

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Математико-механический факультет

Кафедра системного программирования

Шеин Роман Евгеньевич

Решение одномерного стационарного уравнения  
Шредингера методом модельного псевдопотенциала с  
использованием матриц рассеяния

Дипломная работа

Допущена к защите.

Зав. кафедрой:

д. ф.-м. н., профессор Терехов А.Н.

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., Горай Л.И.

Рецензент:

д. ф.-м. н., профессор Рябов В.М.

Санкт-Петербург

2013

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Mathematics & Mechanics Faculty

Software Engineering Chair

Shein Roman

Solving one-dimensional stationary Schrodinger equation  
by a method of model pseudo-potential using scattering matrices

Graduation Thesis

Admitted for defence.

Head of the chair:

Professor Terekhov A.N.

Scientific supervisor:

Goray L.I.

Reviewer:

Professor Ryabov V.M.

Saint-Petersburg

2013

# Оглавление

Введение . . . . .	2
Постановка задачи . . . . .	4
Обзор подходов . . . . .	5
Методы “ab initio” . . . . .	5
Метод эффективной массы . . . . .	5
Метод сильной связи (линейной комбинации атомных орбиталей) . . . . .	6
Реализация . . . . .	7
Нахождение зонной структуры методом эмпирического псевдопотенциала . . . . .	7
Описание метода . . . . .	7
Построение псевдопотенциала . . . . .	8
Решение уравнения Шрёдингера . . . . .	10
Метод стрельбы . . . . .	10
Метод Нумерова . . . . .	11
Метод Брендта . . . . .	12
Численные трудности . . . . .	12
Нахождение волновой функции методом матриц рассеяния . . . . .	13
Заключение . . . . .	16
Приложение 1. Псевдопотенциалы. . . . .	17
Приложение 2. Метод Брендта. . . . .	19
Приложение 3. Тесты. . . . .	21

# Введение

В настоящее время большое внимание как в науке, так и в индустрии уделяется полупроводникам. Именно благодаря исследованиям свойств монокристаллического кремния - на данный момент самого широко используемого в промышленности полупроводника - стало возможным создание современной полупроводниковой микроэлектроники.

Свойства наноразмерных полупроводниковых наноматериалов сильно отличаются от аналогичных свойств объемных материалов, носят существенно квантовый характер и могут быть адекватно описаны лишь с применением современных методов исследования, основанных на первопричинных (*ab-initio*) физических и строгих математических моделях. Основные электронные свойства полупроводников определяются поведением электронов и дырок в материале и для их описания необходимо найти уровни энергии и волновые функции для электронов и дырок.

Особенно эффективно применение первопричинных методов к структурам, в элементарной ячейке которых находится сравнительно небольшое число атомов. В тоже время активные области наноматериалов зачастую содержат многие сотни и тысячи атомов, что делает использование *ab-initio* методов крайне трудоемким, несмотря на прогресс компьютерной техники и развитие параллельных вычислений. К исследованию полупроводниковых наноструктур привлекаются полуэмпирические методы (метод сильной связи, кр-метод, метод эффективной массы и т.п.), которые дают более наглядное описание с учетом основных процессов. Недостатком полуэмпирических методов является то, что их параметры определяются из экспериментальных данных, которые зачастую неполны и неоднозначны, а используемые упрощения сужают область применения.

Получили развитие методы, в которых стремятся соединить достоинства полуэмпирических и *ab-initio* подходов. Одним из наиболее эффективных является метод модельного псевдопотенциала, обеспечивающий высокую точность описания электронного спектра и силы осцилляторов. В практических расчетах преимущество имеют псевдопо-

тенциалы с мягкой сердцевинкой, позволяющие использовать не большой базис из плоских волн, что дает возможность исследовать сложные структуры с большим числом атомов в элементарной ячейке. Примером являются псевдопотенциалы [1], параметры которых определялись из экспериментальных данных и анализа результатов ab-initio расчетов бинарных кристаллов GaAs и AlAs. Псевдопотенциалы применялись для расчета электронных состояний квантовых ям, проволок, точек, сверхрешеток. Потребность в описании других, многообразных наноструктур требует развития новых методов решения и эффективных численных реализаций.

В данной работе рассматриваются гетероструктуры - полупроводники, составленные из нескольких гетеро-слоёв различных материалов или их твердых растворов. Полупроводниковые гетероструктуры, такие как AlAs, GaAs, InAs, GaN и т.д. представляют большой научный и промышленный интерес, так как на их основе возможно создание эффективных светодиодов, лазерных диодов, СВЧ транзисторов и др. приборов нанoeлектроники .т.д. [2].

Волновая функция электронов и дырок в объемном полупроводниковом материале удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r)\right)\psi(r) = E\psi(r), \quad (1)$$

где  $E$  - энергия электрона/дырки,  $V$  - потенциальная энергия в точке,  $m$  - масса носителя заряда,  $\hbar$  - редуцированная постоянная Планка.

Задача настоящей дипломной работы - краткий обзор методов нахождения собственных значений энергии и волновой функции и выбор и реализация эффективного метода решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера методом модельного псевдопотенциала с использованием матриц рассеяния.

# Постановка задачи

Задачей данной работы является сравнительный анализ методов решения уравнения Шрёдингера для объемных монокристаллов и нахождение состояний электронов в полупроводниковых гетероструктурах, а также одномерная реализация наиболее эффективных методов для тонкослойных полупроводниковых гетероструктур со слоями AlAs, GaAs и других полупроводников в качестве основных материалов.

Общая постановка подразумевает под собой следующие составные части:

- Изучение предметной области на уровне, необходимом для чёткого понимания задачи и методов её решения.
- Анализ существующих подходов решения уравнения Шрёдингера для монослоёв полупроводниковых гетероструктур и нахождения энергетического спектра и волновых функций электронов.
- Выбор быстрых и устойчивых методов решения вышеперечисленных задач.
- Реализация выбранных методов решения.
- Тестирование результатов.

## Ограничения

В данной работе рассматриваются тонкослойные гетероструктуры (толщина слоя порядка атомарных расстояний). Для всей системы принимается одноэлектронное приближение в бесконечном периодическом потенциале [2]. Также ограничимся рассмотрением одномерного потенциала (либо рассматривается проекция потенциала на ось кристалла, либо предполагается сферическая симметрия кристалла).

# Обзор подходов

## Методы “ab initio”

Методы “ab initio”, “методы из первых принципов”, неэмпирические методы - подходы решения задач в физике, опирающиеся на математическую модель и некоторые эмпирические данные об идеальных структурах, такие, как методы Хартри-Фока-Рутана и метод функционала плотности [16]. Основными недостатком методов “из первых принципов” является крайне высокая вычислительная сложность и несовпадение с экспериментальными данными из-за дефектов структур, т.е. несоответствий математической модели и экспериментальным данным.

## Метод эффективной массы

В методе эффективной массы уравнение Шрёдингера (1) решается относительно однокомпонентной или многокомпонентной огибающей волновой функции - непрерывной функции координат, мало меняющейся на масштабе постоянной решётки. Применимость метода эффективной массы ограничивается следующими обстоятельствами. Во-первых, величины, входящие в гамильтониан — внешние поля, деформации, — должны быть достаточно «плавными», т. е. их изменение на расстояниях порядка постоянной решётки должно быть малым, в связи с чем метод эффективной массы плохо применим к полупроводникам с толщиной слоёв, близкой к атомарным. Во-вторых, рассматриваемый энергетический уровень должен быть достаточно удалённым от зон, не включённых в модель (по сравнению с расстоянием до учтённых зон), — это ограничение связано с использованием  $k \cdot p$ -метода. [3]

## Метод сильной связи (линейной комбинации атомных орбиталей)

Суть метода сильной связи состоит в том, что волновая функция ищется в виде суперпозиции некоторого набора исходных функций - атомных орбиталей. Параметры метода сильной связи - энергии орбиталей и энергетические интегралы перекрытия между орбиталями - определяются путём подгонки зонной структуры вещества, и поэтому возможны неточная подгонка или неоднозначное определение параметров.[3] Метод сильной связи не применим к тем состояниям, которые хорошо описываются приближением почти свободных электронов. [4]



# Реализация

## Нахождение зонной структуры методом эмпирического псевдопотенциала

### Описание метода

Валентные электроны в самых внешних слоях оболочки полупроводников, таких, как Si, не испытывают полного действия заряда ядра вследствие экранирования внешних слоёв заполненными слоями, благодаря чему именно электроны внешних слоёв являются почти свободными. В области остова волновая функция валентного электрона должна быть ортогональна к волновым функциям остова. Поэтому истинные волновые функции могут испытывать сильные пространственные осцилляции вблизи остова, что затрудняет решение волнового уравнения (разложение по плоским волнам потребует огромного количества членов разложения; оценки для атома Al дают количество функций членов разложения  $10^6$ ). Одним из способов преодоления этого затруднения является разделение волновой функции на плавную часть (псевдоволновую функцию) и осциллирующую часть. Кинетическая энергия последней обеспечивает «эффективное отталкивание» валентных электронов вблизи остова. Таким образом, для валентных электронов мы можем приближенно заменить истинный сильный потенциал на более слабый «эффективный» потенциал, или псевдопотенциал. Поскольку «плавные» части волновых функций валентных электронов вносят малый вклад в области остова, они там не очень чувствительны к форме псевдопотенциала[2]. Таким образом, уравнение Шрёдингера для волновой функции(1) заменяется на псевдоволновое уравнение:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_p(r)\right)\psi_p(r) = E\psi_p(r), \quad (2)$$

где  $V_p$  - псевдопотенциал, а  $\psi_p$  - псевдопотенциальная функция.

Поскольку интересующие нас свойства полупроводника зависят почти исключительно от валентных электронов, для их определения можно использовать решение уравнения (2) - псевдоволновую функцию - вместо решения уравнения (1).

## Построение псевдопотенциала

Пусть в кристалле имеется  $N$  типов атомов. Тогда структурный фактор для  $k$ -го типа атомов определяется по следующей формуле:

$$S_{gk} = \frac{1}{N_k} \sum_j e^{-igr_{kj}}, \quad (3)$$

где  $N_k$  - число атомов  $k$ -го типа в примитивной ячейке,  $g$  - вектор обратной решётки,  $r_{kj}$  - векторы, определяющие положение атомов типа  $k$  в ячейке. Форм-фактор для  $k$ -го типа атомов в векторе  $g$  обратного пространства определяется по следующей формуле:

$$V_{gk} = \frac{1}{\Omega_k} \int_{\Omega_k} V_k(r) e^{-igr} dr, \quad (4)$$

где  $V_k$  - псевдопотенциал одного атома типа  $k$ , а  $\Omega_k$  - объём в примитивной ячейке, соответствующий одному атому типа  $k$ .

Нетрудно видеть, что форм-фактор является коэффициентом Фурье-разложения псевдопотенциала для атома. В данной работе применяется метод эмпирического псевдопотенциала, то есть псевдопотенциала, построенного с применением экспериментально полученных данных о кристалле.

Существует и другой подход, именуемый методом самосогласованного псевдопотенциала (также “ab initio” псевдопотенциала). При использовании метода самосогласованного псевдопотенциала форм-факторы определяются “из первых принципов”, в остальном же процесс построения псевдопотенциала аналогичен. Для материалов, для которых

форм-факторы уже определены экспериментально, использование эмпирического псевдопотенциала предпочтительнее, поскольку требуется намного меньше вычислительных ресурсов и достигается лучшее согласие с экспериментальными данными.

Сам псевдопотенциал может быть подсчитан по формуле:

$$V_p(r) = \sum_g \sum_k V_{gk} S_{gk} \quad (5)$$

Структурные факторы могут быть подсчитаны из знаний о геометрии кристалла. В методе модельного псевдопотенциала значения форм-факторов для материалов получаются из измерительных и/или численных экспериментов. В данной работе реализован метод нахождения потенциала по форм-факторам для полупроводников типа цинковой обманки и алмаза. Подсчитаны псевдопотенциалы монокристаллов GaAs, AlAs, Si, Ge с применением форма-факторов из [2], [5], [6] (см. приложение 1). Получено совпадение при сравнении результатов работы программы с расчётной кривой псевдопотенциала Ge из [5].

# Решение уравнения Шрёдингера

## Метод стрельбы

Для решения уравнения Шрёдингера выбран и реализован метод стрельбы - активно применяемый в теоретической физике метод решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений [13]. В общем случае при использовании метода стрельбы ищут параметризованное решение задачи Коши с граничными условиями с левого конца отрезка, а затем решают уравнение относительно параметра, соответствующее граничным условиям с правого конца отрезка. В случае уравнения Шрёдингера в [7] предлагается улучшение метода. Так как уравнение Шрёдингера - линейное дифференциальное уравнение второго порядка, у него имеются два фундаментальных решения, одно из которых убывает на  $+\infty$ , а другое - на  $-\infty$ , и вронскиан

$$\omega(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) \quad (6)$$

константен. Поскольку скорость убывания решений на бесконечности велика, из-за ошибок округления при стрельбе из одного конца отрезка, представляющего фактическую бесконечность, в другой, вероятно, переполнение. Чтобы избежать переполнения, решаются две задачи Коши, с условиями с левого и правого концов отрезка, соответственно, с уровнем энергии  $E$  в качестве параметра, а уравнением на параметр является “сшивание” решений задач Коши посередине между бесконечностями, то есть равенство нулю вронскиана  $W$ .

Поскольку в данной работе интерес представляет решение краевой задачи на вещественной прямой для убывающих к нулю на бесконечностях решениями (это условие возникает, например, из физического смысла волновой функции - волновая функция является плотностью вероятности и, следовательно, обязана убывать на бесконечностях, чтобы обеспечить

равенство единице интеграла по вещественной прямой), в качестве граничных условий берётся квазиклассическое соотношение:

$$\psi(x_-) = y_0 \quad \psi'(x_-) = y_0 \sqrt{V_p(x_-) - E} \quad (7)$$

$$\psi(x_+) = y_0 \quad \psi'(x_+) = -y_0 \sqrt{V_p(x_+) - E}, \quad (8)$$

где  $x_-$ ,  $x_+$  - фактические бесконечности,  $y_0$  - произвольная малая константа.

## Метод Нумерова

Для решения задачи Коши в методе стрельбы был выбран метод Нумерова - итерационный метод решения дифференциальных уравнений второго порядка[8]. В общем виде итерационный шаг для уравнения вида:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + f(x, y)y(x) = 0 \quad (9)$$

таков:

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + \frac{1}{12}h^2(f_{n+1} + 10f_n + f_{n-1}) \quad (10)$$

и метод Нумерова является неявным.

Однако, в случае уравнения вида:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + fy(x) = 0 \quad (11)$$

применим итерационный шаг

$$y_{n+1} = \frac{(2 - \frac{5h^2}{6}f_n)y_n - (1 + \frac{h^2}{12}f_{n-1})y_{n-1}}{1 + \frac{h^2}{12}f_{n+1}} \quad (12)$$

Метод Нумерова был выбран, так как точность на каждой итерации  $O(h^6)$ , и, поскольку число итераций пропорционально  $h$ , точность полученного решения (2)  $O(h^5)$ , что на порядок выше точности метода Рунге-Кутты.

## Метод Брэндта

Для нахождения корней вронскиана был выбран метод Брэндта - метод поиска корней функции одной переменной на отрезке с локализованным корнем, сочетающий преимущества метода Ньютона и метода бисекции[9]. Метод Брэндта может быть легко описан кодом на C++, приведённым в приложении. Для поиска отрезка, на котором локализован корень, функция проверяется на знакопостоянность с небольшим шагом.

## Численные трудности

Все реализованные методы были протестированы на достаточно простых, но при этом имеющих значение примерах (см. приложение 3). Были получены согласующиеся с теоретическими оценками погрешности в тестах для численных методов (метод Нумерова, метод Брэндта) и совпадающие с заданной точностью с аналитическими решения в тестах для метода стрельбы. Стоит заметить, что на текущей стадии работы параметры метода стрельбы подбираются вручную в связи с трудностями, описанными в последующем примере.

Рассмотрим уравнение вида:

$$\psi''(x) + c\psi(x) = 0 \quad (13)$$

с квазиклассическим соотношением (7, 8) в качестве граничных условий.

Его фундаментальная система решений имеет вид:

$$\psi_1(x) = e^{\sqrt{-cx}} \quad \psi_2(x) = e^{-\sqrt{-cx}}, \quad (14)$$

а решения задач Коши на правом и левом концах, соответственно, выражаются как

$$\psi_-(x) = e^{\sqrt{-cx_-}} y_0 e^{\sqrt{-cx}} \quad (15)$$

$$\psi_+(x) = e^{\sqrt{-cx_+}} y_0 e^{-\sqrt{-cx}} \quad (16)$$

И вронскиан равен

$$\omega = -2y_0^2 \sqrt{-c} e^{\sqrt{-c}(x_+ - x_-)} \quad (17)$$

Поскольку в методе стрельбы имеется произвол выбора  $y_0$  и  $x_+$  и  $x_-$ , возникает задача подбора этих параметров так, чтобы, с одной стороны, не получить переполнения от экспоненциальной части (при слишком большой фактической бесконечности) и, с другой стороны, не получить зануления вронскиана всюду (при слишком маленькой фактической бесконечности).

## Нахождение волновой функции методом матриц рассеяния

После нахождения уровней энергии для нахождения волновой функции многослойной системы необходимо вычислить амплитуды плоских волн, соответствующих уровнями энергии в каждом из гетерослоёв. Для решения этой задачи используется широко применяемый метод матриц рассеяния [10], [11], [12]. В данной части работы приводится описание метода матриц рассеяния. Для избежания терминологических затруднений используются обозначения из [11].

Интерфейсом между гетерослоями называется поверхность сочленения гетерослоёв. Пусть все интерфейсы - плоскости (случаи отличных от плоских интерфейсов приближаются набором плоских интерфей-

сов, подробно способ приближения описан, например, в [10],[11]) и рассматриваемая гетероструктура состоит из  $n + 1$  гетерослоёв. Обозначим  $p$ -й слой  $L_p$ ,  $L_0$  - входная среда,  $L_{n+1}$  - выходная среда. Тогда  $u^{(p)}$  - амплитуды волн, проходящих через  $L_p$  со стороны  $L_0$ , а  $d^{(p)}$  - амплитуды волн, проходящих через  $L_p$  со стороны  $L_{n+1}$ . Задача состоит в нахождении амплитуд  $u^{(n+1)}$  плоских волн, проходящих через гетероструктуру в выходную среду и амплитуд  $d^{(0)}$  плоских волн, отражённых во входную среду при известных значениях  $u^{(0)}$  и занулении  $d^{(n+1)}$ .

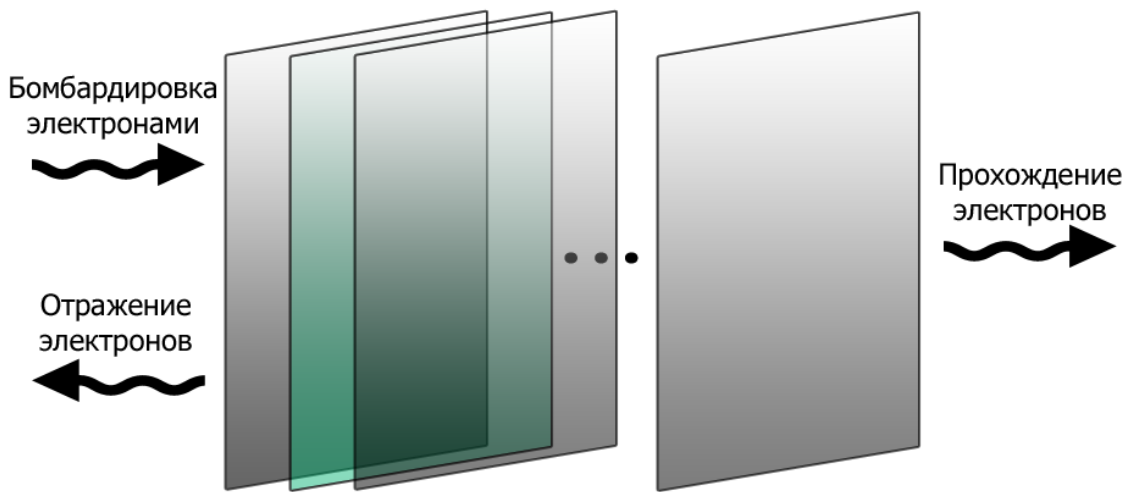


Рис. 1. Задача нахождения волновых функций для многослойной структуры

Помимо значений  $u^{(0)}$  и  $d^{(n+1)}$  входом для алгоритма матриц рассеяния являются граничные условия для каждого интерфейса, в общем случае имеющие вид

$$W^{(p+1)} \begin{bmatrix} u^{(p+1)} \\ d^{(p+1)} \end{bmatrix} = W^{(p)} \begin{bmatrix} u^{(p)} \\ d^{(p)} \end{bmatrix} \quad (18)$$

В задаче нахождения волновой функции в полупроводниковой гетероструктуре граничные условия для интерфейсов соответствуют сшиванию в



точке соединения гетерослоёв псевдволновых функций-решений и их производных(2), построение которых описано выше.

Из граничных условий для каждого интерфейса могут быть построены матрицы интерфейса

$$t^{(p)} = W^{(p+1)-1}W^{(p)} \quad (19)$$

По определению матрицей рассеяния для слоя  $L_p$ ,  $0 \leq p \leq n$ , называется матрица  $S^{(p)}$  такая, что:

$$\begin{bmatrix} u^{(p+1)} \\ d^{(0)} \end{bmatrix} = S^{(p)} \begin{bmatrix} u^{(0)} \\ d^{(p+1)} \end{bmatrix} \quad (20)$$

Как нетрудно видеть из определения, для нахождения  $u^{(n+1)}$  и  $d^{(0)}$  достаточно вычислить матрицу рассеяния  $S^{(p)}$ . Нахождение  $S^{(p)}$  может быть проведено итеративным подсчётом  $S^{(k)}$  для всех слоёв, начиная с первого, по следующим формулам:

$$T_{uu}^{(p)} = [t_{11}^{(p)} - R_{ud}^{(p)}t_{21}^{(p)}]\phi_+^{(p)}T_{uu}^{(p-1)} \quad (21)$$

$$R_{ud}^{(p)} = [t_{12}^{(p)} + t_{11}^{(p)}\Omega^{(p)}][t_{22}^{(p)} + t_{21}^{(p)}\Omega^{(p)}]^{-1} \quad (22)$$

$$R_{du}^{(p)} = R_{du}^{(p-1)} - T_{dd}^{(p)}t_{21}^{(p)}\phi_+^{(p)}T_{uu}^{(p-1)} \quad (23)$$

$$T_{dd}^{(p)} = T_{dd}^{(p-1)}\phi_-^{(p)-1}[t_{22}^{(p)} + t_{21}^{(p)}\Omega^{(p)}]^{-1} \quad (24)$$

Где

$$S^{(p)} = \begin{vmatrix} T_{uu}^{(p)} & R_{ud}^{(p)} \\ R_{du}^{(p)} & T_{dd}^{(p)} \end{vmatrix} \quad (25)$$

В данной работе реализован метод матриц рассеяния и проведено его тестирование на задачах из оптики (см. Приложение 3).

# Заключение

## Результаты

Изучены основные методы решения уравнения Шрёдингера относительно волновой функции и зонной структуры, выбран подходящий для решения задачи на многослойных полупроводниковых гетероструктурах метод - метод модельного псевдопотенциала с использованием матриц рассеяния. Выбранный метод разложен на набор подзадач, решения выделенных задач реализованы в виде библиотеки функций и протестированы на наборе имеющих физический смысл примерах (см. приложение 3), приближенных к реальным задачам физики наноразмерных полупроводников.

## Дальнейшая работа

Тестирование реализации на реальных задачах физики наноразмерных проводников.

Расширение реализации альтернативными способами построения псевдопотенциала.

Расширение реализации для обработки 2- и 3-мерного случая.

# Приложение 1. Псевдопотенциалы.

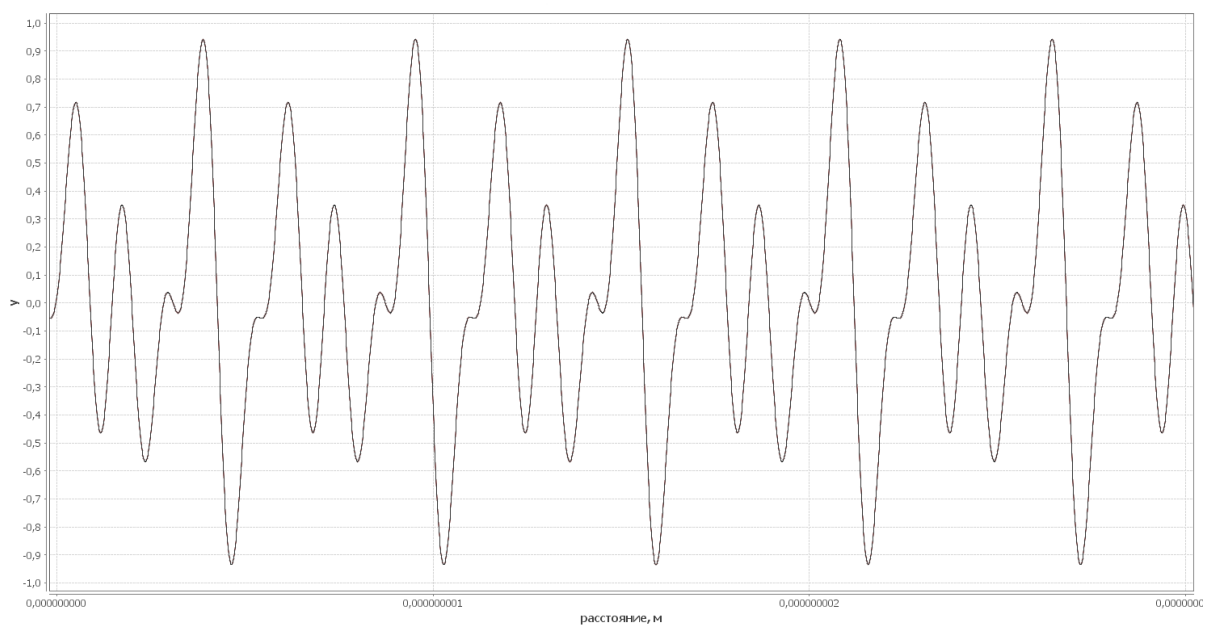


Рис. 2. Псевдопотенциал GaAs

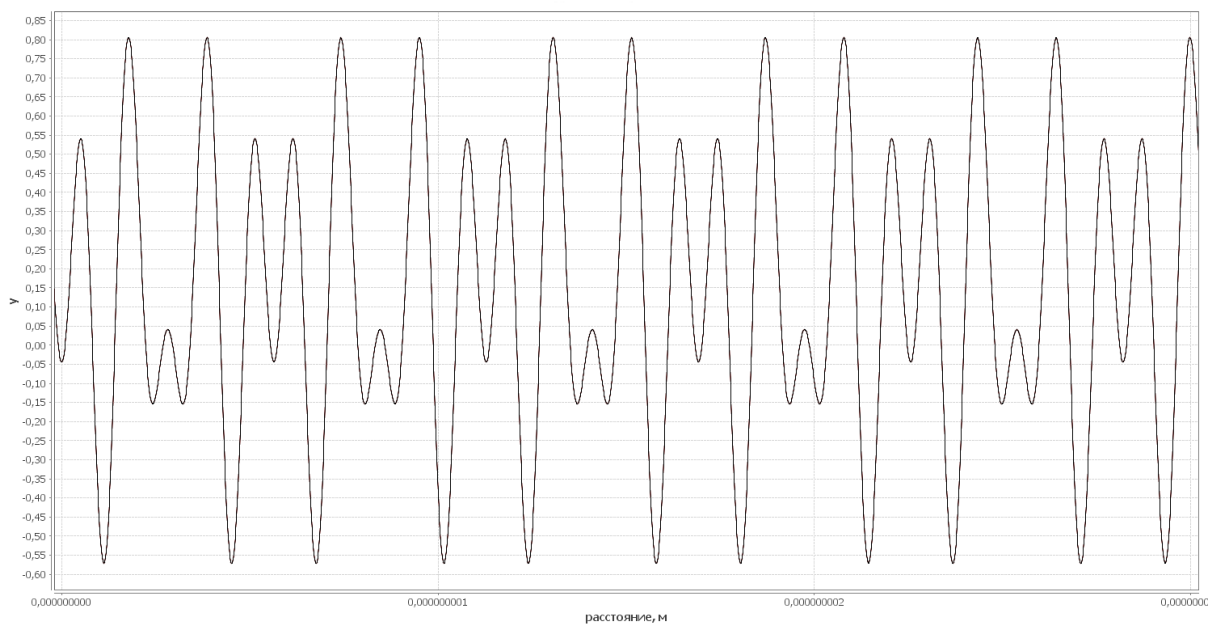


Рис. 3. Псевдопотенциал Ge

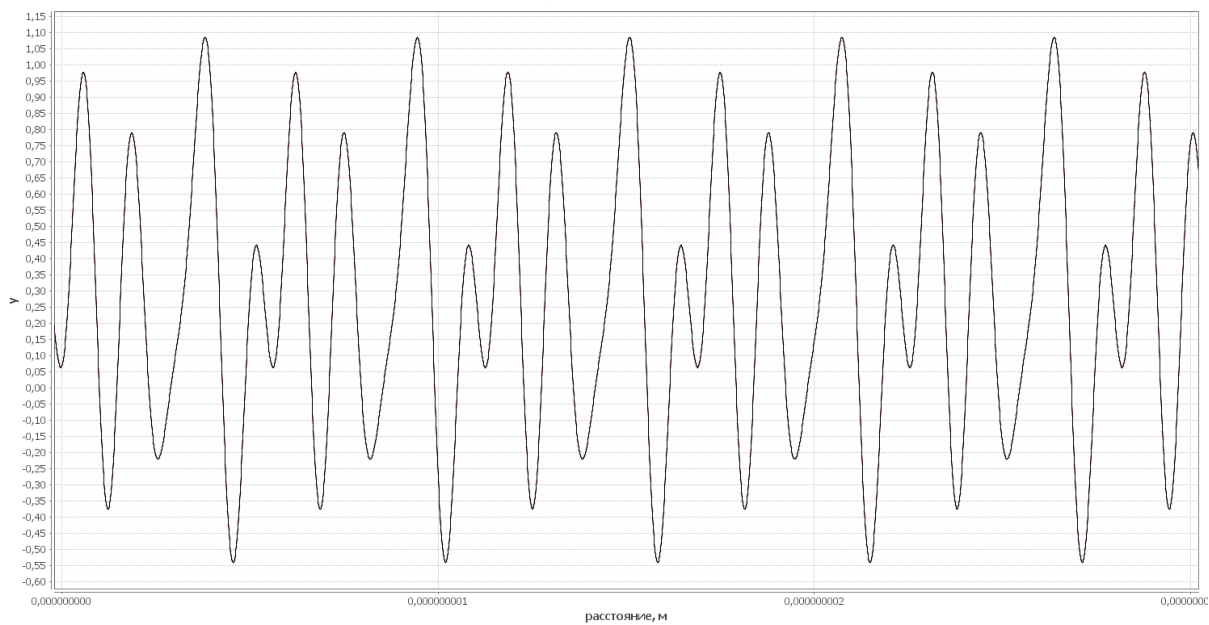


Рис. 4. Псевдопотенциал AlAs

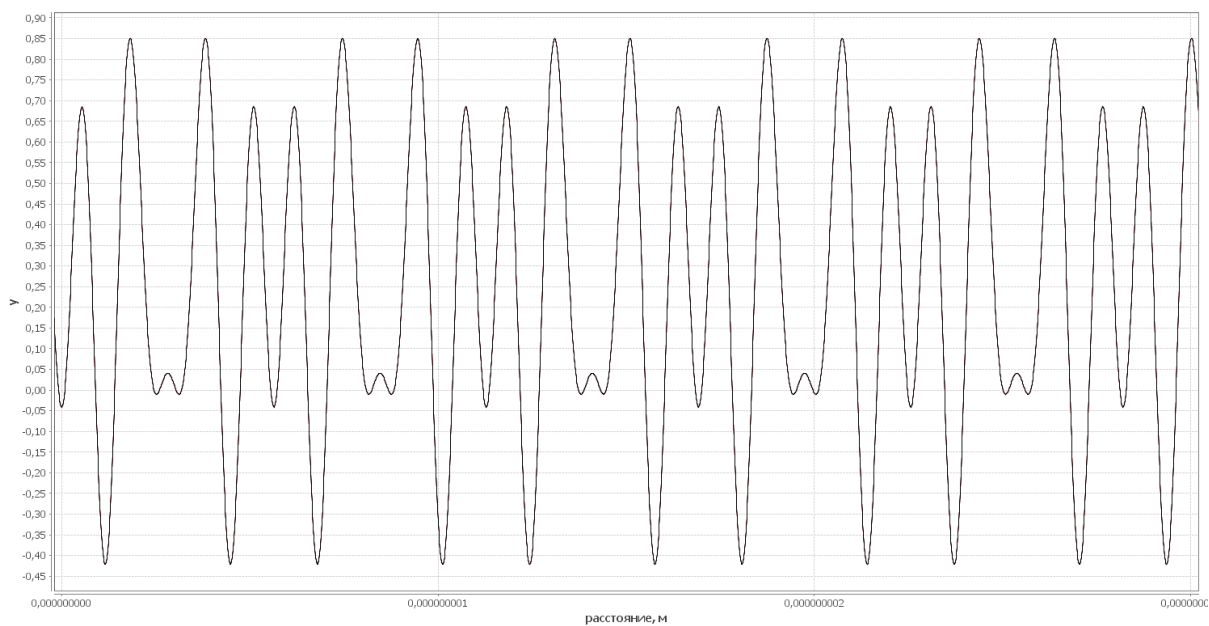


Рис. 5. Псевдопотенциал Si

## Приложение 2. Метод Брэндта.

```
data_t brent(Function & f, data_t rootPrecision ,
             data_t a, data_t b, data_t yA, data_t yB) {
    if (abs(yA) <= rootPrecision) {
        return a;
    }
    if (abs(yB) <= rootPrecision) {
        return b;
    }
    if (abs(yB) > abs(yA)) {
        data_t buf = a;
        a = b;
        b = buf;
        buf = yA;
        yA = yB;
        yB = buf;
    }
    data_t c = a;
    data_t yC = yA;
    data_t s = a;
    data_t yS = yA;
    data_t errorDelta = rootPrecision;
    data_t d = a;
    bool bisectionFlag = true;
    while (abs(a - b) > rootPrecision) {
        if (yA != yC && yB != yC) {
            s = a * yB * yC / (yA - yB) / (yA - yC)
                + b * yA * yC / (yB - yA) / (yB - yC)
                + c * yA * yB / (yC - yA) / (yC - yB);
        } else {
            s = b - yB * (b - a) / (yB - yA);
        }
        data_t buf = (3 * a + b) / 4;
        if (((!(s < b && buf < s) || (s < buf && b < s)))
            || (bisectionFlag && (abs(s - b) >= (abs(b - c) / 2)))
            || (!bisectionFlag && (abs(s - b) >= abs(c - d) / 2))
            || (bisectionFlag && (abs(b - c) < errorDelta))
            || (!bisectionFlag && (abs(c - d) < errorDelta))) {
            s = (a + b) / 2;
            bisectionFlag = true;
        } else {
            bisectionFlag = false;
        }
    }
}
```

```

yS = f.at(s);
d = c;
c = b;
yC = yB;
if (yA * yS < 0) {
    b = s;
    yB = yS;
} else {
    a = s;
    yA = yS;
}
if (abs(yB) > abs(yA)) {
    data_t buf = a;
    a = b;
    b = buf;
    buf = yA;
    yA = yB;
    yB = buf;
}
}
return s;
}

```

Где  $a, b$  - отрезок, на котором локализован корень,  $f$  - функция, корни которой ищутся,  $yA, yB$  - значения функции на концах отрезка.

## Приложение 3. Тесты.

Реализация решения уравнения Шрёдингера (1) в тонком слое была протестирована на стандартном наборе аналитически решаемых примеров: потенциальной ямой с конечной и бесконечной высотой стенок [14, 15], осциллирующем потенциале; а также на сглаженном ламеллярном потенциале (близок к потенциальной яме с конечной высотой стенок).

Для потенциальной ямы с конечной и бесконечной высотой стенок полученные значения уровней энергии совпадают с аналитическими. Для сглаженного ламеллярного потенциала как решения задачи Коши в методе Нунерова, так и уровни энергии близки к решениям для ламеллярного потенциала, при этом различие непрерывно уменьшается по мере стремления потенциала к ламеллярному, что соответствует ожидаемому поведению решения.

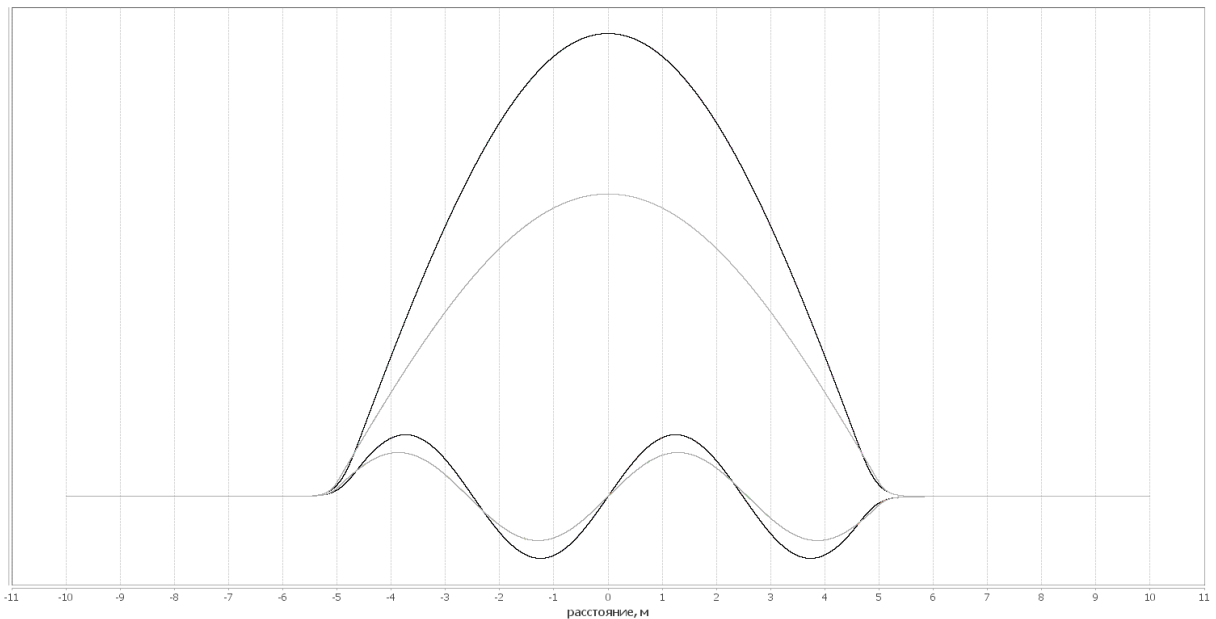


Рис. 6. Некоторые волновые функции потенциальной ямы с конечными стенками и сглаженного ламеллярного потенциалов

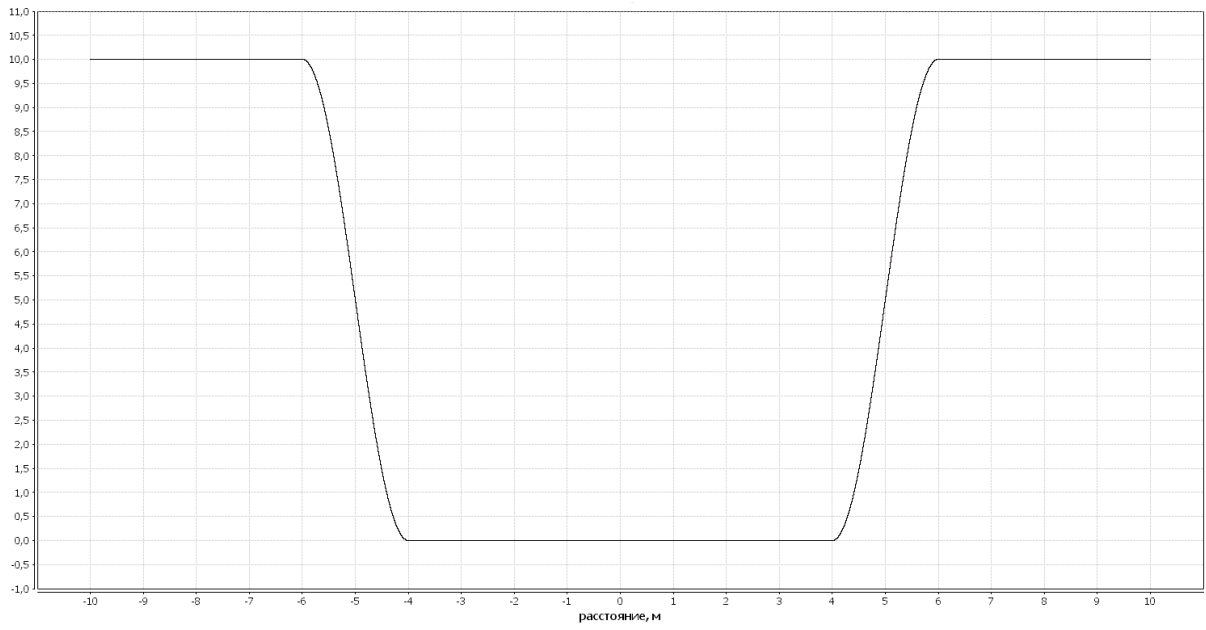


Рис. 7. Сглаженный ламеллярный потенциал

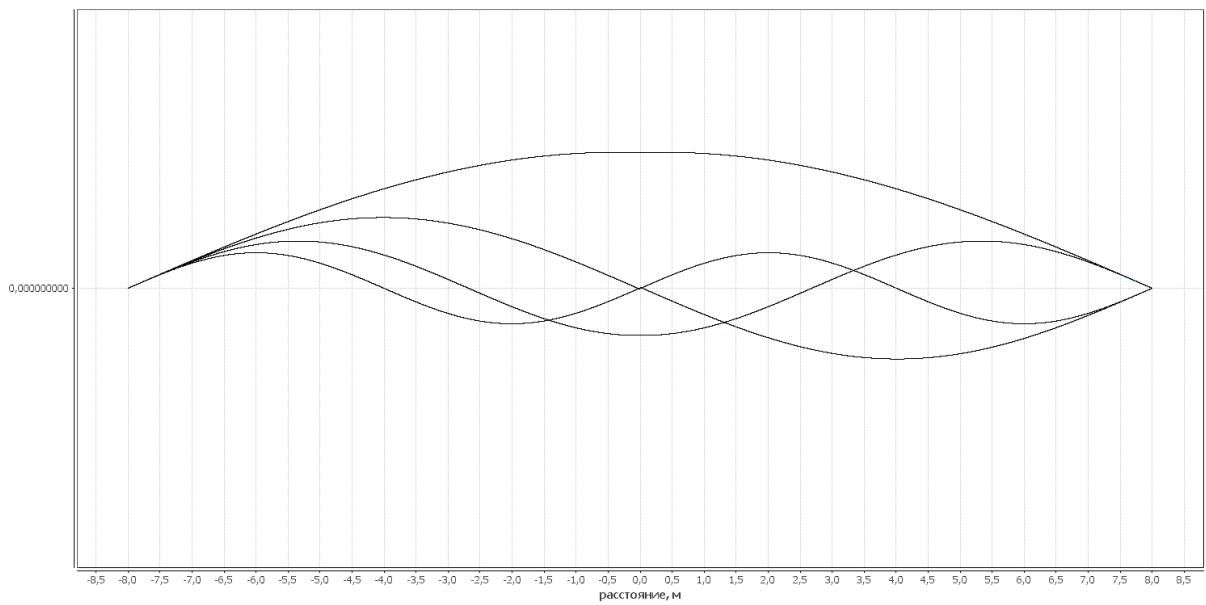


Рис. 8. Некоторые волновые функции  $S_i$



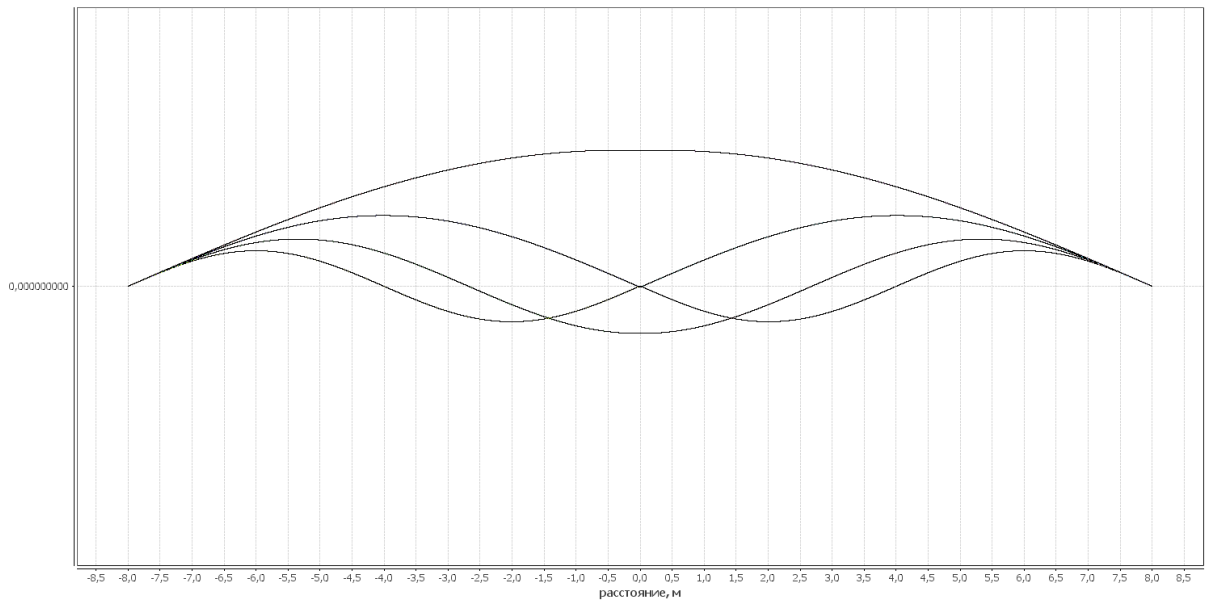


Рис. 9. Некоторые волновые функции GaAs

# Литература

1. Mader, K.A. Empirical atomic pseudopotentials for AlAs/GaAs superlattices, alloys, and nanostructures / K.A.Mader, A.Zunger // Phys.Rev.B.- 1994.-V.50.- P.17393-17405.
2. Питер Ю. Мануэль Кардона // Основы физики полупроводников: Пер. с англ.- М: Физматлит. – 2002.
3. Ненашев А. В. // Моделирование электронной структуры квантовых точек Ge в Si. Автореф. дис.: канд. физ-мат наук. Новосибирск, 2004. 21с
4. Чеченин Н.Г. Введение в физику твердого тела // <http://nuclphys.sinp.msu.ru/solidst/>
5. Акимов О. Е. Конструктивная математика. – М. : Акимова, 2005.
6. Caruthers E., Lin-Chung P. J. Pseudopotential calculations for  $(GaAs)_1 - (AlAs)_1$  and related monolayer heterostructures // Physical Review B. – 1978. – Т. 17. – №. 6. – С. 2705.
7. Ильина В.А. Силаев П.К. Численные методы для физиков-теоретиков (часть 1,2) - РХД, 2003, 2004
8. Numerov B. Note on the numerical integration of  $d^2x/dt^2 = f(x, t)$  // Astronomische Nachrichten. – 1927. – Т. 230. – №. 19. – С. 359-364.
9. Brent R. P. Algorithms for minimization without derivatives. – Courier Dover Publications, 1973.
10. Goray L. I., Schmidt G. Analysis of two-dimensional photonic band gaps of any rod shape and conductivity using a conical-integral-equation method // Physical Review E. – 2012. – Т. 85. – №. 3. – С. 036701.
11. Li L. Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings // JOSA A. – 1996. – Т. 13. – №. 5. – С. 1024-1035.
12. Li L. Bremmer series, R-matrix propagation algorithm, and numerical modeling of diffraction gratings // JOSA A. – 1994. – Т. 11. – №. 11. – С. 2829-2836.
13. Калиткин Н. Н. Численные методы: Учебное пособие. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1978.

14. Воробьев Л. Е. и др. Оптические свойства наноструктур //СПб.: Наука. – 2001. – Т. 188. – С. 3.
15. Гапоненко С. В. и др. Оптика наноструктур //Минск: Недра. – 2005.
16. Клековкина В. В., Аминова Р. М. Ab initio расчеты структурных и электронных свойств кристаллических твердых тел в приближении функционала плотности и псевдопотенциала в импульсном пространстве: детали и примеры //Учёные записки Казанского государственного университета. – 2009. – Т. 151. – №. 3. – С. 5-30.