Projekt nr B. 7. 1.

Metoda macierzowa rozwiązywania jednowymiarowego równania Schrödingera.

Projekty mogą być wykonywane oddzielnie dla trzech różnych potencjałów

Wstęp.

Niezależne od czasu równanie Schrodingera dla elektronu uwięzionego w pewnym potencjale $V(\vec{r})$ ma postać:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (1)$$

Jest to równanie własne operatora energii (hamiltonianu). Rozwiązaniem równania (1) są funkcje własne $\psi(\vec{r})$ oraz odpowiadające im wartości własne energii E.

Jedną z metod rozwiązywania jednowymiarowego równania Schrodingera jest metoda diagonalizacji macierzy hamiltonianu. Wygodnie jest najpierw wprowadzić atomowe jednostki energii i długości. Za jednostkę długości przyjmujemy promień Bohra $1a_B = 0.05292\,\mathrm{nm}$, a za jednostkę energii (hartree)

$1\mathrm{Ha} = \frac{\hbar^2}{m_e \cdot a_B^2} = 27.211\,\mathrm{eV}$. W równaniu (1) podstawiamy $\hbar = m_e = 1$ a energię i długości wyrażamy w jednostkach atomowych.

Przyjmujemy rozmiar pudła obliczeniowego równy 2L i określamy siatkę punktów

$x_i = -L + i\Delta x, i = 0,1,2,\ldots, N+1$ z krokiem równym $\Delta x = \frac{2L}{N+1}$. Następnie zastępujemy drugą pochodną w równaniu (1) ilorazem różnicowym:

$$\left.\frac{d^2\psi}{dx^2}\right|_{x=x_i} \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2} = \frac{\psi^{i+1} - 2\psi^i + \psi^{i-1}}{(\Delta x)^2} \qquad (2)$$

Po wprowadzeniu tych zmian otrzymujemy:

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi^{i+1} - 2\psi^i + \psi^{i-1}}{(\Delta x)^2} + V^i\psi^i = E^i\psi^i \qquad (3)$$

Do rozwiązania tego równania potrzebny jest jeszcze warunek brzegowy. Żądamy, aby funkcja falowa zerowała się na brzegach rozważanego obszaru (pudła obliczeniowego):

$$\psi(x = -L) = \psi_0 = 0$$

$$\psi(x = L) = \psi_{N+1} = 0$$

Równanie (3) można przedstawić w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} & h_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{N,N-1} & h_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix} \qquad (4)$$

Macierz hamiltonianu w równaniu macierzowym (4) jest trójdiagonalna i symetryczna o elementach rzeczywistych zdefiniowanych następująco:

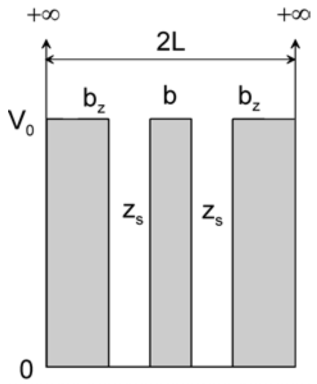
$h_{i,i} = \frac{1}{(\Delta x)^2} + V^i$ dla i=1,...,N

$$h_{i,i+1} = h_{i+1,i} = -\frac{1}{2(\Delta x)^2} \quad \text{dla } i=1,2,...,N-1.$$

Zadania do wykonania (do wyboru jeden z trzech punktów):

A. Diagonalizując macierz hamiltonianu znaleźć energie oraz funkcje falowe stanu podstawowego a także trzech kolejnych stanów wzbudzonych elektronu uwięzionego w prostokątnej studni o szerokości 20 nm i skończonej głębokości V_0. Jako poziom odniesienia przyjąć dno studni. W sprawozdaniu należy zamieścić przykładowe wykresy funkcji falowych oraz wykresy energii i prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w barierze w funkcji głębokości studni (V_0=10meV-50meV).

B. Znaleźć energie oraz funkcje falowe elektronu w stanie podstawowym i w trzech kolejnych stanach wzbudzonych, dla trójbarierowego potencjału uwięzienia (rysunek poniżej).



Przyjąć szerokość pojedynczej studni z_s= 10 nm, V_0=10 meV. Szerokość bariery b oddzielającej obie studnie zmieniać od 0 do 40 nm. Przyjąć stałą szerokość barier zewnętrznych równą 50 nm.
W sprawozdaniu należy zamieścić wykresy funkcji falowych stanu podstawowego i wzbudzonego oraz kwadraty ich modułów dla kilku wartości b. Proszę także sporządzić wykresy energii tych stanów, ich różnicy (tzw. energii tunelowej) oraz prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w barierze zewnętrznej w zależności od szerokości bariery oddzielającej kropki.

Uwagi:
1) należy przyjąć stały krok dz (np. 0.2nm)
2) wektory własne (funkcje falowe) otrzymane z procedury użytej do diagonalizacji macierzy hamiltonianu należy unormować
3) dodatkowo można zbadać wpływ zmniejszania szerokości barier zewnętrznych na podnoszenie energii

C. Znaleźć energie stanu podstawowego i trzech kolejnych stanów wzbudzonych elektronu uwięzionego w potencjale parabolicznym $V(x) = \frac{m_e \omega}{2} x^2$ (tzw. oscylator kwantowy). W równaniu (1) wprowadzić oscylatorowe jednostki długości $\left(l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)$ i energii $(\hbar\omega)$. Otrzymane energie porównać z wynikami dokładnymi $\left(E_n = (1+2n)\frac{\hbar\omega}{2}, \quad n = 0,1,2... \right)$. Wykonać wykres zależności błędu energii w funkcji N dla energii oscylatora $\hbar\omega = 10\,\mathrm{meV}$ dla każdego rozważanego stanu energetycznego. Narysować przykładowe przebiegi funkcji falowych.