построение псевдопотенциала

- Истинный потенциал заменяется на псевдопотенциал

$$V_p(r) = \sum_g \sum_k V_{gk} S_{gk}$$

$$S_{gk} = \frac{1}{N_k} \sum_j e^{-i g r_{kj}}$$

$$V_{gk} = \frac{1}{\Omega_k} \int_{\Omega_k} V_k(r) e^{-i g r} d r$$

- Структурные факторы  $S_{gk}$  вычисляются
- Форм-факторы  $V_{gk}$  находятся экспериментально

# Построение псевдопотенциала

- Реализован на C++
- Для Ge получено совпадение со значениями из литературы



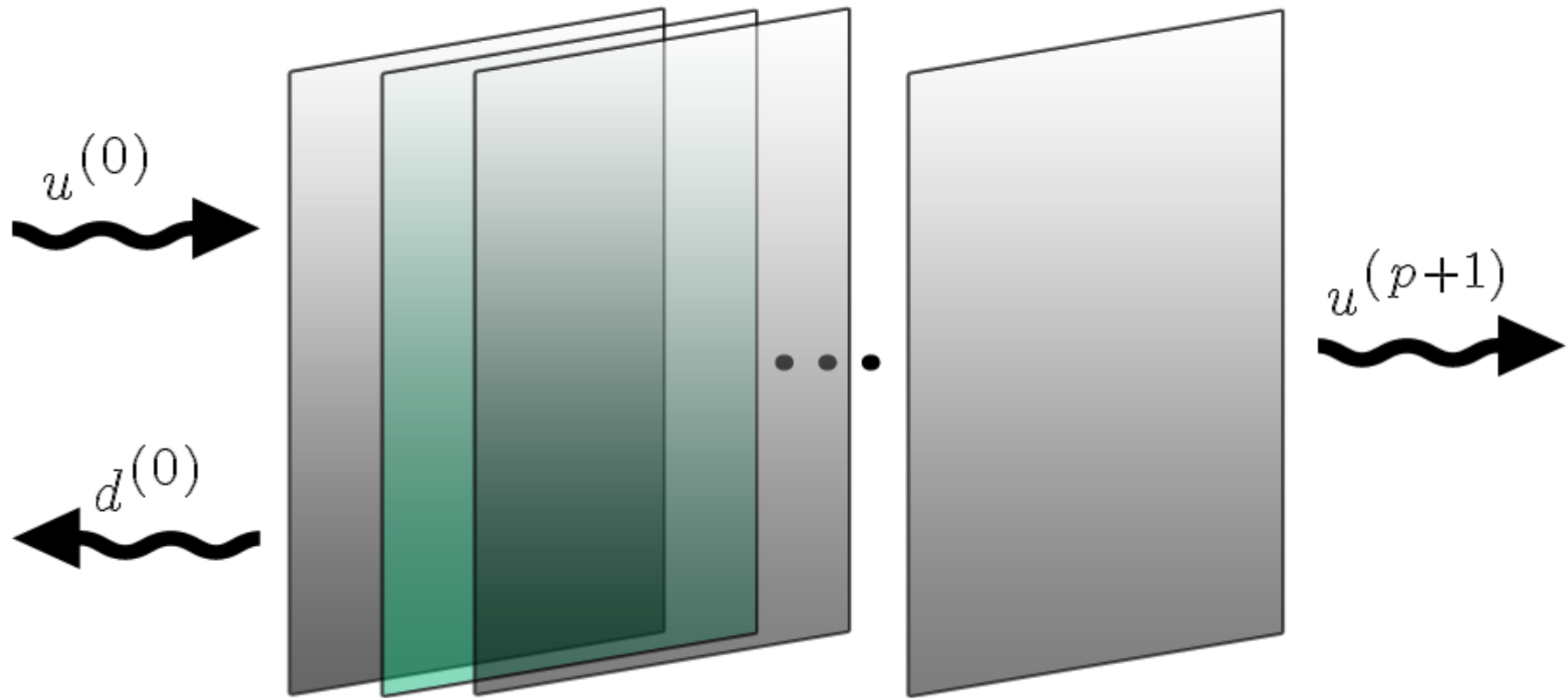
# Решение уравнения Шрёдингера

- Метод стрельбы
  - Метод Брендта
  - Метод Нумерова
- Реализовано на C++
- Точность согласуется с аналитическими оценками

# Уравнение Шрёдингера с псевдопотенциалом

- Протестирован на ряде модельных примеров
  - Квантовая яма с бесконечными стенками
  - Квантовая яма с конечными стенками
  - Сглаженный ламеллярный потенциал
- Подсчитана зонная структура Si, Ge, AlAs, GaAs

# Метод матриц рассеяния



# Метод матриц рассеяния

$$\begin{bmatrix} u^{(p+1)} \\ d^{(0)} \end{bmatrix} = S^{(p)} \begin{bmatrix} u^{(0)} \\ d^{(p+1)} \end{bmatrix}$$

- Вычисляются итеративно для всех слоёв
- Реализован на C++
- Протестирован на оптической задаче прохождения волны через границу раздела двух сред

# Результаты

- Изучена предметная область и методы нахождения зонной структуры и волновой функции для гетероструктур
- Реализован метод модельного псевдопотенциала решения уравнения Шрёдингера в виде трех независимых модулей
  - Построение псевдопотенциала
  - Решение уравнения Шрёдингера
  - Матрицы рассеяния
- Проведено тестирование на модельных примерах и физических задачах