

---

---

# Решение дифференциальных уравнений



# Прошлое занятие

---

---

- Разностные уравнения.
- Диф. уравнения первого порядка.  
Метод Эйлера.  
Методы Рунге-Кутта.
- Диф. уравнения второго порядка.  
Метод прогонки.



# Еще раз

## Методы Рунге-Кутты

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + \sum_{i=1}^q p_i k_i(h) \quad - \text{общая формула, где}$$

$$k_1(h) = h \cdot f(x; y);$$

$$k_2(h) = h \cdot f(x + \alpha_2 h; y + \beta_{21} k_1);$$

$$k_3(h) = h \cdot f(x + \alpha_3 h; y + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2);$$

.....

$$k_n(h) = h \cdot f(x + \alpha_n h; y + \beta_{n1} k_1 + \beta_{n2} k_2 + \beta_{n3} k_3 + \dots);$$

$$\alpha_2 \dots \alpha_q \quad p_1 \dots p_q \quad \beta_{ij} \quad 0 < j < i \leq q \quad - \text{константы}$$



# Методы Рунге-Кутта

## Выбор параметров

Введем функцию погрешности метода

$$\varphi_i(h) = y(x+h) - y(x) - p_1 k_1(h) - p_2 k_2(h) - \dots - p_i k_i(h);$$

Будем искать коэффициенты из условия чтобы

$$\varphi'(0) = \varphi''(0) = \dots = \varphi^{(s)}(0) = 0, \quad \varphi^{(s+1)}(0) \neq 0$$

тогда

$$\varphi(h) = \sum_{i=1}^s \frac{\varphi^{(i)}(0)}{i!} h^i + \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1} = \frac{\varphi^{(s+1)}(\theta h)}{(s+1)!} h^{s+1}$$



# Методы Рунге-Кутта

4 порядок  $s = q = 4$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

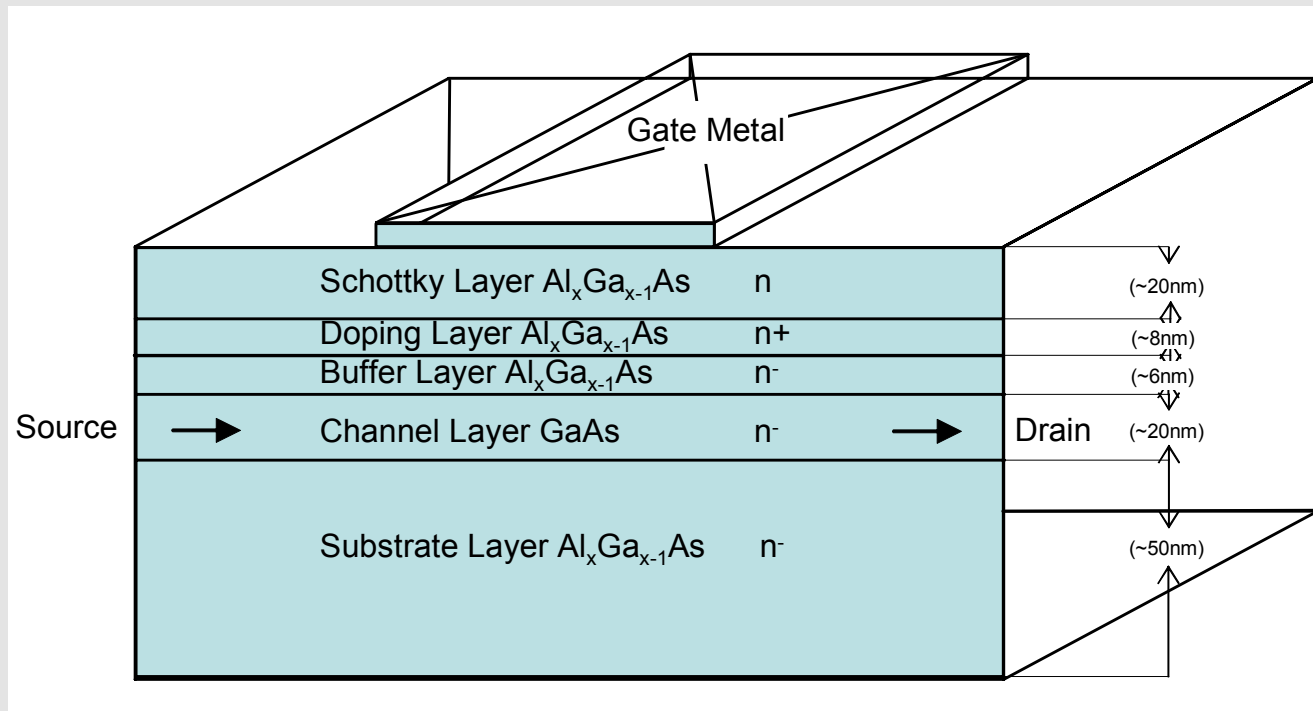
$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$



# Пример

## Структура



# Пример

---

---

## Задача

Рассчитать константы спин-орбитального взаимодействия в полупроводниковой гетероструктуре с металлическим затвором, как функции напряжения на затворе.



# Спин-орбитальное взаимодействие

$$H_{\text{SO}} = \frac{\hbar}{(2m_0c)^2} \nabla V (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{p}})$$

- общий вид

$$H_{\text{D}} = \gamma (k_z^i) \cdot (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x)$$

- формула специфичная для III-V полупроводниковых гетероструктур

$$\gamma (k_z^i) = \beta \langle k_z^i \rangle$$

- константа спин-орбитального взаимодействия

Параметр  $\beta$  определяется зонной структурой полупроводника

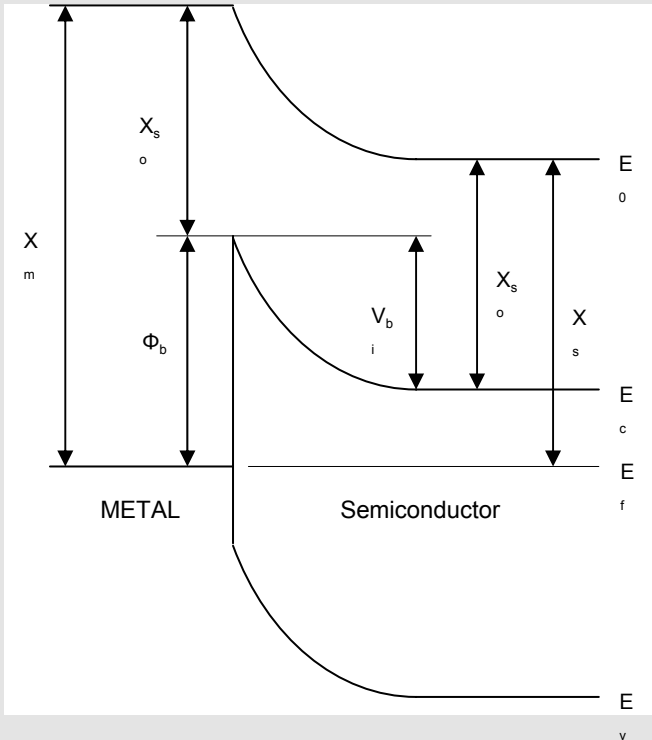
**Задача сводится к нахождению волновых функций электронов локализованных в квантовой яме**



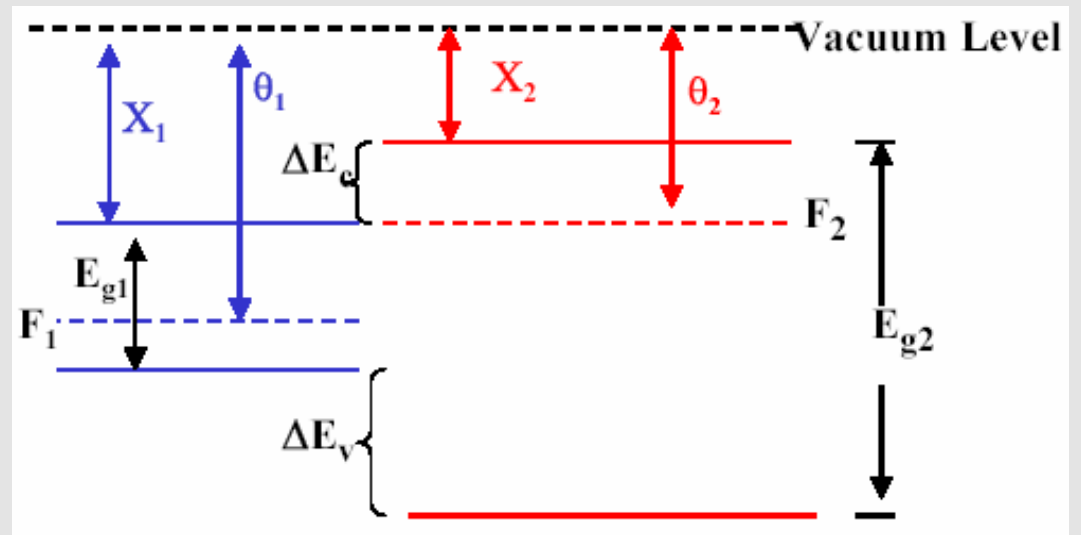


# Band structure

## Металл/полупроводник



## Полупроводник/полупроводник



# Уравнения

Уравнение дрейф-диффузии:

$$n'' + \frac{qE}{k_B T} n' + \frac{qE'}{k_B T} n = 0$$

$$J_n = q\mu_n nE + \mu_n k_B T \nabla n$$

Уравнение Пуассона:

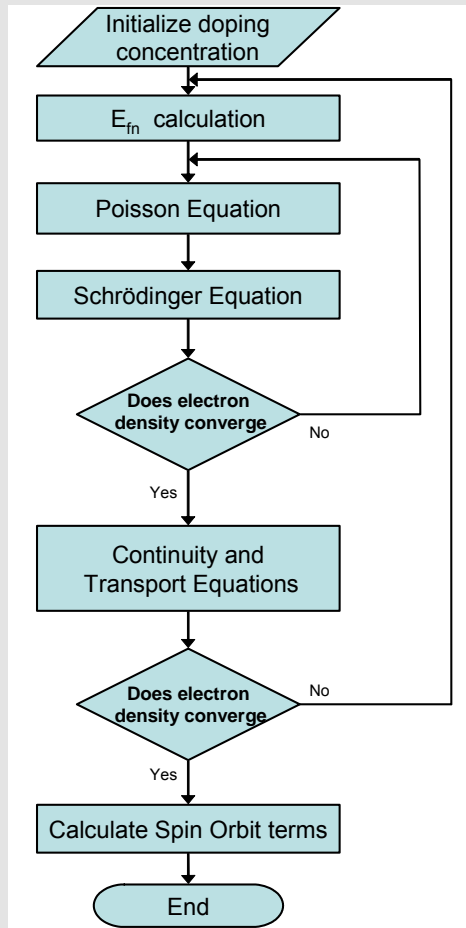
$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) = -e(p - n + N_d - N_a)$$

Уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m^*} \nabla \Psi_k \right) + (V - E_k) \Psi_k = 0$$



# Алгоритм



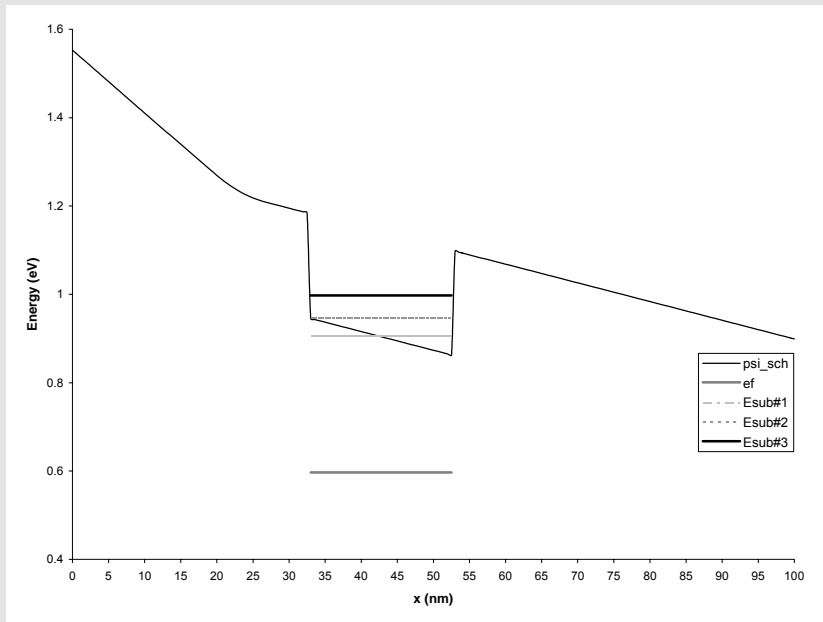
Микроскопическая  
МОДЕЛЬ

Макроскопическая  
МОДЕЛЬ

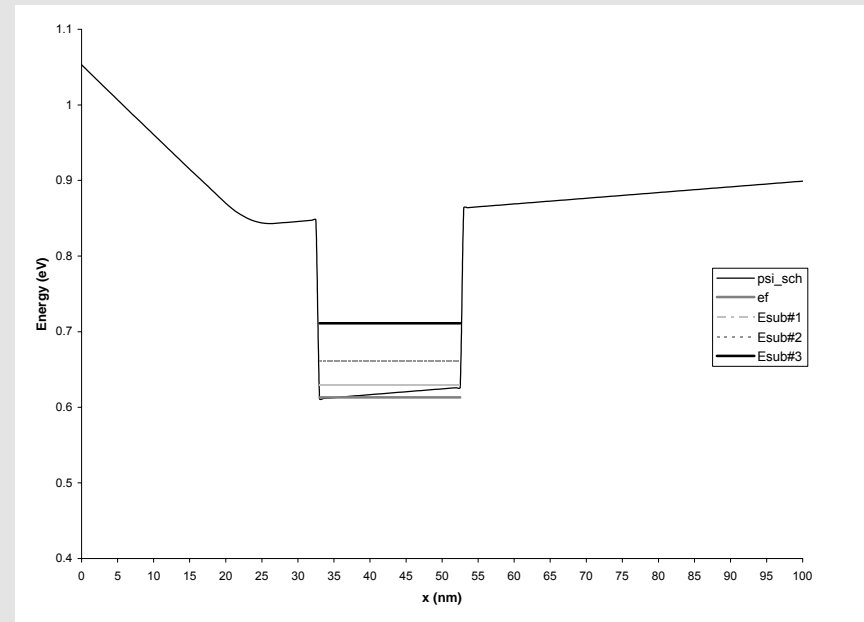


# Результаты

$V_g = 0 \text{ V}$

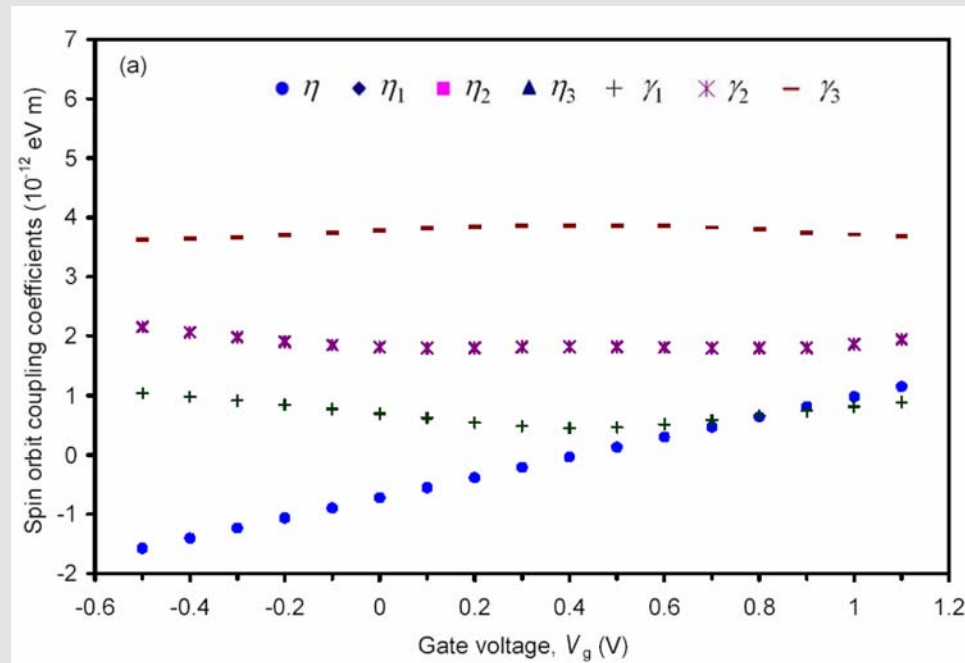


$V_g = 0.5 \text{ V}$



# Результаты

## Константы C-O взаимодействия



# Литература

---

---

- Д. Поттер, Вычислительные методы в физике.
- Н. Н. Калиткин, Численные методы.
- Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков, Численные методы.

