УДК 51-73

ПОСТРОЕНИЕ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ МЕТОДОМ РАСЩЕПЛЕНИЯ ПО ФИЗИЧЕСКИМ ФАКТОРАМ В ОБЛАСТИ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА

А. А. Брызгалов¹, Φ . И. Карманов¹

Разработан метод построения базисных функций для задач с ограниченными потенциалами. С помощью модифицированного вариационного метода получены собственные функции и уровни энергии для случая двумерного квантового кольца, находящегося в однородном магнитном поле. Рассмотрен случай ограниченной области по координате. Полученные базисные функции могут быть использованы для моделирования временной динамики волновых функций электронов двумерного кольца в области конечного размера.

Ключевые слова: вариационный метод, метод расщепления по физическим факторам, базисные функции, стационарное уравнение Шредингера, двумерное квантовое кольцо.

1. Введение. Вариационный метод [1] является одним из распространенных способов приближенного решения уравнения Шредингера [2, 3]. С помощью этого метода, как правило, могут быть получены уровни энергии исследуемой квантовой системы и волновые функции низколежащих состояний, при этом точность полученного решения в значительной степени зависит от вида пробной функции Ψ_{var} .

В работе [4] рассматривается обобщение стандартного метода на случай ограниченной области от 0 до R_0 в сферической системе координат. Выбор параметрической пробной функции производится на основе преобразования растяжения координаты $r' \to \alpha r$, где α — варьируемый параметр, и исходя из точного решения уравнения Шредингера с граничными условиями в нуле и на бесконечности. При таком подходе симметрия системы не нарушается.

В цилиндрической геометрии класс потенциалов, для которых известно аналитическое решение, весьма ограничен. Это — потенциалы $1/r^2$, r^2 и их комбинация. Кулоновские потенциалы для описания электронейтральных систем не актуальны. В то же время потребности практики конструирования различных наноустройств и наносистем требуют работы с потенциалами с компактным носителем, обеспечивающим движение электронов в ограниченном объеме [5]. Интуитивно понятные требования к потенциалу сводятся к наличию у выбранной зависимости минимума в ограниченной области, свидетельствующему о некотором равновесном состоянии в системе [6].

Для задач расчета временной динамики квантовых систем особого типа (квантовое кольцо, квантовая точка и др.) в работе [7] применяется метод расщепления по физическим факторам с использованием разложения решения нестационарного уравнения Шредингера по собственным функциям стационарной задачи. Данные функции составляют ортогональный базис.

Существуют значительные ограничения на применение метода расщепления по физическим факторам для этой задачи. Во-первых, вид потенциала V(r) фиксирован (в силу класса известных аналитических решений):

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \tag{1}$$

где a_1, a_2 и V_0 — некоторые константы.

Во-вторых, аналитическое решение стационарного уравнения Шредингера

$$\dot{H}\Psi = E\Psi \tag{2}$$

может быть получено только для граничных условий вида [8]

$$\Psi(0) = \Psi(\infty) = 0. \tag{3}$$

¹ Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ, Студгородок 1, 249040, г. Обнинск, Калужская обл.; А.А. Брызгалов, аспирант, e-mail: sandro185@mail.ru; Ф.И. Карманов, доцент, e-mail: fikarm@yandex.ru

⁽с) Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова

Обобщенный вариационный метод в силу однородных граничных условий

$$\Psi(R_1) = \Psi(R_2) = 0, \tag{4}$$

где R_1 и R_2 — внутренний и внешний радиусы кольца, является удачным инструментом для получения базисных функций, которые, в свою очередь, используются в методе расщепления по физическим факторам.

Данный подход является численно-аналитическим, что определяет более высокую точность, чем в численных методах [7]. Кроме того, применение вариационного базиса позволяет сохранить методику расщепления и фактически расширить границы применимости для областей конечного размера с минимальной потерей точности.

Задача о временно́й динамике рассматривается в качестве подготовительного этапа для моделирования процессов туннелирования электронов через наноструктуры.

2. Обобщенный вариационный метод. Следующие шаги позволят кратко воссоздать процедуру обобщенного вариационного метода.

1. Пусть уравнение Шредингера (2) имеет аналитическое решение с граничными условиями вида (3).

2. Рассмотрим ограниченную область Dс непроницаемой границей. Это означает, что в гамильтониане \hat{H} будет учтен дополнительный удерживающий потенциал типа

$$V_a(r) = \begin{cases} 0, & r \in D, \\ \infty, & r \notin D. \end{cases}$$
(5)

3. Тогда в качестве пробной функции выбирается

$$\Psi_{\rm var} = \psi(\alpha, r) \tag{6}$$

с модифицированной координатой, содержащей информацию об энергетических свойствах системы.

4. Энергию системы оценим путем минимизации функционала

$$E \ge \min_{\tau} \int_{\tau} \Psi_{\mathrm{var}}^* \widehat{H} \Psi_{\mathrm{var}} \, d\tau$$

$$\int_{\tau} \Psi_{\rm var}^* \Psi_{\rm var} \, d\tau = 1.$$



Рис. 1. Двумерное квантовое кольцо

в однородном магнитном поле

5. Неизвестный вариационный параметр может быть рассчитан из условия

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0.$$
 (9)

3. Электрон в двумерном квантовом кольце. Рассмотрим электрон с эффективной массой μ и зарядом *e*, находящийся в двумерном квантовом кольце в присутствии сильного магнитного поля. Вектор напряженности магнитного поля направлен перпендикулярно плоскости кольца (рис. 1), а потенциал кольца определен в (1).

Точное решение данной задачи приводится в работе [8] для граничных условий (3):

$$\psi(r) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^{M(m)} \exp\left(-\frac{r^2}{4\lambda^2}\right) {}_1F_1\left(-n, M(m) + 1, \frac{r^2}{2\lambda^2}\right),\tag{10}$$

где $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}, M = \sqrt{m^2 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}}, \omega = \sqrt{\frac{e^2H^2}{\mu^2} + \frac{8a_2}{\mu}}; {}_1F_1$ — вырожденная гипергеометрическая функция и m — квантовое число углового момента. Далее, используем эту функцию для получения уровней энергии

и m — квантовое число углового момента. Далее, используем эту функцию для получения уровней энергий и волновых функций электронов в ограниченной области, заменив r на αr :

$$\psi(r) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\alpha r}{\lambda}\right)^{M(m)} \exp\left(-\frac{(\alpha r)^2}{4\lambda^2}\right) {}_1F_1\left(-n, M(m) + 1, \frac{(\alpha r)^2}{2\lambda^2}\right).$$
(11)

Такой выбор не влияет на общую процедуру разделения переменных и сохраняет цилиндрическую симметрию. Кроме того, при постоянном α функции (11) являются ортогональными с весом αr . Это легко проверить, сделав обратную замену $\alpha r \to x$. В соответствии с формулами (7)–(9) находим значение параметра α , а значит, приближенные значения энергии и волновые функции.

Новые базисные функции могут быть использованы в методе расщепления по физическим факторам, описанным в работе [7] для решения нестационарного уравнения Шредингера. В данном методе решение уравнения Шредингера получается аналитически на одном временном слое. Использование вариационных базисных функций вида (11) позволяет сохранить схему расщепления без изменений.

4. Варианты выбора области. Так как данная работа выполняется с целью использования вариационных функций в качестве базиса для разложения, выявим области, для которых предлагаемая методика является наиболее эффективной. Разложение по базису представляется следующим соотношением [3]:

$$\Psi = \sum_{n} C_n \psi_n,\tag{12}$$

где *n* стремится к бесконечности и C_n — коэффициенты разложения. При практических вычислениях сумма берется по 8–16 первым членам. Это обусловлено, с одной стороны, уменьшением погрешности, связанной с ограниченностью набора ψ_n , а с другой стороны, с погрешностью, вызванной приближенным вычислением больших матриц, их обращением и др. Кроме того, вклад от слагаемых с ростом *n* уменьшается. В то же время для случая области, содержащей незначительное число состояний (менее 8 базисных функций), число слагаемых в разложении недостаточно для сохранения необходимой точности. В таком случае необходимо дополнить базис функциями другого типа. Подробнее об этом в разделе 7.



Рис. 2. Модификация формы потенциала V(r): а) сдвиг влево относительно минимума; б) сдвиг вправо относительно минимума

Для потенциала вида (1) существует несколько возможностей выбора ограниченной области (рис. 2): области, содержащие минимум потенциала, и области, не содержащие минимум потенциала. Естественный интерес представляет только первый тип областей из-за приближенности к реальным системам.

В свою очередь, есть три возможности для областей, включающих минимум потенциала:

а) симметричная относительно минимума R_{\min} область $(R_{\min} - R_1 = R_2 - R_{\min})$; в таком случае $\alpha = 1$ для всех возможных состояний, однако число состояний конечно;

б) несимметричная область со сдвигом влево; в силу модификации координаты имеем $\alpha > 1$.

в) несимметричная область со сдвигом вправо, $\alpha < 1$.

Рассмотрим область со сдвигом влево от минимума потенциала (230–550 нм) и со сдвигом вправо (280–600 нм).

5. Алгоритм расчета. Согласно формулам (5)–(9), расчеты представляют собой технически сложную задачу, так как необходимо работать с полиномами высоких степеней вида (11). Некоторые приемы, описываемые далее, позволят сократить время расчета.



Рис. 3. Зависимость энерги
иEот вариационного параметра α : для област
и 230–550 нм а)n=7и б)n=8;для области 280–600 нм в
)n=7и г) $n=8.\ I$ — интервалы, удовлетворяющие граничным условиям и уменьшающиеся с ростом n

Алгоритм поиска минимума функции $E(\alpha)$ по формуле (9) можно описать на основе рис. 3. Имеется несколько минимумов на показанном интервале. Ясно, что для случая, когда значениями волновой функции на границах области можно пренебречь, имеем $\alpha = 1$. Как видно на рисунке, именно в этой точке есть минимум.

Перейдем к случаям, показанным на рис. 2. При значительном сокращении рассматриваемой области основным критерием поиска вариационного коэффициента α становятся граничные условия (4). При изменении α происходит смещение волновой функции ψ_{var} вдоль оси r. Поиск минимума согласно (9) теперь является вторичным аспектом. Таким образом, можно подобрать оптимальное значение α . Выделим (рис. 3) промежуток значений α , удовлетворяющий граничным условиям, а затем найдем минимум функции E внутри этого промежутка. Ввиду того что с ростом n волновая функция занимает большее пространство, минимум функции $E(\alpha)$ будет находиться в разных пространственных точках для разных значений n (соответственно, α будет зависеть от n). Однако если использовать базис с переменным α , то смещенные значения уровней энергии изменят структуру эффективного потенциала [6], чего быть не должно. Кроме того, такой набор волновых функций (11) окажется неортогональным как раз из-за изменения $\alpha(n)$.

Строго говоря, для какого-то n_{max} может не найтись α , при котором граничные условия (4) выполняются с заданной точностью. С физической точки зрения это будет означать, что существует ненулевая вероятность нахождения частицы в недоступной области (за бесконечно высокими стенками), что противоречит постановке задачи. Поэтому при построении базиса необходимо определить $n_{\rm max}$, при котором граничные условия выполняются. Таким образом, поиск α сводится к минимизации функционала (7) для $n_{\rm max}$. Если граничные условия (4) выполняются для волновой функции с $n_{\rm max}$, то для всех функций с меньшим n они также будут выполняться ввиду меньшей пространственной протяженности.

Таким образом, для расчетов вариационного базиса необходимо вычислить α только для одной функции с $n = n_{\text{max}}$, а затем рассчитать значения уровней энергии по известному α .





6. Приближенная оценка максимального значения *n***.** Некоторые оценки помогут относительно быстро определить максимально возможное *n* для данной ограниченной системы.

Первая грубая оценка — нижняя точка перехода потенциала квантового кольца в потенциал квантовой ямы. Рассчитав уровни энергии для бесконечной области согласно [8], можно сделать предельную оценку сверху числа возможных состояний, относящихся к нижней части потенциала (например, на рис. 5 — зона 1). Данная оценка также достаточно точна для областей, ограниченных с одного края. В случаях, рассматриваемых в настоящей статье, $n_{\rm max}$ определяется согласно критерию удовлетворения граничных условий. Поэтому, исходя из известного решения для граничных условий (3) и вида ограниченного потенциала, сделаем приближенную оценку $\Delta \tilde{x}$ области, которую будет занимать собственная функция (11) без расчета вариационного коэффициента α , а затем произведем сравнение полученной величины $\Delta \tilde{x}$ с размером области Δr , охватываемой потенциалом. Если оценка области, занимаемой собственной функцией (11) для конкретного n = n', меньше, чем Δr , то уровень n' существует. Последнее существующее n' является $n_{\rm max}$.

Для того чтобы сделать оценку $\Delta \tilde{x}$, необходимо произвести ряд промежуточных действий: оценить пространственное расстояние, занимаемое собственной волновой функцией (10), рассчитать коэффициент сдвига G и определить Δx из формулы

$$\Delta \widetilde{x} = G \Delta x. \tag{13}$$

Расчет коэффициента сдвига *G* является определяющим в указанной процедуре. Предлагаемая далее методика получена интуитивным путем и для сильно смещенных областей не дает точного результата.

На рис. 4 рассматривается потенциал в сравнении с параболой $U(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 (r - r_0)^2$, имеющей схожие характеристики согласно [8]. Рассмотрим в отдельности отношение S_{left} площадей под потенциалом (1) и под параболой на промежутке $[R_1, R_{\min}]$ слева от минимума и S_{right} — на промежутке $[R_2, R_{\min}]$ справа от минимума. Ввиду асимметрии (1) первая величина превысит 1, а вторая будет меньше 1 на некоторую величину. Отличие от 1 характеризует сдвиг области, а "знак" определяет направление.

Рассчитаем G, например таким образом:

$$G = S_{\text{left}}S_{\text{right}}, \quad S_{\text{left}} = \int_{R_1}^{R_{\text{min}}} V(r) \, dr \left(\int_{R_1}^{R_{\text{min}}} U(r) \, dr\right)^{-1}; \quad S_{\text{right}} = \int_{R_{\text{min}}}^{R_2} V(r) \, dr \left(\int_{R_{\text{min}}}^{R_2} U(r) \, dr\right)^{-1}$$

Расчеты $\Delta \tilde{x}$ представлены в табл. 1.

Таблица 1

Размеры областей, занимаемых собственными волновыми функциями для различных областей, рассчитанные вариационным методом Δx и по формуле (13) $\Delta \tilde{x}$

n	$(0;\infty)$	230–550 нм	230–550 нм (13)	280–600 нм	280–600 нм (13)
15	365.4	340.8	345.6	381.9	372.2
14	357.4	333.0	338.0	373.3	364.0
13	348.8	325.0	329.9	364.6	355.2
12	340.0	317.0	321.6	355.2	346.3
11	331.0	308.4	313.0	345.8	337.1
10	321.4	299.7	304.0	336.0	327.4
9	311.8	290.7	294.9	325.7	317.6
8	301.4	281.1	285.0	315.0	307.0
7	290.8	271.1	275.0	303.6	296.2
6	279.4	260.4	264.0	291.7	284.6
5	267.2	249.4	252.7	278.9	272.1
4	254.2	237.3	240.4	265.4	258.9
3	240.0	224.0	227.0	250.5	244.4
2	224.2	209.4	212.0	234.0	228.3
1	206.0	192.5	194.8	214.8	209.8
0	183.2	171.2	173.3	191.1	186.6

Как видно из табл. 1, для ограниченной области со сдвигом влево (230–550 нм) максимально доступное состояние с n = 12, а для области со сдвигом вправо — с n = 8. Отметим, что сравнение нужно делать в обоих случаях с $\Delta r = 550 - 230 = 600 - 280 = 320$ нм. Используя (13), получаем значения n = 11 и n = 9 соответственно для областей со сдвигом влево и со сдвигом вправо. Существенную ошибку можно объяснить тем, что в (13) не учитывается сжатие/расширение волновой функции с ростом отличия α от единицы. При замене $r \to \alpha r$ меняется величина нормировочного коэффициента, а следовательно, и пространственный размер волновой функции (11) изменится.

Расчет такого коэффициента возможен при известном α , но в рамках данной работы такие вычисления не производятся.

Тем не менее, предложенный подход поиска максимального n позволяет заметно сократить затрачиваемое на расчеты время. Кроме того, согласно табл. 1 для областей со сдвигом влево $\Delta \tilde{x} > \Delta x$, а для областей со сдвигом вправо $\Delta \tilde{x} < \Delta x$, что позволит ориентироваться при поиске n_{max} .

7. Случай, когда $n_{\text{max}} < 7$. Для этого типа задач необходимо включение дополнительных собственных функций и значений уровней энергии, поскольку вариационных базисных функций недостаточно для сохранения допустимого уровня точности.

Строго говоря, необходимо рассматривать три типа энергетических зон (рис. 5): зона, определяемая потенциалом V(r); переходная зона; зона, определяемая потенциалом ямы с бесконечно высокими стенками.

Следует понимать, что в рассматриваемом круге задач присутствует однородное магнитное поле. А это означает наличие дополнительного потенциала (в том числе и для квантовой ямы) вида

$$V_{\rm mag} = \left(\frac{m}{r} - \frac{r}{2a_n^2}\right)^2,\tag{14}$$

где $a_n = \sqrt{\frac{\hbar}{eH}}$. В таком потенциале, например при m = 0, волновой пакет в процессе эволюции будет "собираться" вблизи центра координат (цилиндрическая яма) либо вблизи минимума коаксиальной обла-

сти. Рассмотрение временной динамики для волнового пакета в квантовой яме с потенциалом типа (14), обусловленным магнитным полем, является, вообще говоря, некорректным. Однако решение такой задачи необходимо для конструирования полного базиса. В разделе 10 рассматривается случай расчета базисных функций для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками в однородном магнитном поле.

В большинстве случаев нет необходимости учитывать переходную зону при составлении базиса разложения, а для недостающих базисных функций и значений энергии воспользоваться решением для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками. Кроме того, необходимо выполнить процедуру ортогонализации полученного комбинированного базиса. Подтверждением согласованности такого выбора служит то, что функции вида (10) при $n \to \infty$ переходят в функции Бесселя [9].

С другой стороны, когда учет переходной зоны необходим, рассматривается совокупность решений для ямы переменной ширины. Вариант расчета уровней энергии и собственных функций в таком случае требует использования численных методов или же разработки специального подхода. В рамках настоящей статьи такие расчеты не производятся.

8. Примеры расчета вариационного набора. Рассмотрим приближенно неограниченную область $\psi(\infty) \approx \psi(R_2) \approx 0; \psi(0) \approx \psi(R_1) \approx 0$ — случай, когда значениями волновой функции на границах области можно пренебречь. Полученные результаты представлены в табл. 2. Сравнение производится с точным значением, полученным по следующей формуле для энергии [8]:

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M(m)}{2}\right)\hbar\omega - m\frac{\hbar\omega_c}{2} - \frac{\mu\omega_0^2 r_0^2}{4}, \quad n = 0; 1; 2; \dots, \quad \omega_c = \frac{eH}{\mu}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}.$$

	H = 0		$H = 10^4 \ \Gamma c$						
n	$(0,\infty)$	200–1400 нм	$(0,\infty)$	50–750 нм	230–550 нм		280-600 нм		
	E_{exact}	$E_{\rm var}$	E_{exact}	$E_{\rm var}$	$E_{\rm var}$	ΔE	$E_{\rm var}$	ΔE	
0	0.2248	0.2248	85.4664	85.4664	86.6646	1.1969	85.9357	0.4680	
1	0.6745	0.6745	87.2530	87.2530	88.4699	1.2157	87.7296	0.4754	
2	1.1241	1.1241	89.0396	89.0396	90.2753	1.2344	89.5236	0.4827	
3	1.5737	1.5737	90.8262	90.8262	92.0807	1.2532	91.3175	0.4901	
4	2.0233	2.0233	92.6127	92.6128	93.8861	1.2720	93.1115	0.4974	
5	2.4730	2.4729	94.3993	94.3993	95.6914	1.2908	94.9054	0.5121	
6	2.9226	2.9226	96.1859	96.1859	97.4968	1.3095	96.6994	0.5194	
7	3.3722	3.3722	97.9725	97.9725	99.3022	1.3283	98.4933	0.5268	
8	3.8219	3.8219	99.7591	99.7591	101.1076	1.3471	100.2872	0.5341	
9	4.2715	4.2715	101.5456	101.5457	102.9129	1.3659	101.1510	-0.3961	
10	4.7211	4.7211	103.3322	103.3223	104.7183	1.3846	102.8801	-0.4536	
11	5.1708	5.1708	105.1188	105.1190	106.5236	1.4033	104.6092	-0.5111	
12	5.6204	5.6204	106.9054	106.9054	108.3292	1.4236	106.3382	-0.5686	
13	6.0700	6.0699	108.6920	108.6789	109.7964	1.1029	108.0673	-0.6262	
14	6.5197	6.5212	110.4786	110.4918	111.5255	1.0454	109.7964	-0.6837	
15	6.9693	6.9691	112.2651	112.3081	113.2546	0.9879	111.5254	-0.7412	

Значения уровней энергии для различных вариантов выбора рассматриваемой области

Отличие α от единицы пренебрежимо мало, а совпадение значений уровней энергии имеется до четвертого знака (см. табл. 2).

В связи с этим наибольший интерес представляет случай, когда рассматриваемая область настолько мала, что нельзя пренебречь значениями волновой функции на границах области. Для большей наглядности выбраны случаи сильного магнитного поля в промежутке 230–550 нм (область со сдвигом влево от минимума потенциала) и 280–600 нм (область со сдвигом влево от минимума потенциала).

На основе описанной процедуры были рассчитаны вариационные коэффициенты и уровни энергии E(n). Результаты представлены в табл. 2. Для области 230–550 нм $\alpha = 1.07514$, а для 280–600 нм $\alpha = 0.955638$. Кроме того, курсивом отмечены уровни энергии, полученные из решения задачи для квантовой ямы (19).

Таблина 2

Точность расчета вариационным методом демонстрируется на рис. 6. Собственная волновая функция для n = 12 рассчитана также непрерывным аналогом метода Ньютона (НАМН) [10]. Как можно видеть, результат расчета численным методом удовлетворяет граничным условиям (4) не точно. Кроме НАМН также проведены сравнения с методом фазовых функций [11] и методом стрельбы [11], которые воспроизводят аналогичный НАМН результат. Несмотря на то что формально граничное условие на правой границе удовлетворено, функция, полученная НАМН, скорее характерна для случая квантовой ямы. Однако потенциал V(r) близок к потенциалу квантового осциллятора. Следовательно, поведение волновой функции должно быть "плавным" вблизи границ области, что и демонстрирует функция вида (11).

Численные методы, упомянутые выше, также не дают возможности получить адекватные сдвиги уровней энергии ΔE . Например, с применением метода фа-



Рис. 6. Функция Ψ_{var} (n = 12) и ее аналог, полученный с помощью непрерывного аналога метода Ньютона, в области 230–550 нм

зовых функций сдвиг $\Delta E_{10} = 0.036$ мэВ для области со сдвигом вправо (280–600 нм).

Таким образом, методика с использованием обобщенного вариационного метода позволяет получить уровни энергии и волновые функции, адекватные выбираемым граничным условиям.



Рис. 7. Плотность вероятности |Ψ²|: а), б), в) — трехмерный график; г), д), е) — линии уровней. Случай сильного магнитного поля с использованием "стандартного" базиса а) и г); вариационного базиса б) и д) — область 230–550 нм; комбинированного базиса в) и е) — область 280–600 нм

9. Применение вариационного базиса. Будем использовать в качестве базисных функции (11) с коэффициентами *α*, полученными в предыдущем разделе, а также соответствующие уровни энергии. Таким образом, мы получим решение нестационарного уравнения Шредингера в ограниченных областях

различного типа.

Визуализация движения волнового пакета в потенциале V(r) представлена на рис. 7 (сильное магнитное поле). Результат для случая на рис. 7а и 7г идентичен результату из [7]. Визуализация рис. 7б и 7д демонстрирует результат расчета по методу расщепления по физическим факторам в области 230–550 нм с использованием только вариационного базиса. В случае области 280–600 нм (рис. 7в и 7е) применялся комбинированный базис с использованием собственных функций двух типов: для n = 0, ..., 8 — функции (11), а для n = 9, ..., 15 — функции вида (18).

Основным отличием в поведении плотностей вероятности для смещенных областей является изменение минимума эффективного потенциала: для стандартного случая — это 400 нм, в других случаях есть смещение соответственно влево и вправо. В целом наблюдается периодическое движение волнового пакета с течением времени — это процессы сжатия/расширения. Подобное поведение является характерным для случая сильного магнитного поля.

Аналогичный расчет для эволюции плотности вероятности можно произвести с использованием численных методов прогонки и стрельбы. Однако влияние изменения границ области в соответствии с рис. 2 никак не воспринимается методами. Результат аналогичен расчету с граничными условиями (3) (рис. 7а и 7г). Кроме того, как указывалось в [7], численные методы уступают в точности методу расщепления по физическим факторам, а также не дают выигрыша во времени расчета.

Таким образом, предложенный подход сочетания вариационного метода с методом расщепления по физическим факторам является доступным инструментом для получения временной динамики, при этом традиционные методы с задачей подобного типа не справляются.

10. Решение нестационарного уравнения Шредингера для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками в цилиндрической геометрии в магнитном поле.

Для построения решения задачи о квантовой яме с бесконечно высокими стенками в цилиндрической геометрии в магнитном поле можно воспользоваться схожими преобразованиями, применяемыми в случае квантового кольца [7]. В уравнении $i\hbar \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \right)^2 \Psi(\boldsymbol{r},t) + V(r)\Psi(\boldsymbol{r},t)$ следует лишь принять V(r) = 0. В результате получим задачу с граничными и начальными условиями вида

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi(r,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{4r^2}\right)\psi(r,t) + \left(\frac{m}{r} - \frac{reH(t)}{2\hbar c}\right)^2\psi(r,t),\\ \psi(R_1,t) = \psi(R_2,t) = 0,\\ \psi(r,0) = A_0 \exp\left(-\frac{(r-R_0)^2}{2\sigma^2}\right). \end{cases}$$
(15)

Дальнейший ход решения этого уравнения зависит от выбираемых критериев. Для сохранения схемы расщепления [7] рассмотрим два уравнения упрощенного типа:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi^H}{\partial t} = \left(\frac{-meH(t)}{\hbar c} + \frac{r^2 e^2 H(t)^2}{4(\hbar c)^2}\right) \psi^H, \\ \psi^H(t=0) = A_0 \exp\left(-\frac{(r-R_0)^2}{2\sigma^2}\right); \end{cases}$$
(16)

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi^R}{\partial t} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{0.25 + m^2}{r^2} \right) \psi^R, \\ \psi^R(t_k) = \psi^H(t_k); \quad \psi^R(R_1) = \psi^R(R_2) = 0. \end{cases}$$
(17)

Уравнение (16) полностью повторяет решение для квантового кольца [7] для случая постоянного магнитного поля: $\psi^{H} = \exp\left(-i \int\limits_{t_{k-1}}^{t_{k}} \left(\frac{m}{a_{n}^{2}} - \frac{r^{2}}{4a_{n}^{4}}\right) dt\right)$. Решение уравнения (17) можно представить в виде

$$\psi^{R} = \left(C_{1}J_{m}\left(\sqrt{E}\,r\right) + C_{2}Y_{m}\left(\sqrt{E}\,r\right)\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,E_{n,m}\tau\right),\tag{18}$$

где J_m и Y_m — функции Бесселя и Неймана соответственно. Дальнейшее решение зависит от вида граничных условий. В случае (3) или (4) константа $C_2 = 0$, так как функция Y_m не соответствует физическому

условию убывания вправо в недоступную область [6]. В то же время для равенства нулю на левой границе интервала J_m необходимо, чтобы аргумент \sqrt{Er} принимал значения, отвечающие нулям функции Бесселя. Константа C_1 может быть найдена из условия нормировки (8).

Однако применение такого подхода в случае магнитного поля не позволяет получить значения уровней энергии, учитывающих влияние и размеров пространственной области. Тем не менее, полученные собственные функции могут быть использованы в разложении (12).

С другой стороны, уравнение (15) можно решить и без применения схемы расщепления. В итоге получим

$$\psi(r,t) = C(0.5z)^{0.5m+0.5} \exp(-0.25z)_1 F_1 \left(0.5 - 0.5 \left(Ea_n^2 \right), m+1, 0.5z \right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E\tau\right).$$

Для граничных условий (3) уровни выражаются аналитически из условия ограниченности гипергеометрической функции на левой границе:

$$0.5 - 0.5(Ea_n^2) = n \Rightarrow E = \frac{2n+1}{a_n^2}.$$
(19)

В случае (4) условие нахождения значений возможных уровней энергии рассчитывается из соотношения

$${}_{1}F_{1}\left(0.5 - 0.5\left(Ea_{n}^{2}\right), m + 1, \frac{(R_{2} - R_{1})^{2}}{2a_{n}^{2}}\right) = 0.$$

В случаях, рассматриваемых в настоящей статье, формула (19) дает результат, максимально близкий к численному расчету, несмотря на использование граничных условий (4). Это связано с тем, что влияние ширины квантовой ямы мало, а сдвиг уровня по сравнению с бесконечным случаем составляет величину менее 0.01 мэВ (для ширин более 150 нм).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Мессиа А. Квантовая механика. М: Наука, 1978.
- 2. Варенцова С.А., Пономарева Е.В., Трофимов В.А. О расчете собственных значений и собственных функций одномерного уравнения Шредингера на адаптивных сетках // Вест. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. Матем. Киберн. 2000. № 3. 23–28.
- 3. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2001.
- 4. Marin J.L., Cruz S.A. On the use of direct variational methods to study confined quantum systems // Am. J. Phys. 1991. **59**, N 10. 931–935.
- 5. Viefers S. et al. Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents // Physica E 21. 2004. 1–35.
- 6. Захарьев Б.Н. Уроки квантовой интуиции. Дубна: ОИЯИ, 1996.
- Брызгалов А.А., Карманов Ф.И. Метод расщепления по физическим факторам в задаче о временной динамике волновых функций электронов двумерного квантового кольца // Математическое моделирование. 2010. 22, № 6. 15–26.
- Tan W-C., Inkson J.C. Electron states in two-dimensional ring an exactly solvable model // Semicond. Sci. Technol. 1996. 11. 1635–1641.
- 9. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
- Гавурин М.К. Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итерационных методов // Изв. ВУЗов. Математика. 1958. 5(6). 18–31.
- 11. Калиткин Н.Н. Численные методы. М: Наука, 1980.

Поступила в редакцию 05.09.2010