

Анализ моделей полупроводниковых наноструктур методом Канторовича

А.А. Гусев¹, В.П. Гердт¹, О. Чулуунбаатар¹, С.И. Виницкий²,
Э.М. Казарян³, А.А. Саркисян³

¹Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ; ²Лаборатория теоретической физики, ОИЯИ;
³Российско-Армянский (Славянский) университет (РАУ), Ереван, Армения

Многошаговое обобщение метода Канторовича

Начиная с работы Борна и Опенгеймера адиабатический метод применяется для решения различных задач физики, используя идею приближенного разделения “быстрых” \vec{x}_f и “медленных” \vec{x}_s переменных в гамильтониане $H(\vec{x}) = H(\vec{x}_f, \vec{x}_s)$ исходной системы, представимом в виде суммы $H(\vec{x}_f, \vec{x}_s) = H_f(\vec{x}_f; \vec{x}_s) + H_s(\vec{x}_s)$ гамильтонианов быстрой и медленной подсистем с характеристическими собственными энергиями $|\varepsilon_f^{(\min)}| = \hbar\omega_f > |\varepsilon_s^{(\min)}| = \hbar\omega_s$.

В работе [1] предложен алгоритм, обобщающий стандартное адиабатическое разложение Борна для волновой функции $\psi_{n_1}(\vec{x}) \equiv \langle \vec{x} | n_1 \rangle$:

$$\langle \vec{x}_f, \vec{x}_s | n_k \rangle = \sum_{n'_{k+1}} \langle \vec{x}_f | n'_{k+1}, \vec{x}_s \rangle \langle \vec{x}_s, n'_{k+1} | n_k \rangle, \quad (1)$$

по параметрическим базисным функциям $\langle \vec{x}_f | n'_{k+1}, \vec{x}_s \rangle$ быстрой подсистемы с неизвестными вектор-функциями $\langle \vec{x}_s, n'_{k+1} | n_k \rangle$ медленной подсистемы. Усреднение исходной краевой задачи по базисным функциям приводит к краевой задаче для медленной подсистемы, что соответствует методу Канторовича – приведение к обыкновенным дифференциальным уравнениям.

Предполагается, что все независимые переменные $\vec{x} \in \mathbf{X}$ подобласти координатного пространства $\mathbf{X} \subset \mathbf{R}^N$ трактуются как некоторый набор динамически упорядоченных переменных $\vec{x} \mapsto \{\vec{x}_f, \vec{x}_s\}^T = \{x_N \succ x_{N-1} \succ \dots \succ x_1\}^T$, в соответствии с упорядоченным набором параметрических гамильтонианов подсистем $H_i \equiv H_i(x_i; x_{i-1}, \dots, x_1)$, составляющих исходный гамильтониан $H = \sum_{i=1}^N H_{N+1-i}$. В силу этого предположения, применяется метод пошагового усреднения исходного гамильтониана H , что позволяет исключать независимые быстрые переменные (x_N, \dots, x_2) последовательно. Ниже представлен символично-численный алгоритм для многошаговой редукции адиабатических уравнений, соответствующей многошаговому обобщению метода Канторовича (MultiStep Generalization Kantorovich Method – MSGKM) решения многомерных краевых задач,

$$H\psi_{n_1}(\vec{x}) - 2E_{n_1}\psi_{n_1}(\vec{x}) = 0, \quad (2)$$

$$\langle n'_1 | n_1 \rangle = \int dx_N \dots dx_1 \psi_{n'_1}^\dagger(\vec{x}) \psi_{n_1}(\vec{x}) = \delta_{n'_1 n_1},$$

$$H = \sum_{i=1}^N H_{N+1-i}, \quad H_i \equiv H_i(x_i; x_{i-1}, \dots, x_1).$$

с подходящим упорядоченным набором характеристических собственных энергий $|\varepsilon_N^{(\min)}| > |\varepsilon_{N-1}^{(\min)}| > \dots > |\varepsilon_1^{(\min)}|$ гамильтонианов подсистем.

Algorithm MSGKM

Input:

$H = \sum_{i=1}^N H_{N+1-i}$ is initial Hamiltonian dependent on ordered variables $\vec{x} = \{x_N \succ x_{N-1} \succ \dots \succ x_1\}^T$ decomposed to sum of partial Hamiltonians $H_i \equiv H_i(x_i; x_{i-1}, \dots, x_1)$, dependent on subset “faster” x_i and “slower” x_{i-1}, \dots, x_1 variables;

$$H\psi_{n_1} - 2E_{n_1}\psi_{n_1} = 0,$$

$$\langle n'_1 | n_1 \rangle = \int dx_N \dots dx_1 \psi_{n'_1}^\dagger(\vec{x}) \psi_{n_1}(\vec{x}) = \delta_{n'_1 n_1}$$

is main eigenvalue problem for calculation of unknowns

$$\psi_{n_1} \equiv |n_1\rangle \leftrightarrow \langle \vec{x} | n_1 \rangle \equiv \psi_{n_1}(\vec{x}) \text{ and } 2E_{n_1} = \varepsilon_{n_1}.$$

Output:

A set of Eq(k), $k = 1, \dots, N$, is a set of auxiliary parametric eigenvalue problems for calculation of $\psi_{n_k}^{(k)} \equiv \psi_{n_k}^{(k)}(x_N, \dots, x_k; x_{k-1}, \dots, x_1)$ and $\varepsilon_{n_k}^{(k)} \equiv \varepsilon_{n_k}^{(k)}(x_{k-1} \dots x_1)$, where $\psi_{n_1} = \psi_{n_1}^{(1)}$ and $2E_{n_1} = \varepsilon_{n_1}^{(1)}$ are solutions of the main eigenvalue problem.

Local:

$\psi_{n_k}^{(k)} \equiv \psi_{n_k}^{(k)}(x_N, \dots, x_k; x_{k-1}, \dots, x_1)$ and $\varepsilon_{n_k} \equiv \varepsilon_{n_k}^{(k)} \equiv \varepsilon_{n_k}^{(k)}(x_{k-1} \dots x_1)$ are solutions of the auxiliary parametric eigenvalue problems:

$$\left(\sum_{i=N+1-k}^N H_{N+1-i} \right) \psi_{n_k}^{(k)} - \varepsilon_{n_k}^{(k)} \psi_{n_k}^{(k)} = 0,$$

$$\langle n'_k | n_k \rangle = \int dx_N \dots dx_k \psi_{n'_k}^{(k)\dagger} \psi_{n_k}^{(k)} = \delta_{n'_k n_k};$$

$\langle n'_{k+1} | n_k \rangle \equiv \chi_{n'_{k+1} n_k}^{(k)}(x_k; x_{k-1}, \dots, x_1)$ are auxiliary solutions defined as:

$$\langle n'_{k+1} | n_k \rangle = \int dx_N \dots dx_{k+1} \psi_{n'_{k+1}}^{(k+1)\dagger} \psi_{n_k}^{(k)},$$

the brackets $[,]$ means a commutator:

$$\langle n_{k+1} | [H_k, n'_{k+1}] \rangle = \langle n_{k+1} | H_k n'_{k+1} \rangle - \langle n_{k+1} | n'_{k+1} \rangle H_k.$$

$$\mathbf{1: Eq}(N) := \{ H_{n_N} | n_N \rangle - \varepsilon_{n_N} | n_N \rangle = 0,$$

$$\langle \psi_{n_N}^{(N)} | \psi_{n'_N}^{(N)} \rangle = \delta_{n_N n'_N} \}$$

$$\mathbf{2: Eq}(N) \rightarrow \{ |n_N\rangle, \varepsilon_{n_N} \}$$

$$\mathbf{3: for } k := N - 1 : 1 \text{ step } -1$$

$$\mathbf{4: Eq}(k) := \{ (\varepsilon_{n_{k+1}}^{(k+1)} - \varepsilon_{n_k}^{(k)} + H_k) \langle n_{k+1} | n_k \rangle + \sum_{n'_{k+1}} \langle n_{k+1} | [H_k, n'_{k+1}] \rangle \langle n'_{k+1} | n_k \rangle = 0,$$

$\sum_{n'_{k+1}} \int dx_k \langle n_k | n'_{k+1} \rangle \langle n'_{k+1} | n''_k \rangle = \delta_{n_k n''_k} \}.$
5: Eq(k) $\rightarrow \{ \langle n'_{k+1} | n_k \rangle, \varepsilon_{n_k}^{(k)} \}$
6: $|n_k\rangle := \sum_{n'_{k+1}} |n'_{k+1}\rangle \langle n'_{k+1} | n_k \rangle$
7: end for
8: $\psi_{n_1} = |n_1\rangle, 2E_{n_1} = \varepsilon_{n_1}^{(1)}$

Применение и перспективы

В качестве первого шага применения данного алгоритма рассмотрены модели квантовой точки (КТ), квантовой проволоки (КП) [2] и квантовой ямы (КЯ) [3, 4]. В приближении эффективной массы уравнение Шредингера для примесного электрона, находящегося под действием магнитного поля, в КТ, КП или КЯ имеет вид

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}) - \frac{qe^2}{\kappa r_c} \right\} \Psi = E\Psi, \quad (3)$$

где $r_c = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_c)^2}$, q – кулоновский заряд, $z_c \in [-z_0/2, z_0/2]$ – сдвиг заряда q по оси z для КЯ ($z_c = 0$ для КТ и КП), κ – диэлектрическая проницаемость (для GaAs $\kappa = 13.18$), $\mu = \beta m_e$ – эффективная масса электрона, (для GaAs $\beta = 0,067$), $U(\vec{r})$ – параболический потенциал с частотой $\omega = \gamma r_0 \frac{\hbar}{\mu r_0^2}$, $\gamma r_0 \sim \pi^2/3$ – подгоночный параметр (Модель А):

$$U(\vec{r}) \equiv U^A(\vec{r}) = \mu\omega^2(\zeta_1(x^2 + y^2) + \zeta_3 z^2)/2, \quad (4)$$

$r_0 = \sqrt{\zeta_1(x_0^2 + y_0^2) + \zeta_3 z_0^2}$ – радиус КТ ($\zeta_1 = 1$, $\zeta_3 = 1$), КП ($\zeta_1 = 1$, $\zeta_3 = 0$) и КЯ ($\zeta_1 = 0$, $\zeta_3 = 1$). Для сравнения используем модели КТ, КП и КЯ ($\zeta_3 = 1/2$) с потенциалом $U(\vec{r})$ (Модель В)

$$U(\vec{r}) \equiv U^B(\vec{r}) = \{0, 0 < |\vec{r}| < r_0; +\infty, |\vec{r}| \geq r_0\}, \quad (5)$$

$$U(z) \equiv U^B(z) = \{0, |z| < z_0/2; +\infty, |z| \geq z_0/2\}.$$

Направление оси z выбрано вдоль магнитного поля \vec{H} с вектор-потенциалом $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r}$, используются приведенные атомные единицы ($a_B^* = 102 \text{ \AA}$, $Ry^* = 5.2 \text{ МэВ}$) и безразмерный параметр $\gamma = H/H_0^*$, где $H_0^* = 6 \text{ Тл}$. Уравнение (3) при заданном магнитном числе m имеет вид

$$\left(\frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{H}_2(x_f; x_s) + \hat{H}_1(x_s) - 2E \right) \Psi(x_f, x_s) = 0, \quad (6)$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{1}{g_{1f}(x_f)} \frac{\partial}{\partial x_f} g_{2f}(x_f) \frac{\partial}{\partial x_f} + \hat{V}_f(x_f) + \hat{V}_{fs}(x_f, x_s),$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{\partial}{\partial x_s} g_{2s}(x_s) \frac{\partial}{\partial x_s} + \hat{V}_s(x_s).$$

В силу (2), $\hat{H}_2 \equiv \hat{H}_2(x_f; x_s) = g_{3s}(x_s) H_2(x_f; x_s)$ и $\hat{H}_1 \equiv \hat{H}_1(x_s) = H_1(x_s)$ – гамильтонианы быстрой и медленной подсистем, $\hat{V}_{fs}(x_f, x_s) =$

$g_{3s}(x_s) V_{fs}(x_f, x_s)$ – кулоновский потенциал в цилиндрических и сферических координатах:

$$V_{fs}(x_f, x_s) = -\frac{q}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_c)^2}} = -\frac{q}{r_c}. \quad (7)$$

В цилиндрических координатах для КТ и КП $x_f = \rho$, $x_s = z$, $g_{1f}(x_f) = g_{2f}(x_f) = \rho$, $g_{1s}(x_s) = g_{2s}(x_s) = g_{3s}(x_s) = 1$ (Модель А):

$$\hat{V}_f(x_f) = \frac{m^2}{\rho^2} + \gamma m + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + \zeta_1 \omega^2 \rho^2, \quad (8)$$

$$\hat{V}_s(x_s) = \zeta_3 \omega^2 z^2.$$

Для КЯ $x_f = z$, $x_s = \rho$, $g_{1f}(x_f) = g_{2f}(x_f) = 1$, $g_{1s}(x_s) = g_{2s}(x_s) = \rho$, $g_{3s}(x_s) = 1$,

$$\hat{V}_f(x_f) = \zeta_3 \omega^2 z^2, \quad (9)$$

$$\hat{V}_s(x_s) = \frac{m^2}{\rho^2} + \gamma m + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2 + \zeta_1 \omega^2 \rho^2.$$

В сферических координатах $x_f = \eta_c$, $x_s = r_c$, $g_{1f}(x_f) = 1$, $g_{2f}(x_f) = (1 - \eta_c^2)$, $g_{1s}(x_s) = g_{2s}(x_s) = r_c^2$, $g_{3s}(x_s) = r_c^2$ (Модель А)

$$\hat{V}_f(x_f) = \frac{m^2}{1 - \eta_c^2} + 2p\gamma m + \alpha(1 - \eta_c^2) - b\eta_c + f, \quad (10)$$

$$\hat{V}_s(x_s) = \beta r_c^4,$$

где $\alpha = p^2$, $p = \gamma r_c^2/2$, $b = f = 0$, $\beta = \omega^2$ для КТ ($\beta = 0$ для КП) и $\alpha = -c^2$, $c = \omega r_c^2$, $b = -2\omega z_c r_c^3$, $f = \omega z_c r_c^2$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$ для КЯ.

Решение задачи (6) ищем в виде разложения

$$\Psi_i(x_f, x_s) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j(x_f; x_s) \chi_j^{(i)}(x_s). \quad (11)$$

по решениям задачи для быстрой подсистемы

$$\left\{ \hat{H}_2(x_f; x_s) - \hat{E}_i(x_s) \right\} \Phi_i(x_f; x_s) = 0, \quad (12)$$

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int_{x_f^{\min}}^{x_f^{\max}} \Phi_i(x_f; x_s) \Phi_j(x_f; x_s) g_{1f}(x_f) dx_f = \delta_{ij}. \quad (13)$$

Подставляя разложение (11) в уравнение (6) с учетом (12) и (13), (на шаге 4 Алгоритма MSGKM при $N = 2$, $k = 1$) получаем систему ОДУ для медленной подсистемы относительно вектор-функции $\chi^{(i)}(x_s) = \{ \chi_j^{(i)}(x_s) \}_{j=1}^{j_{\max}}$:

$$\mathbf{H} \chi^{(i)}(x_s) = 2E_i \mathbf{I} \chi^{(i)}(x_s), \quad (14)$$

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{I} \frac{d}{dx_s} g_{2s}(x_s) \frac{d}{dx_s} + \hat{V}_s(x_s) \mathbf{I} + \mathbf{U}(x_s) + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} \mathbf{Q}(x_s) \frac{d}{dx_s} + \frac{1}{g_{1s}(x_s)} \frac{d g_{2s}(x_s)}{dx_s} \mathbf{Q}(z).$$

Здесь $\mathbf{U}(x_s) = \mathbf{U}^T(x_s)$ и $\mathbf{Q}(x_s) = -\mathbf{Q}^T(x_s)$ – матрицы размерности $j_{\max} \times j_{\max}$:

$$U_{ij}(x_s) = \frac{1}{g_{3s}(x_s)} \hat{E}_i(x_s) \delta_{ij} + \frac{g_{2s}(x_s)}{g_{1s}(x_s)} W_{ij}(x_s), \quad (15)$$

$$W_{ij}(x_s) = \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \frac{\partial \Phi_i(x_f; x_s)}{\partial x_f} \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_f} g_{1s}(x_s) dx_s,$$

$$Q_{ij}(x_s) = - \int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} \Phi_i(x_f; x_s) \frac{\partial \Phi_j(x_f; x_s)}{\partial x_f} g_{1s}(x_s) dx_s.$$

Решения дискретного спектра подчиняются крайвым условиям для $x_s = z$

$$\chi^{(i)}(x_s^{\min}) = 0, \quad \chi^{(i)}(x_s^{\max}) = 0, \quad (16)$$

крайвым условиям для $x_s = \rho$ или $x_s = r$

$$\lim_{x_s \rightarrow x_s^{\min}=0} g_{2s}(x_s) \frac{d\chi^{(i)}(x_s)}{dx_s} = 0, \quad \chi^{(i)}(x_s^{\max}) = 0, \quad (17)$$

и условиям ортонормировки

$$\int_{x_s^{\min}}^{x_s^{\max}} (\chi^{(i)}(x_s))^T \chi^{(j)}(x_s) g_{1s}(x_s) dx_s = \delta_{ij}. \quad (18)$$

Для модели Б потенциалы $\hat{V}_s(x_s) = 0$ и $\hat{V}_f(x_f) = 0$ и используются: условия (17) при $r_{\max} = r_0$ для (14), (18) в КТ, и условия (16) при $s \leftrightarrow f$, $z_{\min} = -z_0/2$, $z_{\max} = z_0/2$ для (12), (13) в КЯ.

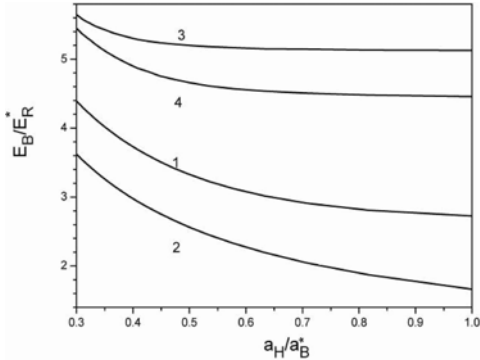


Рис. 1: Зависимости энергии связи электрона E_B/E_R^* от магнитного поля $a_H^*/a_B^* = 1/\sqrt{\gamma}$, $1 \leq \gamma \leq 11$ при $q = 1$, $m = 0$ и фиксированном $r_0 = a_B^*$ радиусе КТ: 1 и 4 – примесный электрон (Модель А) при наличии ограничивающего потенциала с частотой $\omega = 1/r_0^2$ и $\omega = \pi^2/(3r_0^2)$; 3 – примесный электрон в КТ (Модель Б), 2 – примесный электрон без ограничивающего потенциала (Модель А, $\omega = 0$)

Представленные ниже результаты решения задачи на собственные значения (6)–(12) в сферических и цилиндрических координатах получены с помощью программ ODPEVP и KANTVP (см. О. Чулуунбаатар и др. в данном сборнике).

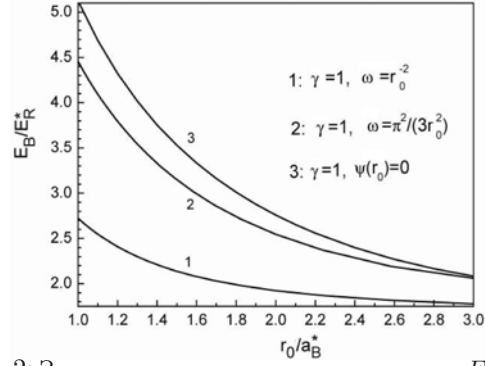


Рис. 2: Зависимости энергии связи электрона E_B/E_R^* от радиуса КТ при фиксированном $\gamma = 1$

Энергия связи примеси, $E_B = E_0 - E_1$, определяется как разность между энергиями электрона в параболической КТ без примеси E_0 ($q = 0$) и с примесью E_1 ($q = 1$).

На Рис. 1 и 2 представлены зависимости $E_B(a_H)$ при фиксированном $r_0 = a_B^*$ и $E_B(r_0)$ при фиксированном $H = H_0^* = 6$ Тл. Как видно из Рис. 1 при увеличении H (уменьшении a_H) энергия связи растёт, поскольку задача приближается к одномерной. Из Рис. 2 видно, что с уменьшением r_0 энергия связи $E_B(r_0)$ увеличивается, т.к. уменьшается область локализации электрона вокруг примесного центра. Из сравнения кривых 1, 4 и 3 на Рис. 1, и кривых 1, 2 и 3 на Рис. 2 видно, что параметр $\gamma r_0 = \pi^2/3$ обеспечивает качественное согласование моделей А и Б.

На Рис. 3 представлены верхние и нижние оценки энергии связи E_B примесного электрона в КЯ, соответственно, для моделей А (в сферических координатах) и Б (в цилиндрических координатах) при $\gamma = 0$ в зависимости от положения примеси z_c , их сходимости по числу базисных функций в разложении (11) и сравнение с вариационными оценками. Как видно из Рис. 3 разложение (11) в цилиндрических координатах имеет более низкую скорость сходимости, что связано с не выполнением условий типа Като [4] в окрестности точки $z = 0$. На Рис. 4 и 5 представлены волновые функции основного примесного состояния КЯ, соответственно, для моделей А и Б. Из рисунков виден сдвиг максимума волновой функции, соответствующий сдвигу кулоновского центра z_c . Полученные оценки позволяют выявить возможные границы интервалов резонансной энергии фотона $E_{ph} = \hbar\omega_{ph}$, в которых будут находиться максимальные значения коэффициента примесной фото-абсорбции $K(\omega_{ph})$ в зависимости от положения примеси в КЯ, измеряемого в эксперименте [5].

Можно ожидать, что предлагаемый подход (2) в многомерном случае ($N \geq 3$) позволит повысить точность вычисления параметрических базисных функций, их производных по параметрам

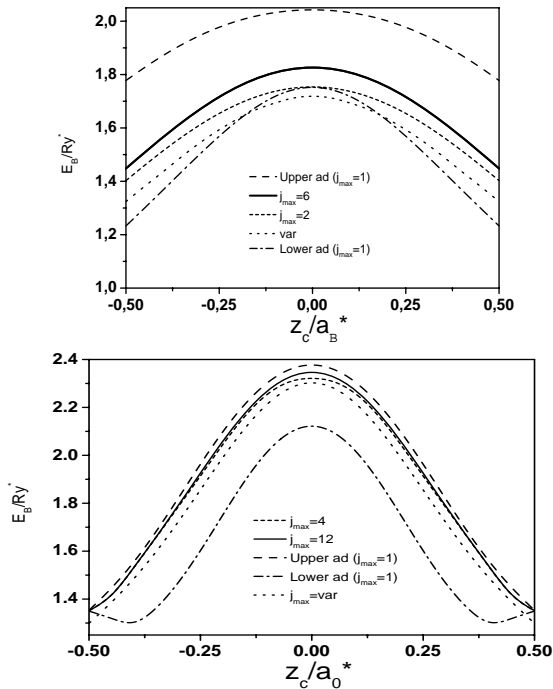


Рис. 3: Зависимость вычисленной энергии связи $E_B/Ry^* = -(2E(z_c) - E_1(\infty))/Ry^*$ КЯ от положения кулоновской примеси z_c , числа базисных функций j_{\max} , а также в грубом адиабатическом (upper ad) и адиабатическом приближении (lower ad) и её сравнение с вариационным расчётом (var): Модель А при $q = 1$, $m = 0$, $\omega = 3$ в сферических координатах и модель Б при $q = 1$, $m = 0$, $z_0 = 1$ в цилиндрических координатах, верхняя и нижняя панель, соответственно

и матричных элементов, подобных (12), (15), и сократить компьютерные ресурсы для их вычисления, используя MPI и GRID технологии.

Работа выполнена в рамках протокола 3967-3-6-09/11 о сотрудничестве ОИЯИ с РАУ в области динамики конечномерных квантовых моделей и наноструктур во внешних полях.

Список литературы

- [1] A.A. Gusev, et al: *Algorithm for reduction of boundary-value problems in multistep adiabatic approximation*. in Proc. of Int. Conf on Computer Algebra and Differential Equations (CADE 2009), October 28–31, 2009 Pamplona, Spain.
- [2] С.И. Виницкий, и др: *Адиабатическое описание примесных состояний квантовой точки в сильном магнитном поле*. Материалы 13-ой Международной школы для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофизике Saratov Fall Meeting, SFM'09, 21-24 сентября 2009г. Россия, Саратов.
- [3] S.I. Vinitzky, et al: *Symbolic-Numerical Algorithms for Solving Parabolic Quantum Well Problem with Hydrogen-Like Impurity*. LNCS **5743** (2009) 334-349.

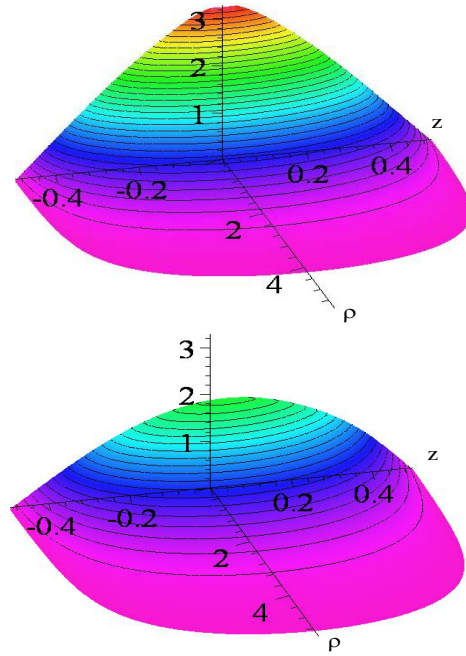


Рис. 4: Волновые функции основного примесного состояния КЯ (Модель А) при $q = 1$, $m = 0$, $\omega = 3$ и значения сдвига кулоновского центра: верхняя панель $z_c = 0$, нижняя панель $z_c = 0.4$

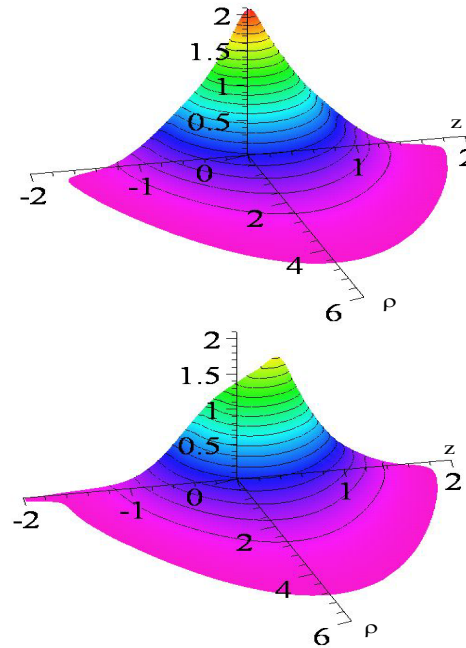


Рис. 5: Волновые функции основного примесного состояния КЯ (Модель Б) при $q = 1$, $m = 0$, $z_0 = 1$ и значения сдвига кулоновского центра: верхняя панель $z_c = 0$, нижняя панель $z_c = 0.4$

- [4] A.A. Gusev, et al: *Adiabatic approach to the problem of a quantum well with a hydrogen – like impurity ЯФ*, **73** (2010) (в печати).
- [5] E.M. Kazaryan, et al: *Impurity optical absorption in parabolic quantum well*. Physica E. **28** (2005) 423-430.