

Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Разработка и исследование численных моделей квантовых точек

Гришанин Александр Андреевич

Студент

МГУ - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Факультет вычислительной математики и кибернетики, Дубна, Россия

E-mail: alexander_gri@mail.ru

Квантовые точки – это составляющие гетероструктуру наноразмерные кристаллы полупроводника [1]. То есть квантовая точка представляет из себя полупроводник, находящийся в полупроводнике другого типа (осажденный на нем или окруженный им со всех сторон). Если размер кристалла меньше, чем длина волны электрона, то электронные состояния становятся квантовыми, с дискретными уровнями энергии, как у простого атома. Это дает возможность применять их в различных областях индустрии [2,3].

Необходимость численного решения обусловлена потребностью нахождения энергетических уровней и волновых функций электронов в квантовой точке с заданной формой и размером, что позволило бы моделировать квантовую точку с заданными оптическими свойствами.

Для нахождения энергетических уровней квантовой точки необходимо решить стационарное уравнение Шредингера с заданной функцией потенциала. Численное решение сводится к построению матрицы и поиску ее собственных значений. В связи с тем, что интерес представляют только несколько первых собственных значений, использовался метод обратной итерации. В одномерном случае матрица, которую необходимо оборачивать, имеет небольшой размер, метод легко реализуется и дает хорошие результаты. При переходе к задаче с большим количеством измерений вычислительная сложность значительно возрастает, поэтому для решения поставленной задачи было решено использовать суперкомпьютерные вычисления.

В рамках данной работы было проведено моделирование в одномерном и двумерном случае, планируется сделать расчеты для трех измерений. Параллельные расчеты выполнялись на суперкомпьютере BlueGene/P, расположенном на факультете ВМК МГУ, в результате были получены интересные собственные значения и собственные функции. Планируется реализовать поиск собственных значений другими методами и сравнить скорость нахождения решений.

Литература

1. Н. Н. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин, П. С. Копьев, Ж. И. Алферов, Д. Бимберг, Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. // Физика и техника полупроводников, 1998, том 32, № 4.
2. Попов Александр Михайлович, Вычислительные нанотехнологии. МАКС Пресс 2009.
3. A.J. Nozik, Quantum dot solar cells. // Physica E 14 (2002) 115 - 120.

Конференция «Ломоносов 2013»

Слова благодарности

Хочу сказать спасибо своему научному руководителю Александру Михайловичу Попову.