

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ КУЛОНОВСКОГО ЦЕНТРА, РАСПОЛОЖЕННОГО В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ

Л. Ф. МАКАРЕНКО, А. Л. КИНДЯЕВ (МИНСК, БЕЛАРУСЬ)

В работе рассмотрено применение вариационного метода к нахождению уровней энергии кулоновского центра, расположенного вблизи непроницаемой перегородки. Такая задача представляет интерес для анализа работоспособности квантового компьютера на основе кремния (предложение Кейна [1]). Гамильтониан задачи строился с учетом потенциала сил изображения (рис. 1).

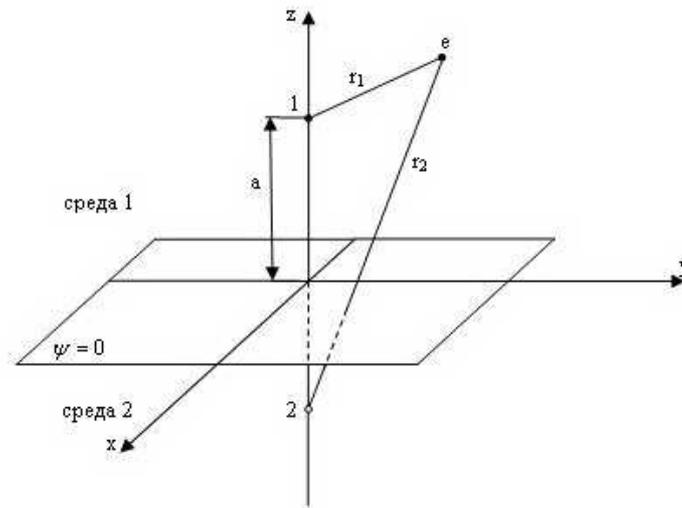


Рис.1. Система координат, используемая для моделирования. Начало координат выбрано на границе раздела. Ось OZ представляет собой перпендикуляр к границе, проходящий через положительный заряд, находящийся в точке 1. В точке 2 находится его изображение

Для расчетов использовались базисы различного типа: слейтеровские орбитали в сферической системе координат, слейтеровские орбитали в системе координат вытянутого сфероида. Установлено, что для изотропного полупроводника предпочтительным является базис слейтеровских орбиталей в системе координат вытянутого сфероида. Использование базиса слейтеровские орбитали в сферической системе координат ведет к необходимости вычисления интегралов с использованием численных методов при большом размере базиса. Также большой размер базиса требуется и при использовании гауссовых орбиталей, но в этом случае все требуемые интегралы вычисляются аналитически. Изучена зависимость энергии основного состояния донора от размера базиса. Показано, что для получения той же самой погрешности, размер базиса гауссиан больше, чем для базиса слейтеровских орбиталей. Однако при этом количество гауссовых базисных функций не является слишком большим, чтобы препятствовать их применению. Для изотропного случая предложена достаточно простая пробная функция, позволяющая воспроизвести основные особенности зависимости энергии основного состояния центра от расстояния до границы. Как показали наши исследования, для

анизотропного случая предпочтительным является базис гауссиан. Проведены расчеты зависимости энергетических уровней от расстояния до перегородки при различных ориентациях главных осей тензора эффективной массы.

Литература

1. Kane, B. *A silicon-based nuclear spin quantum computer* / B. Kane. // Nature. 1998. Vol. 393. P. 133.

АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЯМ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

В. В. Малышиц, А. А. Сокольский, Л. Ф. Макаренко (Минск, Беларусь)

Для нахождения собственных значений энергии и собственных функций в большинстве задач квантовой механики существует необходимость решать стационарное уравнение Шредингера (УШ). При этом во многих случаях задачу удается свести к одномерному УШ с тем или иным эффективным потенциалом [1]. В настоящем сообщении представлен алгоритм, позволяющий находить собственные значения и волновые функции для задач с потенциалом произвольной формы, имеющим один минимум (для одномерной потенциальной ямы).

Поиск собственных значений энергии и волновых функций в представляемом алгоритме проводится в два этапа:

- этап разбиения энергии на интервалы, содержащие по одному уровню в каждом;
- этап расчета собственных значений энергии с заданной точностью.

На обоих этапах решения для каждого рассматриваемого значения энергии E область значений независимой переменной x разбивается на три области (рис. 1): классически разрешенная область ($x_l < x < x_r$) и области слева ($x < x_l$) и справа ($x > x_r$) от нее. В качестве начальной точки для процесса решения УШ выбирается значение $x = x_l$, для которого задаются пробные значения функции $\psi(x_l)$ и ее первой производной $\psi'(x_l)$.

Интегрирование УШ начинается с точки $x = x_l$ в сторону убывания x при некоторых пробных значениях $E_k > U_{min}$ и $\psi'(x_l) > 0$. В течение этого процесса модуль $\psi(x)$ сначала убывает, а затем начинает возрастать до бесконечности. Изменяя начальное значение $\psi'(x_l)$, мы повторяем процесс, пока не будет найдено такое значение производной $\psi'(x_l)$, при котором $\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0$.

Используя найденное значение $\psi'(x_l)$, программа начинает интегрировать УШ от точки $x = x_l$ в направлении возрастания x . В классически разрешенной области ($x_l < x < x_r$) решение имеет осциллирующий характер. Однако при продолжении процесса решения в области $x > x_r$ при произвольно взятом значении энергии E начнется быстрое возрастание модуля $\psi(x)$. В точке $x = x^*$, в которой такое возрастание началось, процесс расчета прерывается, а программа запоминает значение $Z(E_k) = \text{Sign}[\psi(x^*)]$ - знак $\psi(x)$ в точке $x = x^*$.

Затем все эти действия повторяются при $E_{k+1} = E_k + \delta E$, $\delta E > 0$ и далее выполняются итеративно. Если при некотором m значения $Z(E_{m+1})$ и $Z(E_m)$ становятся противоположными, программа отмечает, что собственное значение энергии E заключено внутри интервала $\{E_m, E_{m+1}\}$. Расчет продолжается, пока все уровни энергии не