

РАСЧЁТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СЛОЖНЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР В ПРИСУТСТВИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Хонина С.Н.^{1,2}, Волотовский С.Г.¹, Харитонов С.И.^{1,2}, Казанский Н.Л.^{1,2}

¹Институт систем обработки изображений РАН,

²Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва
(национальный исследовательский университет)

Аннотация

Разработан и программно реализован алгоритм решения стационарного уравнения Шрёдингера для сложного кусочно-постоянного потенциала при наличии электрического поля. Алгоритм основан на последовательной сшивке решений в виде функций Эйри на границах зон без повышения ранга матрицы более двух, что позволяет получить характеристическое уравнение в удобной для поиска корней форме.

Разработанный алгоритм позволяет получать корректные решения при значениях приложенного электрического поля, превышающих величину основного энергетического уровня, т.е. в условиях, когда не применим метод возмущений.

Ключевые слова: низкоразмерные гетероструктуры, уравнение Шрёдингера, энергетический спектр, функции Эйри.

Введение

Исследования в области разработки высокопроизводительных вычислительных систем, средств связи и обработки информации привели к появлению нового подхода в создании элементной базы электроники [1 - 6]. В рамках этого подхода носителем информации выступает амплитуда электронной волновой функции в данной области квантовой системы. Прикладывая внешнее электрическое поле, меняющее энергетический спектр, можно вызывать контролируемую передислокацию электронной плотности в системе, соответствующую преобразованию информации по заданному закону.

В качестве физической основы для реализации приборов с управляемой передислокацией электронной плотности могут быть использованы структуры, образованные набором туннельно-связанных квантовых ям.

В многоямной квантовой структуре распределение амплитуды волновой функции определяется, по сути, интерференцией квантовых состояний различных квантовых ям, поэтому перераспределение электронной плотности под действием внешнего электрического поля может носить сложный, немонотонный характер. При этом соответствующий немонотонный характер будет носить и изменение физических характеристик системы, что открывает широкие возможности для разработки различных квантовых приборов.

Для создания электронных приборов необходимо научиться целенаправленно управлять энергетическим спектром носителей заряда с помощью различных внешних воздействий. Наиболее часто для управления используют электрические поля. Расчёт энергетического спектра такой системы можно выполнять с использованием стационарного уравнения Шрёдингера с заданной структурой потенциала и приложенным постоянным электрическим полем.

В случае кусочно-постоянной формы потенциала такая задача может быть решена на основе пред-

ставления волновых функций в виде суперпозиции функций Эйри. Для простых типов гетероструктур, описываемых одним или двумя уровнями потенциала, можно получить аналитическое решение [1, 2], однако для сложной формы потенциала задача становится очень трудоёмкой [2]. Как правило, эта проблема решается с помощью метода возмущений [7], но он применим лишь для небольших значений приложенного электрического поля.

Таким образом, актуальной является задача разработки и реализации численного метода расчёта энергетического спектра для сложного профиля потенциала при наличии электрического поля.

В данной работе описывается алгоритм решения соответствующего стационарного уравнения Шрёдингера. Алгоритм основан на последовательной сшивке решений на границах зон без повышения ранга матрицы более двух, что позволяет легко реализовать процедуру поиска корней характеристического уравнения.

Проведено сравнение разработанного алгоритма с методом возмущений.

1. Алгоритм решения уравнения Шрёдингера на основе метода последовательной сшивки

Рассмотрим одномерную гетероструктуру, соответствующую системе однородных слоёв полупроводников (границы слоёв перпендикулярны оси Ox) в присутствии электрического поля. Если поле напряжённости F направлено параллельно оси x , то потенциальная энергия будет иметь вид:

$$U(x) = qFx + U_p, \quad (1)$$

где q – абсолютная величина заряда электрона, U_p – значение кусочно-постоянного потенциала на отрезке $x \in [x_{p-1}, x_p]$, x_p – координаты границ слоёв.

В этом случае уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (qFx + U_p)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2)$$

где m_p – эффективная масса, $\psi(x)$ – волновая функция частицы.

Обозначим

$$u = b_p^{1/3} (x - c_p), \tag{3}$$

где $c_p = \frac{E - U_p}{qF}$, $b_p = \left(\frac{2m_p qF}{\hbar^2} \right)$.

Тогда волновая функция от аргумента u будет удовлетворять уравнению Эйри:

$$\left\{ \frac{d^2}{du^2} - u \right\} \Psi(u) = 0. \tag{4}$$

Решение (4) имеет следующий вид на каждом интервале [8]:

$$\Psi_p(u_p(x)) = A_p Ai(u_p(x)) + B_p Bi(u_p(x)), \tag{5}$$

где $u_p(x) = b_p^{1/3} (x - c_p)$, $x \in [x_{p-1}, x_p]$; $Ai(x)$, $Bi(x)$ – функции Эйри первого и второго рода соответственно.

Накладывая условия сшивки для волновых функций и их производных, делённых на массу, на границах между различными интервалами (границами слоёв), получим следующие уравнения для коэффициентов в решении (5):

$$\begin{aligned} & A_p Ai(u_{p,p}) + B_p Bi(u_{p,p}) = \\ & = A_{p+1} Ai(u_{p+1,p}) + B_{p+1} Bi(u_{p+1,p}), \\ & \frac{1}{m_p} [A_p Ai'(u_{p,p}) + B_p Bi'(u_{p,p})] = \\ & = \frac{1}{m_{p+1}} [A_{p+1} Ai'(u_{p+1,p}) + B_{p+1} Bi'(u_{p+1,p})], \end{aligned} \tag{6}$$

где $u_{p,l} = b_p^{1/3} (x_l - c_p)$.

Отметим, что разрешённые значения энергии E входят в (6) неявно через аргументы функций Эйри в (5). Далее рассмотрим получение характеристического уравнения (уравнение для E) на простом примере бесконечной квантовой ямы и в случае потенциала общего вида в квантовой яме.

2. Треугольная бесконечная потенциальная яма

Модель треугольной бесконечной ямы используется, например, при описании поверхностного квантования [1, 2]. Потенциал треугольной бесконечной ямы описывается выражением (рис. 1):

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \in [-\infty, x_0], \\ U_0 + qFx, & x \in [x_0, \infty]. \end{cases} \tag{7}$$

Граничные условия соответствуют равенству нулю волновой функции (5) на левой границе ямы (при $x = x_0$ и при $x \rightarrow \infty$). Из этого следует, что $B_0=0$, и тогда

$$\Psi_0(u(x_0)) = A_0 Ai(u(x_0)) = 0, \tag{8}$$

где $u(x_0) = \left(x_0 - \frac{E - U_0}{qF} \right) \left(\frac{2m_0 qF}{\hbar^2} \right)^{1/3}$.

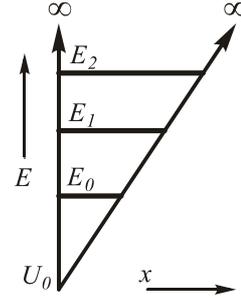


Рис. 1. Энергетический спектр в треугольной бесконечной потенциальной яме

Нормировка константы A_0 в (8) производится из условия равенства единице интеграла от квадрата модуля волновой функции.

Условие (8) выполняется при $u(x_0) = a_n$, где a_n – корни функции Эйри. Таким образом, разрешённые значения энергии имеют вид:

$$E_n = \left[x_0 - a_n \cdot \left(\frac{2m_0 qF}{\hbar^2} \right)^{-1/3} \right] qF + U_0. \tag{9}$$

Полагая $x_0 = 0$ и используя аппроксимацию для корней функции Эйри [8]

$$a_n \approx - \left[(3\pi/8)(4n - 1) \right]^{2/3}, \tag{10}$$

получим приближённую оценку для энергетического спектра треугольной бесконечной ямы в явном виде (учтён также знак заряда электрона):

$$E_n \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right)^{1/3} \left[\frac{3}{2} qF \pi (n - 0,25) \right]^{2/3} + U_0. \tag{11}$$

Далее проведём сравнение энергетического спектра в прямоугольной яме конечной ширины в отсутствие и при наличии электрического поля.

3. Бесконечная прямоугольная потенциальная яма

Для ямы шириной $2L$ потенциал описывается выражением (рис. 2):

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \in [-\infty, -L], \\ U_0 + qFx, & x \in [-L, L], \\ \infty, & x \in [L, \infty]. \end{cases} \tag{12}$$

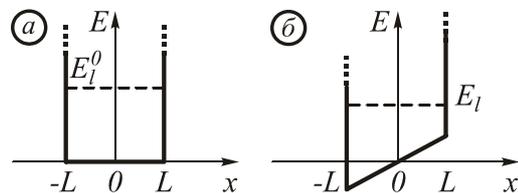


Рис. 2. Прямоугольная бесконечная потенциальная яма в отсутствие (а) и при наличии (б) электрического поля

Для классической прямоугольной бесконечной квантовой ямы шириной $2L$ известно решение:

$$\Psi_n(x) = \sin(\alpha_n(x + L)), \tag{13}$$

где $\alpha_n = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E_n - U_0)}$,

$$E_n = \left(\frac{\pi n}{2L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_0} + U_0. \tag{14}$$

При небольших значениях приложенного электрического поля можно получить приближённое решение методом возмущений [7].

3.1. Решение уравнения Шрёдингера методом возмущений

Рассмотрим теорию возмущений для невырожденных состояний. Запишем стационарное уравнение Шрёдингера (2) в виде:

$$H[\phi_n(x)] = E_n \phi_n(x), \tag{15}$$

где оператор H имеет вид:

$$H = H_0 + W, \tag{16}$$

W – оператор возмущения, а H₀ – невозмущённый оператор, собственные функции и собственные значения которого определяются уравнениями (13), (14):

$$H_0[\psi_n(x)] = E_n^0 \psi_n(x). \tag{17}$$

Разложим искомую собственную функцию возмущённого оператора по собственным функциям невозмущённого оператора:

$$\phi_n(x) = \sum_m c_n^m \psi_m(x). \tag{18}$$

Подставляя (18) в (15), получим:

$$\begin{aligned} \sum_m c_n^m W[\psi_m(x)] &= \\ &= \sum_m c_n^m (E_n - E_m^0) \psi_m(x). \end{aligned} \tag{19}$$

Умножаем скалярно уравнение (19) на $\psi_l^*(x)$ и, с учётом ортогональности, получим:

$$\begin{aligned} \sum_m c_n^m \int \psi_l^*(x) W[\psi_m(x)] dx &= \\ &= c_n^l (E_n - E_l^0), \quad l = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \tag{20}$$

Воспользуемся предположением о малости оператора возмущения, тогда энергетические уровни и волновые функции возмущённого оператора будут близки к невозмущённым. Будем искать решение в виде поправок до второго порядка малости:

$$\begin{cases} E_n \approx E_n^0 + E_n^1 + E_n^2, \\ \phi_n(x) \approx \psi_n(x) + \sum_{m \neq n} c_n^{m,1} \psi_m(x) + \sum_{m \neq n} c_n^{m,2} \psi_m(x). \end{cases} \tag{21}$$

Из уравнений (20), (21) можно получить следующие выражения для поправок [7]:

$$c_n^{m,2} = \frac{\left\{ qF \sum_l c_n^{l,1} \int_{-L}^L \sin(\alpha_m(x+L)) \sin(\alpha_l(x+L)) x dx - c_n^{m,1} E_n^1 \right\}}{(E_n^0 - E_m^0)}. \tag{32}$$

$$E_n^1 = \int \psi_n^*(x) W[\psi_n(x)] dx, \tag{22}$$

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} c_n^{m,1} \int \psi_n^*(x) W[\psi_m(x)] dx, \tag{23}$$

$$c_n^{m,1} = \frac{\int \psi_m^*(x) W[\psi_n(x)] dx}{(E_n^0 - E_m^0)}, \tag{24}$$

$$\begin{aligned} c_n^{m,2} &= \left\{ \sum_l c_n^{l,1} \int \psi_l^*(x) W[\psi_l(x)] dx - c_n^{m,1} E_n^1 \right\} \times \\ &\times (E_n^0 - E_m^0)^{-1}. \end{aligned} \tag{25}$$

3.2. Метод возмущений для прямоугольной бесконечной потенциальной ямы с приложенным электрическим полем

В рассматриваемом случае:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + U_0, \quad W = qFx. \tag{26}$$

В качестве невозмущённых решений используем (13) и (14). Тогда значения энергии для уравнения (2) вычисляются из выражения:

$$E_n \approx \left(\frac{\pi n}{2L}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_0} + U_0 + E_n^1 + E_n^2, \tag{27}$$

где $E_n^1 = qF \int_{-L}^L \sin^2(\alpha_n(x+L)) x dx = qFL$, \tag{28}

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \\ &= \left\{ qF \sum_m c_n^{m,1} \int_{-L}^L \sin(\alpha_n(x+L)) \sin(\alpha_m(x+L)) x dx - \right. \\ &\left. - c_n^{n,1} E_n^1 \right\}. \end{aligned} \tag{29}$$

При этом волновые функции определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \sin \left[(x+L) \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E_n - U_0)} \right] + \\ &+ \sum_{m \neq n} c_n^{m,1} \psi_m(x) + \sum_{m \neq n} c_n^{m,2} \psi_m(x), \end{aligned} \tag{30}$$

где $c_n^{m,1} = \frac{qF \int_{-L}^L \sin(\alpha_m(x+L)) \sin(\alpha_n(x+L)) x dx}{(E_n^0 - E_m^0)}$, \tag{31}

В первом порядке приближения все разрешённые уровни энергии в бесконечной яме смещаются на одинаковую величину qFL , а во втором порядке приближения зазор между дном квантовой ямы и основным состоянием будет уменьшаться пропорционально квадрату напряжённости электрического поля (смотри, например [1, 2]).

Метод возмущений можно применять, пока максимальное значение изменения потенциала на краю ямы под действием электрического поля не станет соизмеримым с величиной энергии состояния [1, 2]. Если значения приложенного электрического поля становятся большими, то нужно использовать алгоритм прямой шивки, описанный в разделе 1.

3.3. Метод шивки для прямоугольной бесконечной потенциальной ямы с приложенным электрическим полем

Граничные условия определяются из равенства нулю волновой функции (5) на границах ямы:

$$\begin{aligned} \psi_0(u_{-L}) &= A_0 Ai(u_{-L}) + B_0 Bi(u_{-L}) = 0, \\ \psi_0(u_L) &= A_0 Ai(u_L) + B_0 Bi(u_L) = 0, \end{aligned} \tag{33}$$

где

$$\begin{aligned} u_{-L} &= \left(-L - \frac{E - U_0}{qF} \right) \left(\frac{2m_0 qF}{\hbar^2} \right)^{1/3}, \\ u_L &= \left(L - \frac{E - U_0}{qF} \right) \left(\frac{2m_0 qF}{\hbar^2} \right)^{1/3}. \end{aligned}$$

Таким образом, получаем однородное уравнение

$$\begin{pmatrix} Ai(u_{-L}) & Bi(u_{-L}) \\ Ai(u_L) & Bi(u_L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = 0,$$

которое имеет нетривиальное решение, если детерминант равен нулю:

$$Ai(u_{-L})Bi(u_L) - Ai(u_L)Bi(u_{-L}) = 0. \tag{34}$$

Это уравнение определяет собственные значения E_n .

Коэффициент B_0 выражается через A_0 с использованием одного из двух уравнений в (33):

$$B_0 = -A_0 \frac{Ai(u_{-L})}{Bi(u_{-L})} = -A_0 \frac{Ai(u_L)}{Bi(u_L)},$$

а значение коэффициента A_0 определяется из условия нормировки волновых функций.

Сравним решения, полученные двумя различными методами.

3.4. Сравнение результатов расчёта двумя методами

В расчётах использовались следующие параметры: $m_0 = 0,1m_e$, $m_e = 9,10938188 \times 10^{-31}$ кг – масса электрона, $\hbar = 1,054571726(47) \times 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, потенциал U и энергия E используются в электрон-вольтах ($1\text{эВ} = 1,602176487(40) \times 10^{-19}$ Дж), электрическое поле задавалось в приведённых величинах. В данном случае $U_0 = 0$, ширина ямы $2L = 2$ нм.

В табл. 1 приведены значения трёх первых разрешённых состояний энергии для прямоугольной бесконечной ямы в отсутствие электрического поля, а также при слабом и «сильном» (т.е. когда напряжённость поля превышает значение основного энергетического уровня) электрическом поле.

Как видно из табл. 1, в присутствии сильного электрического поля метод возмущений приводит к некорректным результатам. Результаты, полученные методом шивки, показывают уширение запрещённых зон между энергетическими уровнями с ростом значения приложенного поля, причём наличие сильного электрического поля приводит к уменьшению зазора между дном квантовой ямы и основным энергетическим состоянием.

На рис. 3 показаны первые три волновые функции, полученные в отсутствие электрического поля, а также при слабом и сильном электрическом поле, рассчитанные методом шивки. Согласно рис. 3, вероятность нахождения электрона в яме с ростом электрического поля перестаёт быть симметричной и смещается к одной из границ ямы.

4. Бесконечная прямоугольная яма с кусочно-линейным потенциалом общего вида

В общем случае потенциал в бесконечной потенциальной яме в присутствии электрического поля описывается выражением:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \in [-\infty, -L], \\ U_0 + qFx, & x \in [-L, x_0], \\ \dots & \\ U_p + qFx, & x \in [x_{p-1}, x_p], \\ \dots & \\ U_N + qFx, & x \in [x_{N-1}, L], \\ \infty, & x \in [L, \infty]. \end{cases} \tag{35}$$

Таблица 1. Энергетический спектр (первые 3 значения) для прямоугольной ямы

	Отсутствие поля	Поле $qF = 0,1$		Поле $qF = 2$	
		Метод возмущений	Метод шивки	Метод возмущений	Метод шивки
E_1	0,938357	1,037995	0,939758	2,755581	0,761992
E_2	3,753428	3,853667	3,761011	5,810891	3,809982
E_3	8,445214	8,545637	8,462048	10,576528	8,494495

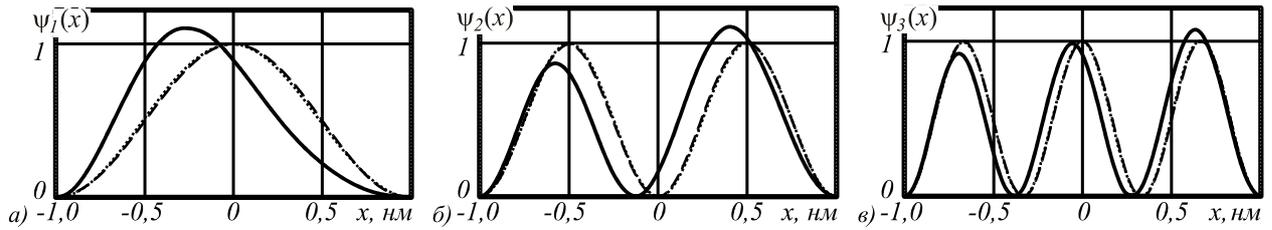


Рис. 3. Волновые функции для бесконечной ямы (в отсутствие поля – пунктирная линия, при $qF = 0,1$ – точечная линия, при $qF = 2$ – сплошная линия) для $n = 1$ (а), $n = 2$ (б) и $n = 3$ (в)

В крайних зонах должны выполняться условия равенства нулю волновой функции (5) на границах ямы:

$$\begin{aligned} A_0 Ai(u_{-L}) + B_0 Bi(u_{-L}) &= 0, \\ A_N Ai(u_L) + B_N Bi(u_L) &= 0, \end{aligned} \tag{36}$$

а во внутренних зонах – условия сшивки (6):

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} Ai(u_{p,p}) & Bi(u_{p,p}) \\ Ai'(u_{p,p}) & Bi'(u_{p,p}) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_p \\ B_p \end{pmatrix} = \\ &\begin{bmatrix} Ai(u_{p+1,p}) & Bi(u_{p+1,p}) \\ Ai'(u_{p+1,p}) & Bi'(u_{p+1,p}) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_{p+1} \\ B_{p+1} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где аргументы $u_{p,p}$, u_{-L} , u_L определены в (3).

Коэффициенты в последней зоне (последнем слое) можно выразить через A_0 и B_0 в виде:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_{N-1} \mathbf{Q}_{N-2} \dots \mathbf{Q}_1 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \tag{37}$$

$$\mathbf{Q}_p = \begin{bmatrix} Ai(u_{p+1,p}) & Bi(u_{p+1,p}) \\ Ai'(u_{p+1,p}) & Bi'(u_{p+1,p}) \end{bmatrix}^{-1} \times$$

где

$$\begin{bmatrix} Ai(u_{p,p}) & Bi(u_{p,p}) \\ Ai'(u_{p,p}) & Bi'(u_{p,p}) \end{bmatrix}.$$

Таким образом, для коэффициентов A_0 , B_0 , A_N , B_N имеем 4 уравнения (36), (37). Данные уравнения образуют однородную систему линейных уравнений. Условие равенства нулю определителя этой системы даёт характеристическое уравнение для определения собственных значений E .

Алгоритм (36)-(38) последовательной сшивки решений на границах зон с использованием матрицы второго ранга позволяет получить характеристическое уравнение в удобной форме.

Численная реализация алгоритма (36)-(38) обеспечивает простое решение стационарного уравнения Шрёдингера (2) со сложным потенциалом (35). Од-

нако при этом необходимо использовать «экспоненциальную арифметику» (арифметика над числами, представленными в виде $a \exp(b)$, a и b – параметры числа). Без применения этой арифметики программная реализация работает некорректно при малых значениях электрического поля $qF < 0,5$.

На рис. 4 показан потенциал сложной формы в отсутствие и при наличии электрического поля. В табл. 2 приведены соответствующие значения энергетического спектра для такого потенциала, а на рис. 5 – распределения волновых функций.

Результаты расчёта показывают, что форма потенциала и вариации внешнего электрического поля позволяют существенно менять энергетический спектр и распределение вероятности нахождения частицы в определённой области гетероструктуры.

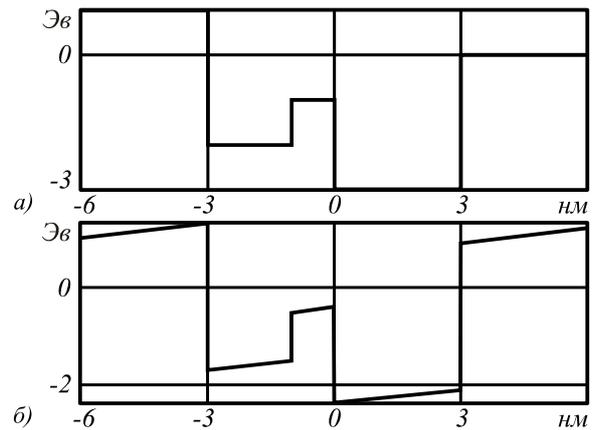


Рис. 4. Потенциал сложной формы в отсутствие электрического поля (а), а также при его наличии $qF = 0,1$ (б)

Таблица 2. Энергетический спектр (первые 9 значений) для сложного рельефа

	Отсутствие поля	Поле $qF = 0,1$	Поле $qF = 1$ ЭВ
E_n	-2,741001	-2,602847	-3,705108
	-2,000144	-1,883931	-3,295242
	-1,577124	-1,733931	-2,376165
	-0,900418	-0,851777	-1,857336
	-0,355715	-0,422565	-1,647189
	0,305344	0,493440	-0,779213
	0,660222	0,833417	-0,338370
	1,210436	1,425745	0,357965
	1,492179	1,979392	0,942955
...	

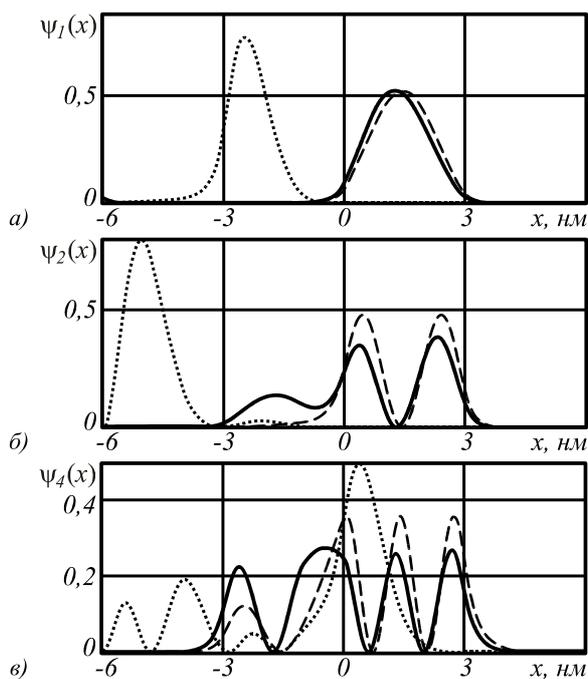


Рис. 5. Волновые функции для сложного рельефа (в отсутствие поля – пунктирная линия, при $qF = 0,1$ – сплошная линия, при $qF = 1$ – точечная линия) для $n = 1$ (а), $n = 2$ (б) и $n = 4$ (в)

Заключение

Разработан и программно реализован алгоритм решения стационарного уравнения Шрёдингера для сложного кусочно-постоянного потенциала при наличии электрического поля. Алгоритм основан на последовательной шивке решений в виде функций Эйри на границах зон без повышения ранга матрицы более двух, что позволяет получить характеристическое уравнение в удобной для поиска корневой форме.

Численно показано, что разработанный алгоритм позволяет получать корректные решения при значениях приложенного электрического поля, превышающих величину основного энергетического уровня, т.е. в условиях, когда не применим метод возмущений.

Результаты расчёта со сложным распределением потенциала показывают, что форма потенциала и величина внешнего электрического поля позволяют существенно менять энергетический спектр и вероятность нахождения частицы в той или иной части гетероструктуры.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 10-07-00109-а, 10-07-00438-а, 11-07-00153-а, гранта Президента РФ поддержки ведущих научных школ НШ-4128.2012.9, а также государственных контрактов 07.514.11.4060, 07.514.11.4055.

Литература

1. Нанoeлектроника. Ч. 1: Введение в нанoeлектронику; под ред. акад. А.А. Орликовского – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2009. – 720 с.

2. Драгунов, В.П. Основы нанoeлектроники: учеб. пособие / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. – 332 с.

3. Горбачевич, А.А. Квантовые приборы на основе эффекта передислокации волновых функций в гетероструктурах / А.А. Горбачевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, В.Я. Кремлёв // Микроэлектроника. – 1994. – Т. 23, Вып. 5. – С. 17-26.

4. Горбачевич, А.А. Управляемая эволюция электронных состояний в наноструктурах / А.А. Горбачевич, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев // ЖЭТФ. – 1995. – Т. 107, Вып. 4. – С. 1320-1349.

5. Лазаренко, О.Л. Энергетический спектр неидеальной квантовой ямы в электрическом поле / О.Л. Лазаренко, А.Н. Пихтин // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32, № 9. – С. 1108-1113.

6. Ким, Ч.С. Резонансное туннелирование и нелинейный ток в гетеробарьерах со сложным законом дисперсии носителей / Ч.С. Ким, А.М. Сатанин, В.Б. Штенберг // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, Вып. 5. – С. 569-575.

7. Левич, В.Г. Курс теоретической физики. Том 2. Квантовая механика. Квантовая статистика и физическая кинетика: учеб. пособие / В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин. – М.: Наука, 1971. – 936 с.

8. Handbook of Mathematical Functions / ed. by M. Abramovitz, I.A. Stegun. – National Bureau of Standards, Applied Math. Series, 1965.

9. Casaubon, J.I. Variation Principle for a Linear Potential / J.I. Casaubon, J.P. Cosentino, A.H. Buep // Turk. J. Phys. – 2007. – Vol. 31. – P. 117-121.

References

1. Nanoelectronics. Ch. 1: Introduction in nanoelectronics / ed. by A.A. Orlikovsky. – Moscow: Publishing house of MGTU of N.A. Bauman, 2009. – 720 p. – (In Russian).

2. Dragunov, V.P. Nanoelectronics fundamentals: school-book / V.P. Dragunov, I.G. Neizvestnyi, V.A. Gridchin. – Novosibirsk: NGTU Publisher, 2000. – 332 p. – (In Russian).

3. Gorbachevich, A.A. Quantum devices on the basis of effect of a re-deployment of wave functions in heterostructures / A.A. Gorbachevich, V.V. Kapayev, J.V. Kopaev, V.J. Kremlyov // Microelectronics. – 1994. – V. 23, N 5. – P. 17-26. – (In Russian).

4. Gorbachevich, A.A. Controlled evolution of electronic conditions in nanostructures / A.A. Gorbachevich, V.V. Kapayev, J.V. Kopaev // JETP. – 1995. – V. 107, N 4. – P. 1320-1349. – (In Russian).

5. Lazarenko, O.L. Power spectrum of a nonideal quantum hole in electric field / O.L. Lazarenko, A.N. Pihtin // Physics and techniques of semiconductors. – 1998. – V. 32, N 9. – P. 1108-1113. – (In Russian).

6. Kim, Ch.S. Resonant tunneling and a nonlinear current in heterobarriers with the complex law of carriers dispersion / Ch.S. Kim, A.M. Satanin, V.B. Shtenberg // Physics and techniques of semiconductors. – 2002. – V. 36, N 5. – P. 569-575. – (In Russian).

7. Levich, V.G. Course of the theoretical physics. Vol. 2. The quantum mechanics. The quantum statistics and physical kinetics: school-book / V.G. Levich, Ju.A. Vdovin, V.A. Mjamlin. – Moscow: "Science" Publisher. – 936 p. – (In Russian).

8. Handbook of Mathematical Functions / ed. by M. Abramovitz, I.A. Stegun. – National Bureau of Standards, Applied Math. Series, 1965.

9. Casaubon, J.I. Variation Principle for a Linear Potential / J.I. Casaubon, J.P. Cosentino, A.H. Buep // Turk. J. Phys. – 2007. – Vol. 31. – P. 117-121.

CALCULATION OF THE POWER SPECTRUM OF COMPLEX LOW-DIMENSIONAL HETEROSTRUCTURES IN THE PRESENCE OF ELECTRIC FIELD*S.N. Khonina^{1,2}, S.G. Volotovskiy¹, S.I. Kharitonov^{1,2}, N.L. Kazanskiy^{1,2}*¹*Image Processing Systems Institute of the RAS,*²*Samara State Aerospace University (National Research University)***Abstract**

Solution algorithm for stationary Schrödinger equation with complex piecewise constant potential in the presence of electric field is realized. The algorithm is based on consecutive matching solutions in the form of Airy functions in adjacent zones without increase of matrix rank more than two, that allows to receive the characteristic equation in a form convenient for searching roots. The developed algorithm provides correct solution in the case when applied electric field exceeding value of the basic power level, i.e. in conditions when we will not apply the perturbation method.

Key words: low-dimensional heterostructures, Schrödinger equation, power spectrum, Airy functions.

Сведения об авторах

Сведения об авторе Хонина Светлана Николаевна – см. стр. 26 этого номера.



Волотовский Сергей Геннадьевич, 1959 года рождения, в 1984 году окончил Куйбышевский авиационный институт имени академика С.П. Королёва (КуАИ) по специальности «Прикладная математика», работает ведущим программистом в Учреждении Российской академии наук Институт систем обработки изображений РАН. Область научных интересов: разработка программного обеспечения расчёта и моделирования работы элементов дифракционной оптики.

E-mail: sv@smr.ru.

Sergey Gennadjevich Volotovskiy (b. 1959) graduated from Kuibyshev Aviation Institute named after academician S.P. Korolyov (KuAI) on a specialty “Applied mathematics”, works as the leading programmer in the Image Processing Systems Institute of the RAS. Research interests: software design, modeling of systems with diffractive optical elements.

Сведения об авторах Харитонов Сергей Иванович и Казанский Николай Львович – см. стр. 13 этого номера.

Поступила в редакцию 20 февраля 2012 г.