

А. Н. Г о л и к о в (Таганрог, ТГПИ). **Приближенное решение самосогласованной системы уравнений Шредингера и Пуассона для нанопроволоки на основе кусочно-полиномиальных схем.**

С целью моделирования электронной структуры нелегированной *GaAs* нанопроволоки прямоугольного поперечного сечения методом Галеркина приближенно решалась система уравнений Шредингера и Пуассона

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + \varphi + V_{xc}\right)\psi_n(x, y) + E_n\psi_n(x, y), \quad \nabla^2\varphi(x, y) = -8\pi\rho_c(\psi(x, y)), \quad (1)$$

с граничными условиями $\psi_n(x, y)|_{\partial G} = 0$, $\varphi(x, y)|_{\partial G} = 0$, где $\rho_c(x, y) = \sum_{k=0}^{N_{sb}-1} n_k(\psi_k(x, y))^2$, E_n — n -я подзона энергии, V_{xc} — обменно-корреляционный потенциал по Хедину–Лундквисту,

$$\eta(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar\sqrt{E - E_i}} \left[1 + \exp\left\{\frac{E_i - E_F}{k_b(t)}\right\}\right]^{-1},$$

$$n_i = \int_{E_i}^{\infty} \eta(E) dE. \quad (2)$$

При приближении интеграла (2) интервал $[E_i, \infty)$ разбивался априори заданной точкой \tilde{E} так, что $n_i \approx \int_{\varepsilon_i}^{\tilde{E}} \eta(E) dE + \int_{\tilde{E}}^{E_{\max}} \eta(E) dE$, где ε_i , E_{\max} — переменные пределы, итеративно приближающиеся к E_i и к бесконечности соответственно, пока изменения значений интегралов на текущем шаге не станут меньше априори заданной величины. На каждой итерации отрезок интегрирования покрывался системой подынтервалов, на каждом из которых $\eta(E)$ аппроксимировалась полусуммой полиномов Ньютона для интерполирования вперед и назад с приведением последней при помощи матричной схемы из [1] к виду $P_{k,N} = \sum_{i=0}^N B_{k,i}t^i$, где k — номер подынтервала. В таком виде $P_{k,N}$ применялся для аппроксимации первообразной от $\eta(E)$, интеграл на каждой итерации приближался суммой интегралов от $P_{k,N}$ по всем подынтервалам.

Решения системы (1) искались в виде аппроксимаций

$$\psi_n(x, y) \approx \sum_{i=1}^{N_{terms}} p_{n,i}\phi_i(x, y), \quad \varphi(x, y) \approx \sum_{i=1}^{N_{terms}} v_i\phi_i(x, y),$$

где N_{terms} задается априори. Система (1) сводилась к системе матричных равенств $\mathbf{Cp} = \mathbf{Ip}$, $\mathbf{Av} = \mathbf{f}$, первое из которых является полной проблемой собственных значений, второе — системой линейных алгебраических уравнений, \mathbf{I} — единичная матрица, векторы-столбцы \mathbf{p} , \mathbf{v} содержат искомые коэффициенты $p_{n,i}$, v_i , элементы матриц \mathbf{A} , \mathbf{C} , \mathbf{f} суть двойные интегралы по области, совпадающей с поперечным сечением нанопроволоки.

Двойные интегралы приближались также по кусочно-полиномиальной схеме, при этом область интегрирования $G = \{(x, y) : x \in [a, b], y \in [c, d]\}$ разбивалась на прямоугольные непересекающиеся подобласти, каждая из которых дробилась своей диагональю еще на две треугольные. В каждой треугольной подобласти строился интерполирующий полином Ньютона, который с применением схемы из [1] приводился к виду

$$p_{\bar{k}}(x, y) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n-i} A_{\bar{k}, i, j} t^i u^j. \quad (3)$$

Полином (3) применялся для приближения двойных интегралов по каждой подобласти, сумма таких интегралов приближала искомые двойные интегралы.

В результате за 27 самосогласованных итераций невязки волновых функций, потенциала Хартри, электронной плотности и уровней энергии снижались до 10^{-18} .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ромм Я. Е. Локализация и устойчивое вычисление нулей многочлена на основе сортировки. II. — Кибернетика и системный анализ, Киев, 2007, № 2, с. 161–174.