

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

---

---

## Praca magisterska

**Rafał Kozik**

kierunek studiów: fizyka techniczna

specjalność: fizyka komputerowa

# Efekty dwuelektronowe w transporcie ładunku przez kropkę kwantową

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Opiekun: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran

Kraków, czerwiec 2008

Oświadczam, świadomy odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę dyplomową wykonałem osobiście i samodzielnie i nie korzystałem ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

**Tematyka pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej Rafała Kozika studenta V roku studiów kierunku Fizyka Techniczna, specjalności Fizyka Komputerowa**

Temat pracy magisterskiej: **Efekty dwuelektronowe w transporcie ładunku przez kropkę kwantową**

Opiekun pracy: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran

Recenzenci pracy: prof. dr hab. Stanisław Bednarek

Miejsce praktyki dyplomowej: WFiIS AGH, Kraków

**Program pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej**

1. Omówienie realizacji pracy magisterskiej z opiekunem.
2. Zebranie i opracowanie literatury dotyczącej tematu pracy.
3. Praktyka dyplomowa:
  - zapoznanie się z ideą,
  - uczestnictwo w eksperymentach/przygotowanie oprogramowania,
  - dyskusja i analiza wyników,
  - sporządzenie sprawozdania z praktyki.
4. Kontynuacja obliczeń związanych z tematem pracy magisterskiej.
5. Zebranie i opracowanie wyników obliczeń.
6. Analiza wyników obliczeń numerycznych, ich omówienie i zatwierdzenie przez opiekuna.
7. Opracowanie redakcyjne pracy.

Termin oddania w dziekanacie: 26 czerwca 2008

.....  
(podpis kierownika zakładu)

.....  
(podpis opiekuna)

### Merytoryczna ocena pracy przez opiekuna:

Pan Rafał Kozik badał zjawisko rozpraszania elektronu na pojedynczej i podwójnej kropki kwantowej z uwięzionym w niej elektronem. Problem został tak postawiony, że elektron padający na studnię miał przeciwny spin do elektronu uwięzionego. Magistrant rozwiązywał równanie Schroedingera zależne od czasu i badał zjawiska związane z wymianą spinu. Uzyskane wyniki są wiarygodne i interesujące. W szczególności Pan Rafał Kozik pokazał, że zjawisko odbicia i transmisji związane z wymianą spinu mają identyczne lub prawie identyczne widmo w prawdopodobieństwa w przestrzeni wektora falowego ( $k$ ). Ponadto, piki transmisji z wymianą spinu okazują się węższe w przestrzeni  $k$ , niż transmisji z zachowanym spinem. Wyniki pracy traktuję jako motywację do dalszych badań. Szczególnie interesujący wydaje się problem z bardziej monoenergetycznym warunkiem początkowym. Pracę Pana Rafała Kozika oceniam jako dobrą. Wyniki można było jednak zaprezentować w bardziej klarowny i interesujący sposób.

Końcowa ocena pracy przez opiekuna: **dobry** (4)

Data: 8 września 2008

Podpis: .....

### Merytoryczna ocena pracy przez recenzenta:

Rafał Kozik w swojej pracy badał transmisję elektronu przez pojedynczą i podwójną kropkę kwantową, w której uwięziony jest drugi elektron. Zastosował w tym celu metodę polegającą na badaniu ewolucji czasowej układu dwóch elektronów z funkcją falową w chwili początkowej uformowaną odpowiednio do zakładanego stanu początkowego procesu rozproszeniowego z uwzględnieniem stanów spinowych obu elektronów. W wyniku uzyskana została zależność transmisji od pędu elektronu dla określonych stanów spinowych obu elektronów. Temat pracy jest bardzo interesujący a uzyskane wyniki oceniam również jako ciekawe i wartościowe. Poważnym mankamentem pracy jest mało przejrzysty opis uzyskanych wyników i ich dyskusja. Odczytanie intencji autora wymaga od czytelnika tekstu znacznego wysiłku. Pomimo to pracę oceniam jako dobrą.

Końcowa ocena pracy przez recenzenta: **dobry** (4)

Data: 6 września 2008

Podpis: .....

---

# Spis treści

<b>1</b>	<b>Wstęp</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Rozwiązanie dla pojedynczego elektronu</b>	<b>8</b>
2.1	Pakiet falowy . . . . .	8
2.2	Rozwiązanie numeryczne . . . . .	9
2.3	Potencjał uwięzienia kropki kwantowej . . . . .	9
2.4	Rozwiązanie niezależne od czasu . . . . .	10
2.5	Obliczanie prawdopodobieństwa transmisji w rachunkach z czasem . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Elektron uwięziony w kropce kwantowej</b>	<b>15</b>
3.1	Metoda czasu urojonego . . . . .	15
3.2	Stany wzbudzone elektronów uwięzionych w studni . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Problem tunelowania drugiego elektronu przez obsadzoną kropkę</b>	<b>17</b>
4.1	Potencjał oddziaływania elektron-elektron . . . . .	17
4.2	Warunek początkowy . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Analiza otrzymanych wyników</b>	<b>19</b>
5.1	Rozpraszanie na pojedynczej studni . . . . .	19
5.1.1	Gęstość prawdopodobieństwa . . . . .	19
5.1.2	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w studni, przed i za nią w funkcji czasu . . . . .	21
5.1.3	Energia pojedynczych elektronów . . . . .	22
5.1.4	Widmo elektronu w funkcji wektora falowego $k$ . . . . .	24
5.2	Rozpraszanie na podwójnej studni . . . . .	27
5.2.1	Gęstość prawdopodobieństwa . . . . .	27
5.2.2	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w studni, przed i za nią w funkcji czasu . . . . .	27
5.2.3	Energia pojedynczych elektronów . . . . .	29
5.2.4	Widmo elektronu w funkcji wektora falowego $k$ . . . . .	33
<b>6</b>	<b>Podsumowanie</b>	<b>38</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>39</b>
	<b>Spis rysunków</b>	<b>40</b>

# 1 Wstęp

Technologia epitaksji molekularnej opracowana w latach siedemdziesiątych ubiegłego wieku pozwoliła na produkcję planarnych układów półprzewodnikowych zbudowanych z warstw arsenku galu oraz jego stopów z domieszką aluminium lub indu podstawiającego gal. Elektron z pasma przewodnictwa poruszający się w takiej planarnej strukturze odczuwa różnicę składu potencjału w warstwach jako modulację potencjału zewnętrznego. Jeszcze w latach siedemdziesiątych na bazie technologii epitaksjalnej powstały studnie kwantowe oraz układy wielokrotnych barier. Wykryto między innymi, że prąd płynący przez układ podwójnej bariery wykazuje pik rezonansowy w funkcji napięcia przyłożonego do układu, gdy długość połówka długości fali de Broglie'a elektronu z poziomu Fermiego elektrody o wyższym potencjale stawała się równa szerokości studni. Powyżej tego pików wzrost napięcia powodował spadek prądu (ujemna przewodność różniczkowa).

W transporcie prądu przez układy planarne oddziaływanie elektron-elektron jest zaniedbywalne. Elektrony z pasma przewodnictwa w niskoenergetycznych procesach transportowych nigdy się nie spotykają. Oddziaływanie elektron-elektron staje się ważne wtedy gdy poprzeczna szerokość kanału staje się skończona. Sytuacja taka ma miejsce na przykład w transporcie ładunku przez kropkę kwantową. Jeśli kropka kwantowa jest obsadzona przez elektrony transport ładunku wiąże się w sposób nieunikniony z oddziaływaniem transmitującego elektronu z elektronami uwięzionymi. W transporcie prądu przez kropki najbardziej charakterystycznym mechanizmem jest tzw. blokada kulombowska. Dodatkowy elektron z rezerwuaru może obsadzić kropkę tylko wtedy gdy energia stanu początkowego (elektron w rezerwarze,  $N$  elektronów w kropce) przekracza energię  $N+1$  elektronów w kropce. Jeśli tak, dodatkowy elektron ma szansę obsadzić kropkę. Zazwyczaj wiąże się to z oddaniem energii przez układ do otoczenia, obsadzanie kropki jest więc procesem nieelastycznym. Podobny warunek można sformułować dla elektronu opuszczającego kropkę. Prąd płynie przez kropkę z elektrody źródła do drenu wtedy gdy potencjał chemiczny  $N$  elektronów w kropce (zdefiniowany jako różnica energii układu  $N$  i  $N-1$  uwięzionych elektronów) mieści się w zakresie wyznaczonym przez poziomy Fermiego elektrod.

Celem niniejszej pracy jest zbadanie elastycznego procesu tunelowania elektronu przez kropkę kwantową gdy jest ona obsadzona przez pojedynczy elektron. Proces, który badamy ma charakter tunelowania rezonansowego i zachodzi przy dużych energiach elektronu padającego na kropkę. Nie jest w naszym zasięgu zbadanie efektów nieelastycznych dla elektronów z pobliża poziomu Fermiego, które odgrywają decydującą rolę dla blokady kulombowskiej. Jednakże, eksperymenty transportowe na kropkach wykonuje się również dla dużej różnicy potencjału między źródłem a drenem [5]. W pomiarach tych widoczny jest sygnał tunelowania z udziałem wielu stanów rezonansowych. Przedstawione poniżej rachunki odpowiadają takim doświadczeniom.

W przedstawionym poniżej modelu zakładamy, że elektrony poruszają się w kierunku  $z$ , a w kierunku poprzecznym (prostopadłym,  $x, y$ ) poddane są działaniu bocznego potencjału

uwięzienia. Zakładamy, że potencjał ten jest silny na tyle, że cały proces tunelowania odbywa się w najniższym stanie kwantyzacji poprzecznej. Dla parabolicznej formy potencjału uwięzienia znany jest jednowymiarowy potencjał efektywny [2]. Potencjał ten stanowi również dobre przybliżenie np. dla poprzecznego potencjału w postaci studni. Aby zastosować go do studni należy zadbać tylko aby parametr lokalizacji poprzecznej oddawał stopień lokalizacji w studni. Potencjał efektywny [2] na dużych rozmiarach przechodzi w potencjał kulombowski. W pracy wprowadziliśmy dodatkowo czynnik ekranujący ten potencjał na dużych odległościach. Ekranowanie oddziaływania elektron-elektron w realnych strukturach wiąże się z redystrybucją pozostałych ładunków w układzie. W naszych rachunkach czynnik ekranujący przydatny był w określeniu warunku początkowego dla symulacji zależnej od czasu.

Wykonane zostały zarówno rachunki dla pojedynczej kropki jak i dla kropki podwójnej. Kropka podwójna jest szczególnie interesująca ze względu na niewielką odległość energetyczną stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego. W układzie takim elektron uwięziony w kropce reaguje żywiej na potencjał elektronu transmitowanego.

Prezentowane rachunki zostały wykonane dla równania Schrödingera zależnego od czasu. We wstępnej części pracy pokażemy rozwiązanie problemu transportu pojedynczego elektronu przez układ barier przy użyciu zarówno równania niezależnego od czasu jak i zależnego od czasu. Uzyskane wyniki są identyczne w granicy błędu numerycznego. Dla dwóch elektronów równanie zależne od czasu jest koncepcyjnie prostsze i dlatego zostało wybrane. Jako warunek początkowy przyjmujemy sytuację, gdy jeden elektron jest uwięziony w kropce w stanie podstawowym, a drugi posiada pęd skierowany ku kropce i na starcie rachunku zlokalizowany jest w formie pakiety gaussowskiego, który przebywa poza zasięgiem oddziaływania uwięzionego elektronu. Zakładamy, że elektrony mają przeciwne spiny. Badamy transmisję elektronu z zachowaniem spinu oraz z jego wymianą.

## 2 Rozwiązanie dla pojedynczego elektronu

### 2.1 Pakiet falowy

Analityczne rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, t) = \mathcal{H} \psi(z, t) \quad (1)$$

znane jest tylko w szczególnych przypadkach. Jednym z nich jest ewolucja czasowa biegnącego pakietu falowego, które ze względu na formę warunku początkowego stosowanego w tej pracy warto jest przytoczyć.

Pakiet falowy w chwili  $t = 0$  opisany funkcją Gaussa z wartością średnią pędu równą  $\hbar k$  wyraża się wzorem

$$\psi(z, 0) = C e^{-\alpha z^2} e^{ikz} \quad (2)$$

Aby określić ewolucję czasową pakietu należy policzyć funkcję falową  $\psi(z, t)$ . Można w tym celu wykorzystać rozwinięcie w bazie funkcji własnych

$$\psi(z, t) = \int dq C_q(t) \phi_q(z), \quad (3)$$

gdzie  $C_q(t)$  to współczynniki rozwinięcia a  $\phi_q(z)$  - funkcje własne. W celu wyznaczenia współczynników rozwinięcia można skorzystać z podstawienia równania (3) do równania Schrödingera zależnego od czasu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int dq C_q(t) \phi_q(z) = \mathcal{H} \int dq C_q(t) \phi_q(z) = \int dq C_q(t) E_q \phi_q(z). \quad (4)$$

Porównując w tym wyrażeniu współczynniki przy różnych funkcjach własnych

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_q(t) = E_q C_q(t), \quad (5)$$

co po obliczeniu daje

$$C_q(t) = C_q(0) e^{-i \frac{E_q}{\hbar} t}. \quad (6)$$

Współczynniki  $C_q(0)$  można wyznaczyć wykorzystując fakt, że  $\int dq |C_q(0)|^2 = \int dz |\psi(z, 0)|^2 = 1$

$$\int dq C_q^*(0) C_q(0) = \int dz \psi^*(z, 0) \psi(z, 0) = \int dq C_q^*(0) \int dz \phi_q^*(z, 0) \psi(z, 0). \quad (7)$$

Co przez porównanie współczynników prowadzi do wyrażenia

$$C_q(0) = \int dz \phi_q^*(z) \psi(z, 0) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}} \int dz e^{-i(q-k)z} e^{-\alpha z^2} = \frac{C}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{(q-k)^2}{4\alpha}} \quad (8)$$

Pozwala to wyznaczyć współczynniki rozwinięcia dla dowolnej chwili  $t$



$$C_q(t) = \frac{C}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\frac{(q-k)^2}{4\alpha}} e^{-i\frac{\hbar q^2}{2m}t} \quad (9)$$

oraz ostatecznie funkcję falową pakietu w dowolnej chwili  $t$

$$\psi(z, t) = \frac{ce^{-\frac{k^2}{4\alpha}}}{\sqrt{q + \frac{4i\alpha\hbar t}{2m}}} \exp\left(\frac{-\alpha\left(z - \frac{ikt}{2\alpha}\right)^2}{1 + \frac{4i\alpha\hbar t}{2m}}\right) \quad (10)$$

## 2.2 Rozwiązanie numeryczne

Numerycznie równanie Schrödingera dla pojedynczego elektronu można rozwiązać dla dowolnego potencjału zewnętrznego. W celu dokonania obliczeń numerycznych należy je przybliżyć wykorzystując rozwinięcie w szereg Taylora. Funkcję

$$\psi(z, t + \Delta t) = \psi(z, t) + \frac{\partial}{\partial t}\psi(z, t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(z, t)\Delta t^2 + \dots \quad (11)$$

oraz

$$\psi(z, t - \Delta t) = \psi(z, t) - \frac{\partial}{\partial t}\psi(z, t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(z, t)\Delta t^2 + \dots \quad (12)$$

odejmujemy stronami oraz pomijamy wyrazy rzędu trzeciego i wyższe, otrzymując

$$\psi(z, t + \Delta t) = \psi(z, t - \Delta t) + 2\frac{\partial}{\partial t}\psi(z, t)\Delta t = \psi(z, t - \Delta t) - \frac{2i}{\hbar}\mathcal{H}\psi(z, t)\Delta t. \quad (13)$$

Daje to przepis na iteracyjne obliczenie funkcji falowej w dowolnej przyszłej chwili  $t$ .

Funkcja falowa w chwili  $t = 0$  jest dana z warunków początkowych ale problemem pozostaje znalezienie funkcji falowej w pierwszym kroku czasowym. W tym celu należy skorzystać z najprostszej jednostopniowej metody, wyrażonej wzorem

$$\psi(z, t - \Delta t) \simeq \psi(z, t) - \frac{\partial}{\partial t}\psi(z, t)\Delta t. \quad (14)$$

Ta metoda jest mniej dokładna oraz nie zachowuje normy funkcji falowej, dlatego pierwszy krok należy podzielić na kilka mniejszych kroków oraz z każdą iteracją normować funkcję.

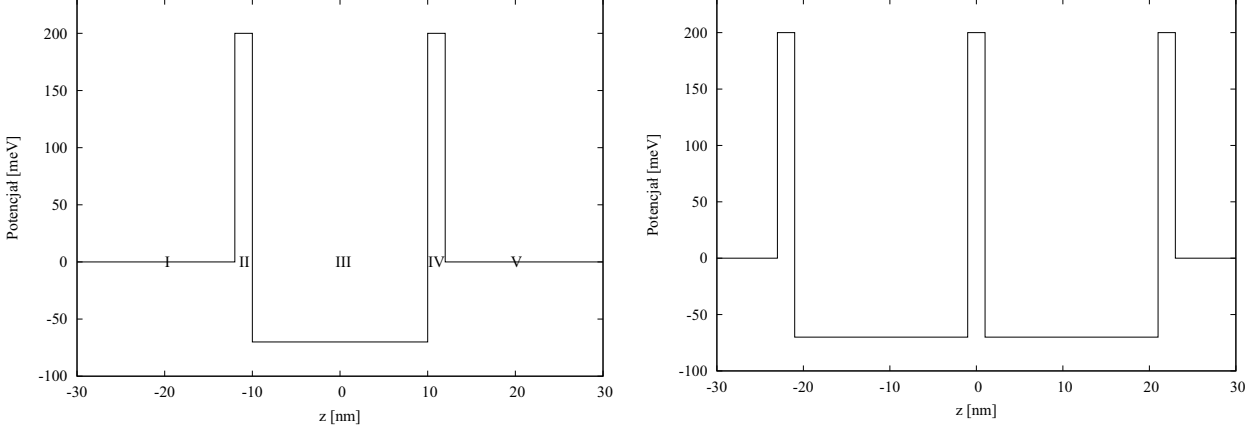
## 2.3 Potencjał uwięzienia kropki kwantowej

Rozważmy model, w którym potencjał dany jest wzorem

$$W(x, y, z) = 0.5m\omega^2(x^2 + y^2) + V(z), \quad (15)$$

gdzie część zależna od  $(x, y)$  odpowiada za uwięzienie boczne, które może być np. wynikiem działania zewnętrznego pola elektrycznego, a  $V(z)$  jest potencjałem wynikającym ze składu warstw półprzewodnikowych tworzących strukturę w kierunku wzrostu. Przebieg  $V(z)$  dla pojedynczej oraz podwójnej kropki przedstawiony jest na rysunku 1. Obszary I oraz V na rysunku 1 (a)

wykonane są z GaAs. Dno pasma przewodnictwa GaAs przyjęte jest jako poziom odniesienia dla energii potencjalnej. Bariery II i IV wykonane są ze stopu  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  z koncentracją  $\text{Al}_x \simeq 10\%$  i wznoszą się na poziom 100 meV ponad potencjał w GaAs. Studnia (obszar III) zbudowany jest z  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  z koncentracją  $\text{In}_x \simeq 7\%$ . W podwójnej kropce znajduje się dodatkowo bariera potencjału w środku dzieląc ją na dwie części. Badane kropki miały różne szerokości od  $15\text{nm}$  do  $25\text{nm}$ .



Rysunek 1: Potencjał w funkcji położenia dla pojedynczej oraz podwójnej studni.

## 2.4 Rozwiązanie niezależne od czasu

Problem tunelowania jednego elektronu przez strukturę zostanie rozwiązany w ramach podejścia zarówno zależnego jak i niezależnego od czasu. Problem własny dla pojedynczej cząstki jest separowalny: funkcje własne są dane przez iloczyny funkcji zależnych wyłącznie od  $z$  i wyłącznie od  $x, y$ . Ponadto założymy, że energia uwięzienia bocznego  $\hbar\omega$  jest na tyle duża, że cały transport odbywa się w tzw. najniższym podpaśmie, to jest dla funkcji uwięzienia bocznego danej przez funkcję stanu podstawowego oscylatora harmonicznego  $\exp(-\frac{m\omega}{2}(x^2 + y^2))$ .

W przypadku pojedynczej studni z rysunku 1 należy dla każdego z pięciu obszarów rozwiązać równanie własne hamiltonianu postaci

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z)\right) \psi(z) = E\psi(z). \quad (16)$$

Energia elektronu, który przybywa z lewej strony rysunku 1 jest zawsze większa od zera. Dlatego dla obszarów I, III oraz V rozwiązanie będzie miało postać

$$\phi(z) = A_s e^{ik_s z} + B_s e^{-ik_s z}, \quad (17)$$

gdzie  $s$  oznacza rozpatrywany obszar a  $k_s = \frac{2m(E-V_s)}{\hbar^2}$  a  $V_s$  oznacza potencjał panujący w danym obszarze. Dla obszaru za studnią dodatkowo  $B_V$  będzie równe 0, ponieważ tam nie ma fali biegnącej w kierunku studni. Dla obszarów II oraz IV rozwiązanie ma podobną formę jak dla

$I$ ,  $III$  i  $V$  tylko liczba falowa będzie urojona  $k_s = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$  gdy  $V_s > E$ . Narzucając warunek ciągłości funkcji falowej oraz jej pierwszej pochodnej w miejscach łączenia obszarów uzyskujemy 8 równań, które muszą być spełnione przez stałe w powyższych równaniach. Warunek unormowania funkcji falowej  $A_I = 1$  stanowić dodatkowe równanie, które pozwoli na wyznaczenie wszystkich stałych.

Prawdopodobieństwo transmisji elektronu, który przybywając z lewej strony obszaru  $I$  ma wektor falowy  $k$  dane jest przez stosunek gęstości prądu prawdopodobieństwa fali przetransmitowanej przez układ do gęstości fali padającej na strukturę.

$$T(k) = \frac{j_{\text{przetrasmitowany}}}{j_{\text{padający}}} \quad (18)$$

Wyrażenie na gęstość prądu prawdopodobieństwa dane jest wzorem

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^*(z, t) \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, t) - \psi(z, t) \frac{\partial}{\partial z} \psi^*(z, t) \right). \quad (19)$$

Dla potencjału z rysunku 1(a) wzór ten sprowadza się do

$$T(k) = \frac{|A_V(k)|^2}{|A_I(k)|^2}. \quad (20)$$

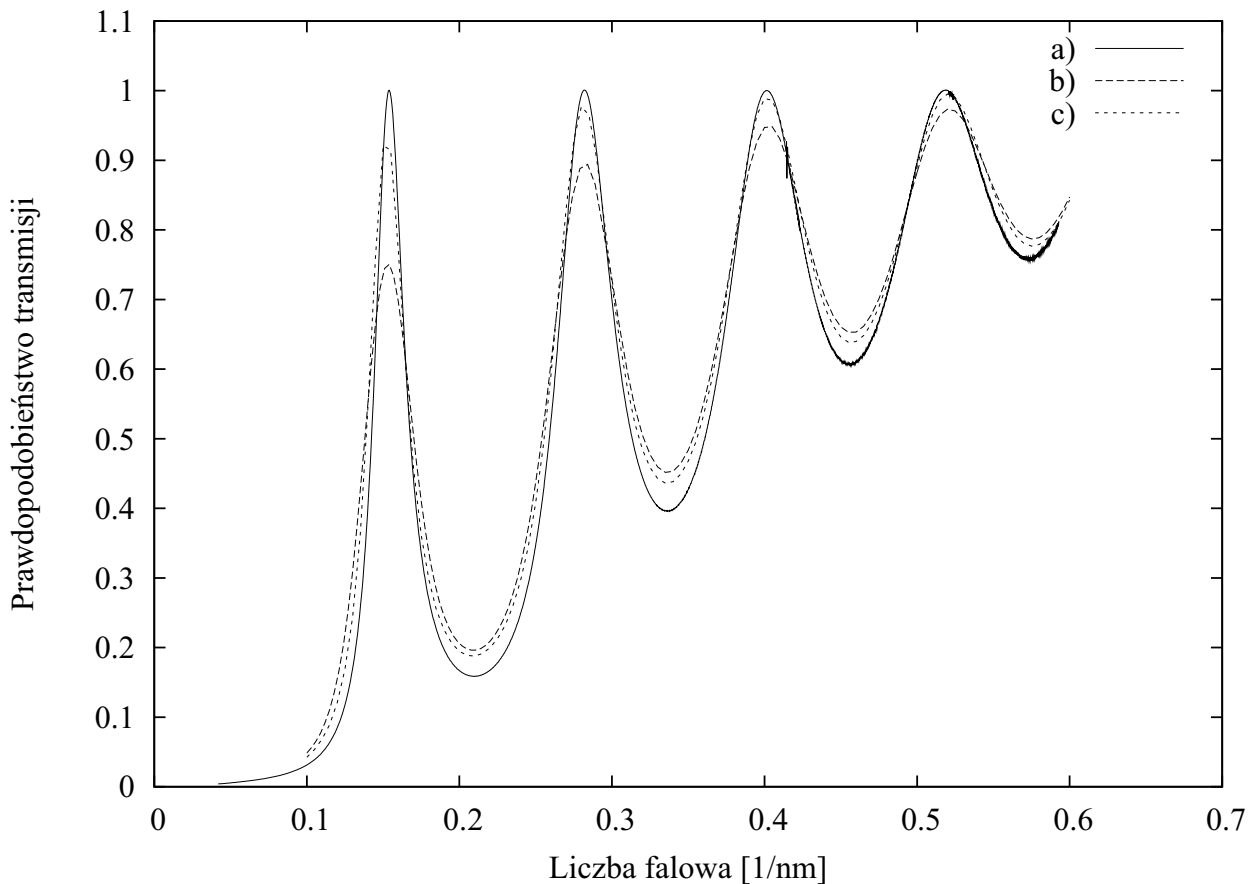
Można również skorzystać z faktu, że współczynnik transmisji oraz odbicia sumują się do 1 i zapisać  $T(k)$  jako

$$T(k) = 1 - \frac{|B_I(k)|^2}{|A_I(k)|^2}. \quad (21)$$

W tym przypadku wystarczy wyznaczyć tylko współczynniki dla funkcji falowej przed studnią.

## 2.5 Obliczanie prawdopodobieństwa transmisji w rachunkach z czasem

Prawdopodobieństwo transmisji w funkcji  $k$  można również obliczyć w rachunkach z czasem. Można to osiągnąć przeprowadzając symulacje dla pakietów o różnych wartościach pędu z bardzo ostrym widmem pakietu w funkcji  $k$ . Pakiety niemal monochromatyczne uzyskuje się dla bardzo rozległych w przestrzeni pakietów (patrz część 2.1 o pakiecie falowym). Dla niemal monochromatycznego pakietu za prawdopodobieństwo transmisji można uznać po prostu część pakietu, która pod koniec symulacji znalazła się po prawej stronie struktury. Porównanie takiego podejścia z rachunkiem bez czasu pokazane jest na rysunku 2 widać, że wraz ze zmniejszaniem rozmycia pakietu wyniki są coraz bardziej zbliżone do rozwiązania niezależnego od czasu. Symulacja została przeprowadzona dla pudła o długości  $7000nm$  ( $3500nm$  przed i za studnią), kroku przestrzennego  $0.5nm$  oraz kroku czasowego równego 1 jednostek atomowych czasu przy długości symulacji równej 200000 j. a. c. Podejście to, mimo że skuteczne jest mało efektywne, gdyż wymaga przeprowadzenia oddzielnej symulacji dla każdej wartości  $k$ .



Rysunek 2: Współczynnik transmisji w funkcji liczby falowej  $k$ .  $T(k)$  dla problemu niezależnego od czasu (a)  $T(k)$  dla problemu zależnego od czasu, rozmycie pakietu  $\alpha = (1/100)^2 1/nm^2$  (b)  $T(k)$  dla problemu zależnego od czasu, rozmycie pakietu  $\alpha = (1/300)^2 1/nm^2$  (c).

Alternatywne podejście wykorzystuje analizującą fourierowską przetransmitowanej części pakietu. Aby wyznaczyć współczynnik transmisji wykorzystując analizę Fouriera należy przetransformować funkcję falową do dziedziny wektora falowego. Dla prądu padającego transformacja będzie dotyczyła obszaru przed kropką kwantową w chwili  $t = 0$

$$\psi_i(k, 0) = \int_{-\infty}^{kropka} dz \psi(z, 0) e^{-ikz}. \quad (22)$$

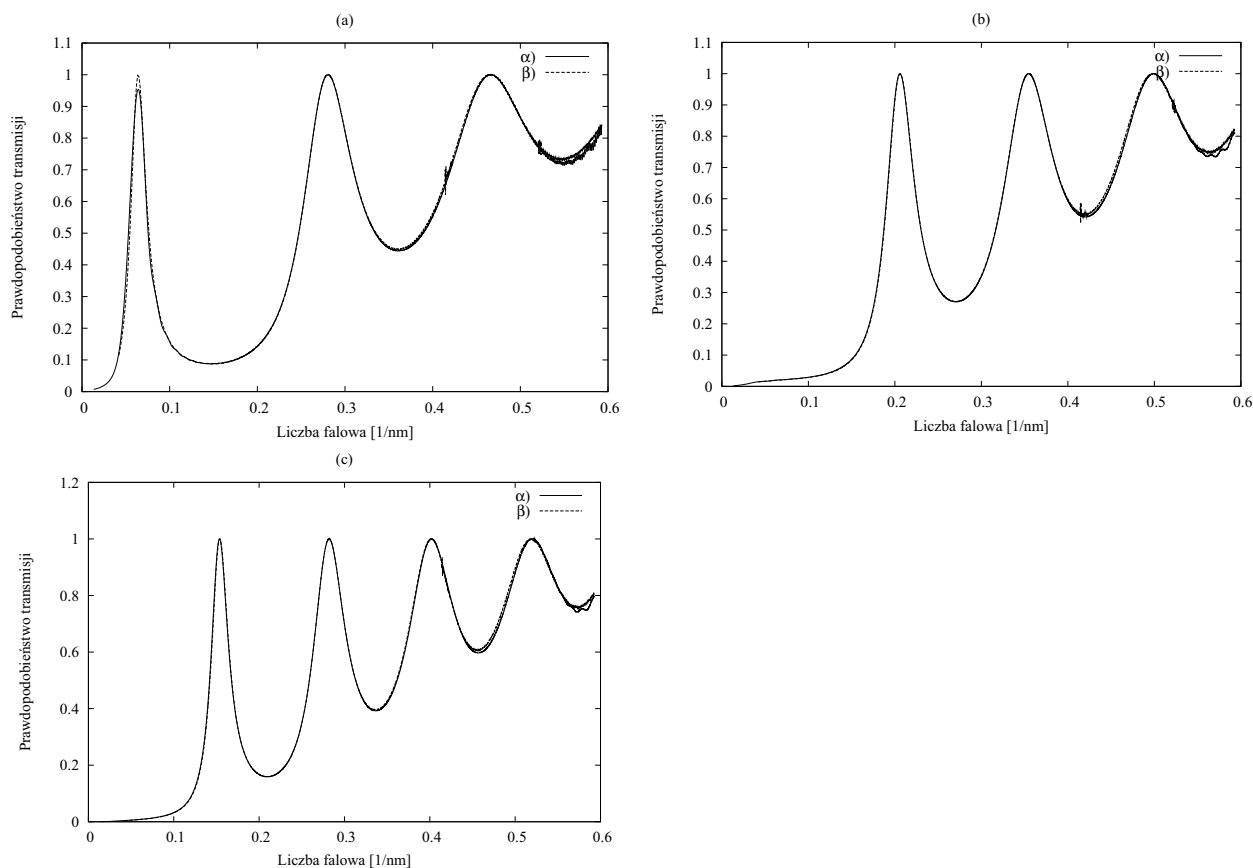
Dla prądu przetransmitowanego transformacja z kolei będzie miała miejsce dla obszaru za studnią w ostatnim kroku czasowym

$$\psi_t(k, t) = \int_{kropka}^{\infty} dz \psi(z, t) e^{-ikz}. \quad (23)$$

Wykorzystując powyższe równania można wyznaczyć współczynnik transmisji  $T(k)$  dla dowolnego  $k$

$$T(k) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\psi_t(k, t)|^2}{|\psi_i(k, 0)|^2} \quad (24)$$

Na rysunkach 3 oraz 4 zostały porównane współczynniki transmisji dla pojedynczej oraz podwójnej studni dla różnych szerokości studni. Uzyskaliśmy świetną zgodność oszacowania praw-

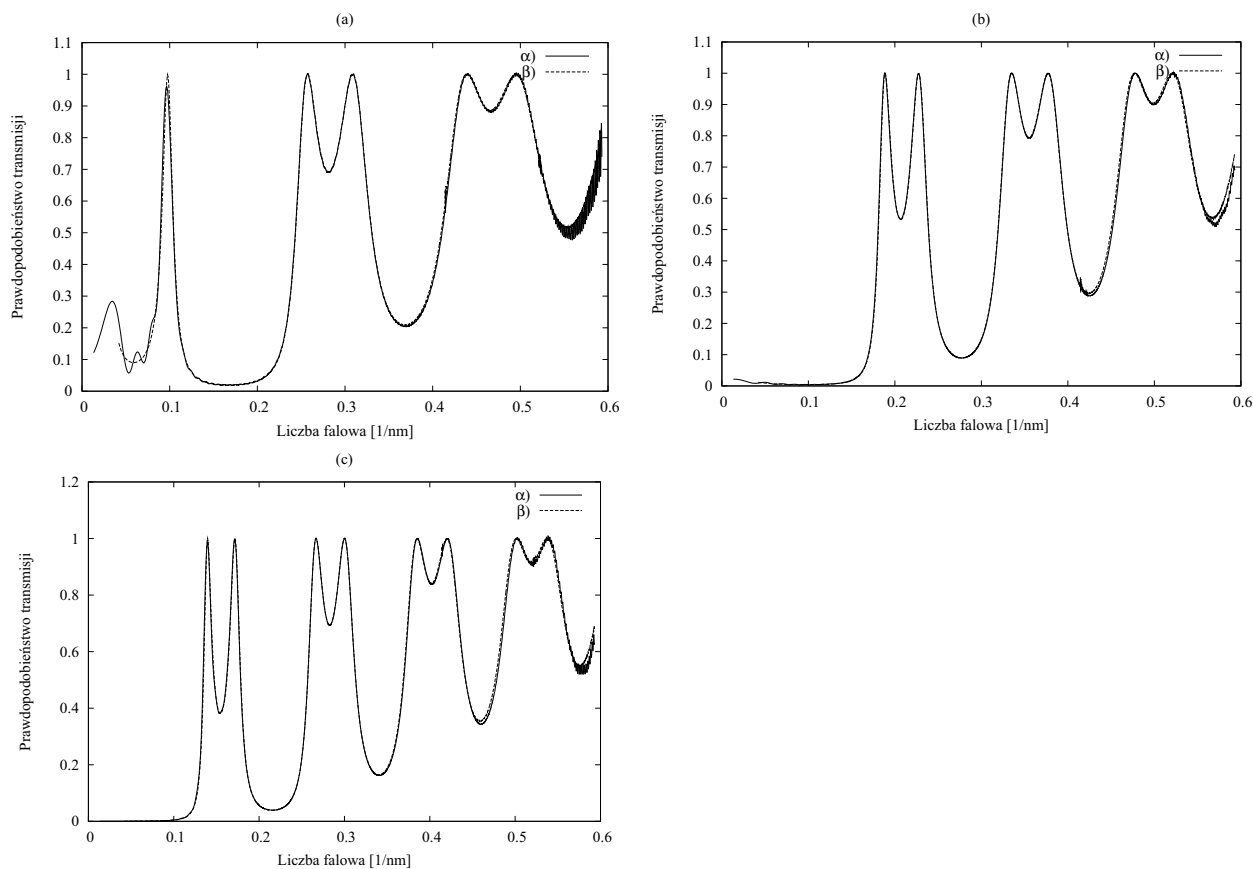


Rysunek 3: Współczynnik transmisji w funkcji liczby falowej  $k$  dla pojedynczej studni. Porównanie współczynników transmisji dla różnych szerokości studni. Szerokość studni  $15nm$  (a),  $20nm$  (b) i  $25nm$  (c).  $T(k)$  dla problemu niezależnego od czasu ( $\alpha$ )  $T(k)$  dla problemu zależnego od czasu ( $\beta$ ).

dopodobieństwa transmisji z rachunków z czasem z wynikami dokładnymi danymi przez rachunek bez czasu. Odstępstwa widoczne są tylko dla bardzo małych  $k$  i dla ostatnich  $k$  rozważanych na rysunku. Bardzo wolne części pakietu do końca trwania symulacji wciąż tunelują. Dla nich proces tunelowania pod koniec symulacji nie został zakończony. Natomiast najszybsze części pakietu ulegają odbiciu od prawego końca pudła obliczeniowego. Obydwa odchylenia – w części widma o dużym i małym  $k$  można zniwelować wydłużając rozmiar pudła i czas obliczeń, odpowiednio. Niestety, działania te są przeciwstawne. Wyniki pokazane na rysunku 3 zostały uzyskane dla parametrów rachunkowych w ramach kompromisu między opisem małych i dużych  $k$  oraz czasu obliczeń. Długość pudła wyniosła  $3000nm$  (z czego  $1000nm$  to obszar przed studnią), krok przestrzenny  $1nm$ , rozmycie pakietu  $20nm$  oraz krok czasowy został określony na poziomie 5 jednostek przy długości symulacji równej 25000 jednostek. Te same parametry zostaną zastosowane poniżej dla problemu dwóch elektronów.

Na rysunku 3 przedstawione zostało porównanie współczynnika transmisji dla studni  $15nm$ ,  $20nm$  oraz  $25nm$ . Widać, że wraz ze zwiększaniem rozmiaru studni piki zbliżają się do siebie oraz zmieniają swoją pozycję. W przypadku podwójnej studni piki są podwójne oraz również

wraz ze zmianą rozmiaru studni zbliżają się do siebie i zmieniają swoją pozycję. Piki transmisji, gdy osiąga ona jedynkę odpowiadają sytuacji, w której  $k_{III}$  odpowiada całkowitej liczbie połówek fali w ramach studni. Piki dla podwójnej studni są podwójne i odpowiadają rezonansowym stanom wiążącym i antywiązącym.



Rysunek 4: Współczynnik transmisji w funkcji liczby falowej  $k$  dla podwójnej studni. Porównanie współczynników transmisji dla różnych szerokości studni. Szerokość studni  $15\text{nm}$  (a),  $20\text{nm}$  (b) i  $25\text{nm}$  (c).  $T(k)$  dla problemu niezależnego od czasu ( $\alpha$ )  $T(k)$  dla problemu zależnego od czasu ( $\beta$ ).

### 3 Elektron uwięziony w kropce kwantowej

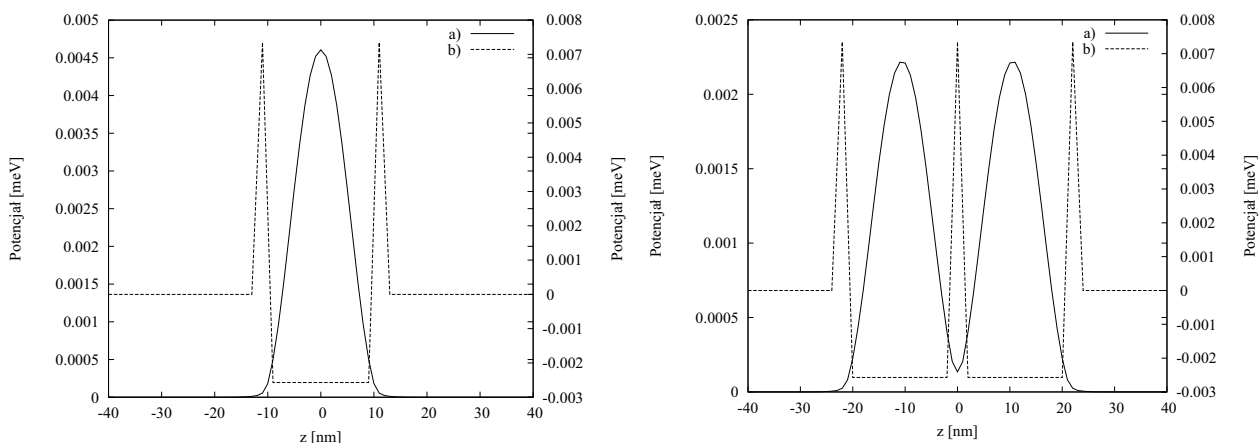
W rachunkach dla dwóch elektronów warunek początkowy będzie konstruowany z jednoelektronowych funkcji falowych, z których jedna będzie odpowiadać elektronowi padającemu z lewej strony, a druga elektronowi uwięzionemu w studni w stanie stacjonarnym. Ten ostatni wyznaczymy metodą czasu urojonego.

#### 3.1 Metoda czasu urojonego

W metodzie czasu urojonego symuluje się rozwiązanie równania Schrödingera zależnego od czasu

$$\psi(z, t + \Delta t) = \psi(z, t) - \frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \psi(z, t) \Delta t, \quad (25)$$

dla czasu urojonego. W powyższym równaniu  $i\Delta t$  zastępuje się przez  $\alpha$ , gdzie  $\alpha$  jest małą liczbą rzeczywistą. Iterując przez odpowiednią ilość kroków czasowych można doprowadzić  $\psi$  do funkcji falowej stanu podstawowego.



Rysunek 5: Gęstość prawdopodobieństwa elektronu uwięzionego w pojedynczej oraz podwójnej kropce kwantowej.

#### 3.2 Stany wzbudzone elektronów uwięzionych w studni

Metodą czasu urojonego można również wyznaczyć stany dwóch uwięzionych elektronów. W celu wyznaczenia energii stanów wzbudzonych można umieścić dwa elektrony w różnych obszarach studni i symulować taki układ metodą czasu urojonego. W chwili początkowej funkcja falowa każdego z elektronów jest zadana funkcją Gaussa. Elektrony są umieszczone symetrycznie względem środka studni oraz punktu  $z = 0$ . Każdemu stanowi będzie odpowiadać inna dwuelektronowa funkcja falowa. Stanem podstawowym jest stan singletowy parzysty, należy więc skonstruować symetryczną i parzystą funkcję falową (symetrycznej przestrzennej funkcji musi odpowiadać antysymetryczna funkcja spinowa czyli singlet), wykorzystując wzór

$$\psi(z_1, z_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(z_1)\phi_2(z_2) + \phi_1(z_2)\phi_2(z_1)), \quad (26)$$

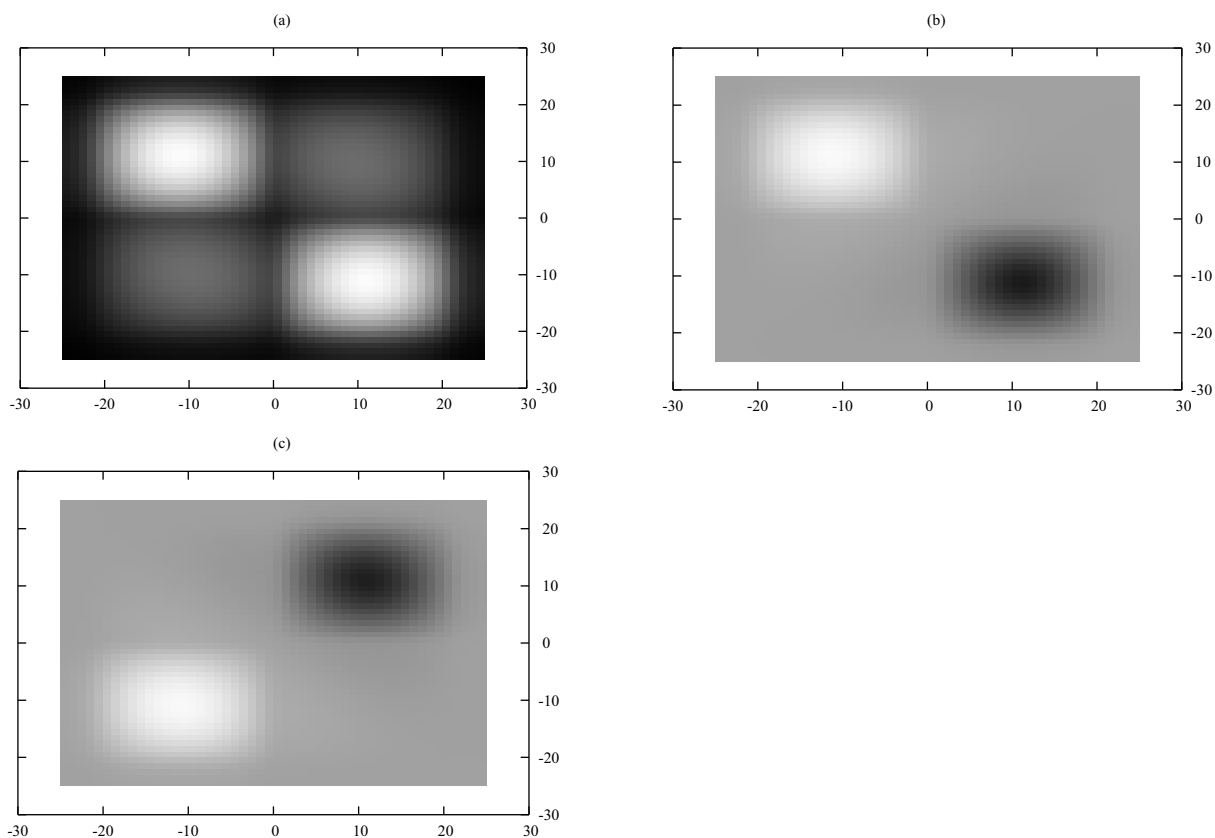
gdzie  $\phi_1, \phi_2$  to funkcje falowe poszczególnych elektronów. Po przeprowadzeniu symulacji można wyznaczyć energię układu

$$\bar{E} = \langle \psi(z_1, z_2) | H | \psi(z_1, z_2) \rangle. \quad (27)$$

Pierwszym stanem wzbudzonym jest stan trypletowy nieparzysty. Należy więc skonstruować nieparzystą antysymetryczną funkcję przestrzenną, której odpowiada symetryczna funkcja spinowa czyli tryplet. Można to osiągnąć za pomocą wyrażenia

$$\psi(z_1, z_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(z_1)\phi_2(z_2) - \phi_1(z_2)\phi_2(z_1)). \quad (28)$$

Drugim stanem wzbudzonym jest stan singletowy nieparzysty. Można taki stan utworzyć dokonując odbicia antysymetrycznej nieparzystej funkcji przestrzennej (stan trypletowy nieparzysty) względem osi  $z_2 = 0$ .

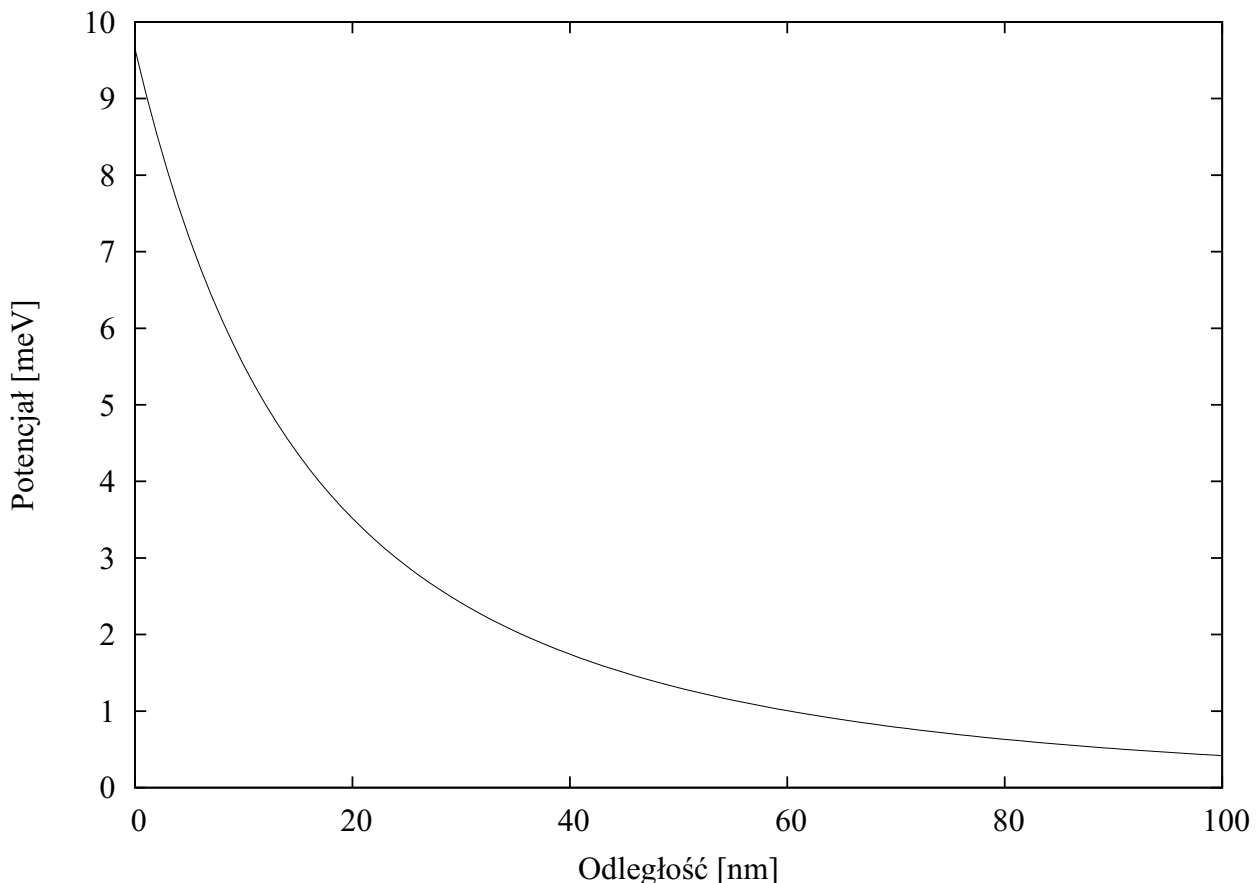


Rysunek 6: Funkcja falowa dwuelektronowa w płaszczyźnie  $z_1, z_2$  w stanie (a) podstawowym - singletowym parzystym (b) pierwszym wzbudzonym - trypletowym nieparzystym (c) drugim wzbudzonym - singletowym nieparzystym.



## 4 Problem tunelowania drugiego elektronu przez obsadzoną kropkę

### 4.1 Potencjał oddziaływania elektron-elektron



Rysunek 7: Potencjał oddziaływania  $V_{ee}(z_1, z_2)$  jako funkcja odległości między elektronami.

Potencjał oddziaływania efektywnego dla elektronów, których poprzeczne funkcje falowe dane są przez stan podstawowy oscylatora harmonicznego dany jest [2] wzorem

$$V_{ee}^n(z_1, z_2) = \sqrt{\frac{\pi \kappa}{2 l}} \operatorname{erfcx} \left( \frac{|z_1 - z_2|}{\sqrt{2l}} \right), \quad (29)$$

gdzie  $\kappa = e_2/4\pi\epsilon_0\epsilon$ ,  $l = \sqrt{\hbar/m_e\omega}$  oraz  $\hbar\omega$  jest energią stanu podstawowego dla ruchu poprzecznego.  $\omega = 5meV$  a stała dielektryczna  $\epsilon = 12.4$ . Masa elektronu dla nanostruktury opartej na GaAs jest równa  $m_e = 0.067m_{e0}$ , gdzie  $m_{e0}$  jest masą spoczynkową swobodnego elektronu. Dla potrzeb naszego rachunku korzystnie jest założyć, że potencjał oddziaływania jest ekranowany na dużych odległościach. Przyjmijmy za potencjał oddziaływania

$$V_{ee} = V_{ee}^n e^{-\frac{|z_1 - z_2|}{\beta}} \quad (30)$$

z długością ekranowania  $\beta = 100nm$ .

## 4.2 Warunek początkowy

Uwzględniając potencjał oddziaływania, hamiltonian układu składającego się z dwóch elektronów można zapisać w postaci

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right) + V(z_1) + V(z_2) + V_{ee}(z_1, z_2). \quad (31)$$

Całkowita funkcja falowa dla pary elektronów musi być antysymetryczna przy jednoczesnej zamianie zmiennych przestrzennych i spinów. Zakładamy, że na starcie elektron w studni ma spin na dół, a elektron padający na studnie ma spin do góry (na dół i do góry oznaczają wartość składowej z-owej spinu  $-1/2$  i  $+1/2$ ). W chwili początkowej elektronu są zbyt daleko od siebie by oddziaływać. Funkcję własną z-owej składowej spinu o rzucie  $+1/2$  oznaczmy przez  $\alpha$ , a o rzucie  $-1/2$  przez  $\beta$ . Warunek początkowy do naszych rachunków przyjmujemy w postaci funkcji całkowitej zbudowanej z funkcji częściowych:

$$\psi_{\uparrow\downarrow}(1, 2) = \phi_p(z_1)\phi_z(z_2)\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2), \quad (32)$$

oraz

$$\psi_{\downarrow\uparrow}(1, 2) = \phi_p(z_2)\phi_z(z_1)\alpha(\sigma_2)\beta(\sigma_1). \quad (33)$$

które różnią się tylko permutacją indeksów elektronów.  $\phi_z$  oznacza funkcję falową stanu podstawowego elektronu w studni.  $\phi_p$  jest dana przez biegnący Gaussian jak w rozdziale o transporcie pojedynczego elektronu. Funkcja całkowita jest dana przez

$$\psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\uparrow\downarrow}(1, 2) - \psi_{\downarrow\uparrow}(1, 2)). \quad (34)$$

Funkcja ta ma odpowiednią symetrię ze względu na zamianę fermionów. Spin elektronu 1 ani 2 nie jest określony. Określony jest natomiast spin elektronu, który początkowo jest w studni i spin elektronu, który pada na studnię. Symulację czasową można wykonać na całkowitej funkcji falowej. Nie jest to jednak konieczne. Hamiltonian nie zawiera spinu, w związku z czym części funkcji falowej ewoluują w ten sam sposób. Wystarczy przeprowadzić ewolucję każdej ze składowych oddzielnie. Co więcej wystarczy przesymulować jedną z nich gdyż drugą uzyskamy przez zamianę indeksów elektronów. Takiego podejścia użyjemy dalej, co uprości nie tylko rachunki ale i prezentację wyników. Wykonujemy więc rachunki z czasem dla warunku początkowego danego przez wzór (32). Wyniki pokazujemy z pominięciem symetryzacji (34).

## 5 Analiza otrzymanych wyników

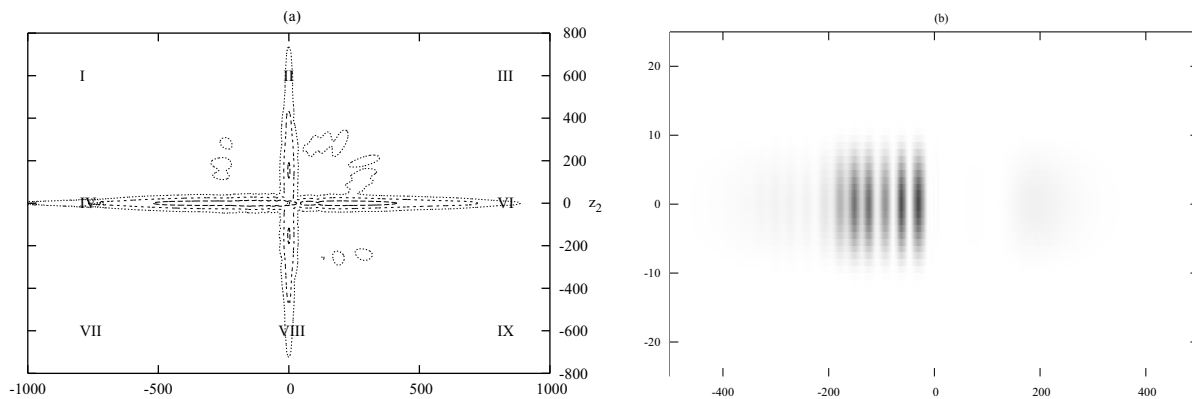
Analizie została poddana gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie  $z_1 z_2$ , energia obu elektronów w funkcji czasu, prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w studni, przed nią i za oraz transmisja przez studnię w funkcji wektora falowego  $k$ . Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie do góry w dowolnym obszarze  $A$  pod warunkiem, że elektron o spinie w dół znajduje się w obszarze  $B$  wyraża się wzorem

$$P_{AB} = \int_A \int_B |\psi(z_1, z_2)|^2 dz_1 dz_2 \quad (35)$$

### 5.1 Rozpraszanie na pojedynczej studni

#### 5.1.1 Gęstość prawdopodobieństwa

Gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  mówi o wzajemnym położeniu obu elektronów. Zarówno w przypadku struktury z pojedynczą jak i podwójną studnią, środek studni potencjału znajduje się w  $z = 0$ .



Rysunek 8: Logarytm z gęstości prawdopodobieństwa (a) oraz gęstość prawdopodobieństwa (b) w końcowej fazie symulacji na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  dla układu dwuelektronowego z pojedynczą studnią potencjału o środku w punkcie  $z = 0$  i szerokości  $20nm$ . Dla rysunku (b) gęstość prawdopodobieństwa nie jest widoczna w innych obszarach niż pokazanych.

Na rysunku 8 (a) przedstawiony jest logarytm z gęstości prawdopodobieństwa dla końcowej fazy symulacji. Największe prawdopodobieństwo istnieje dla konfiguracji, w której elektron o spinie w górę odbije się od studni a elektron o spinie w dół pozostanie w studni (obszar oznaczony numerem IV). Obszar VI reprezentuje z kolei ustawienie, w którym elektron o spinie w górę transmitował przez studnię a elektron o spinie w dół pozostał w studni. Obszary II odpowiada sytuacji tunelowania z wymianą spinu. Po rozpraszaniu elektron o spinie w dół znajduje się poza studnią, a elektron o spinie do góry zostaje uwiezony w studni. Obszar VII odpowiada sytuacji odbicia z wymiana spinu. Na wykresie w skali logarytmicznej widać



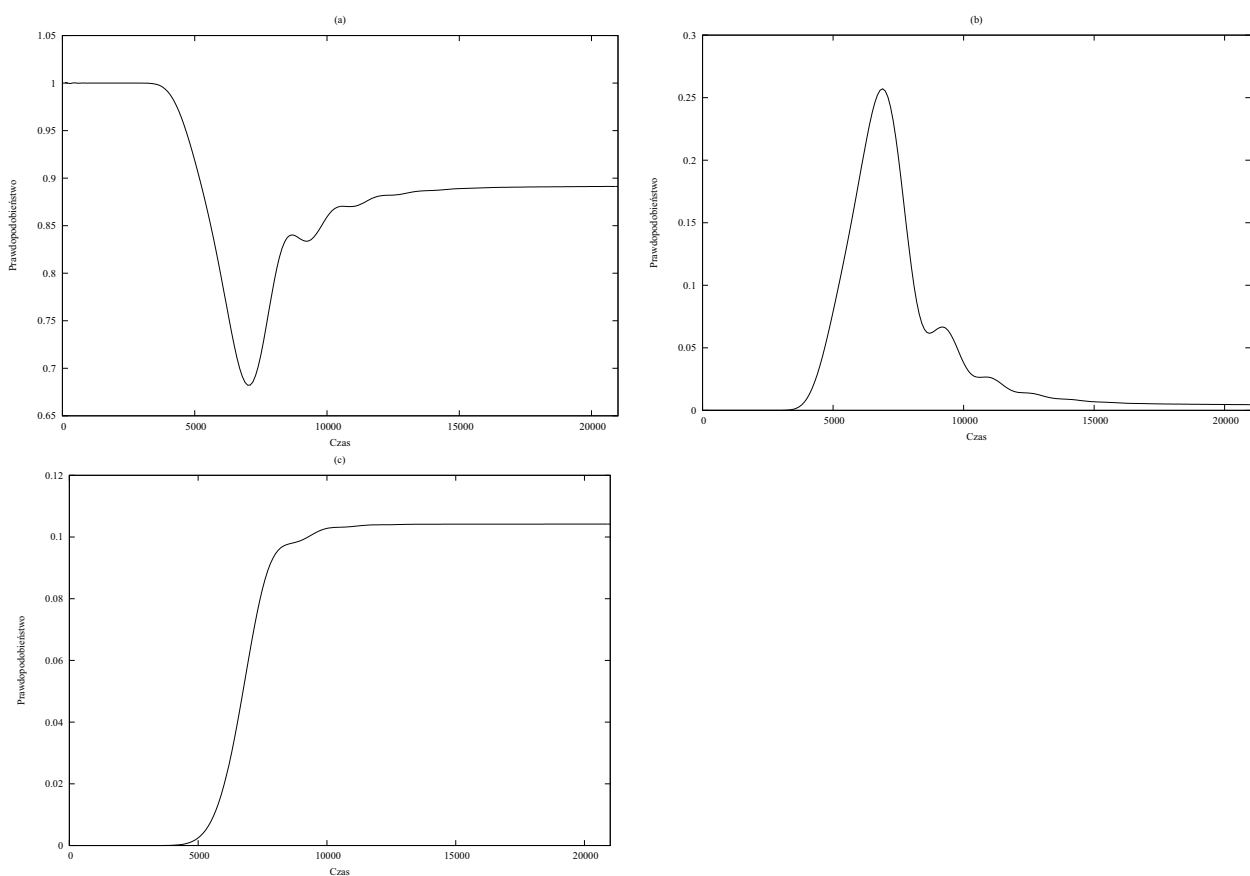
Rysunek 9: Gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  w kolejnych krokach czasowych.

ze zarówno transmisja jak i odbicie z wymiana spinów mają niezerowe prawdopodobieństwo. Znika ono dokładnie gdy tylko wyłączyć oddziaływanie.

Obszary I, III, VII, IX z kolei informują z jakim prawdopodobieństwem oba elektrony znajdują się poza studnią. Zgodnie z uzyskanymi wynikami prawdopodobieństwo takiego procesu jest zaniedbywalne.

Na rysunku 8 (b) pokazana jest gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  w tym samym momencie co na rysunku 8 (a). Gęstość prawdopodobieństwa dla kolejnych etapów symulacji została przedstawiona na rysunku 9.

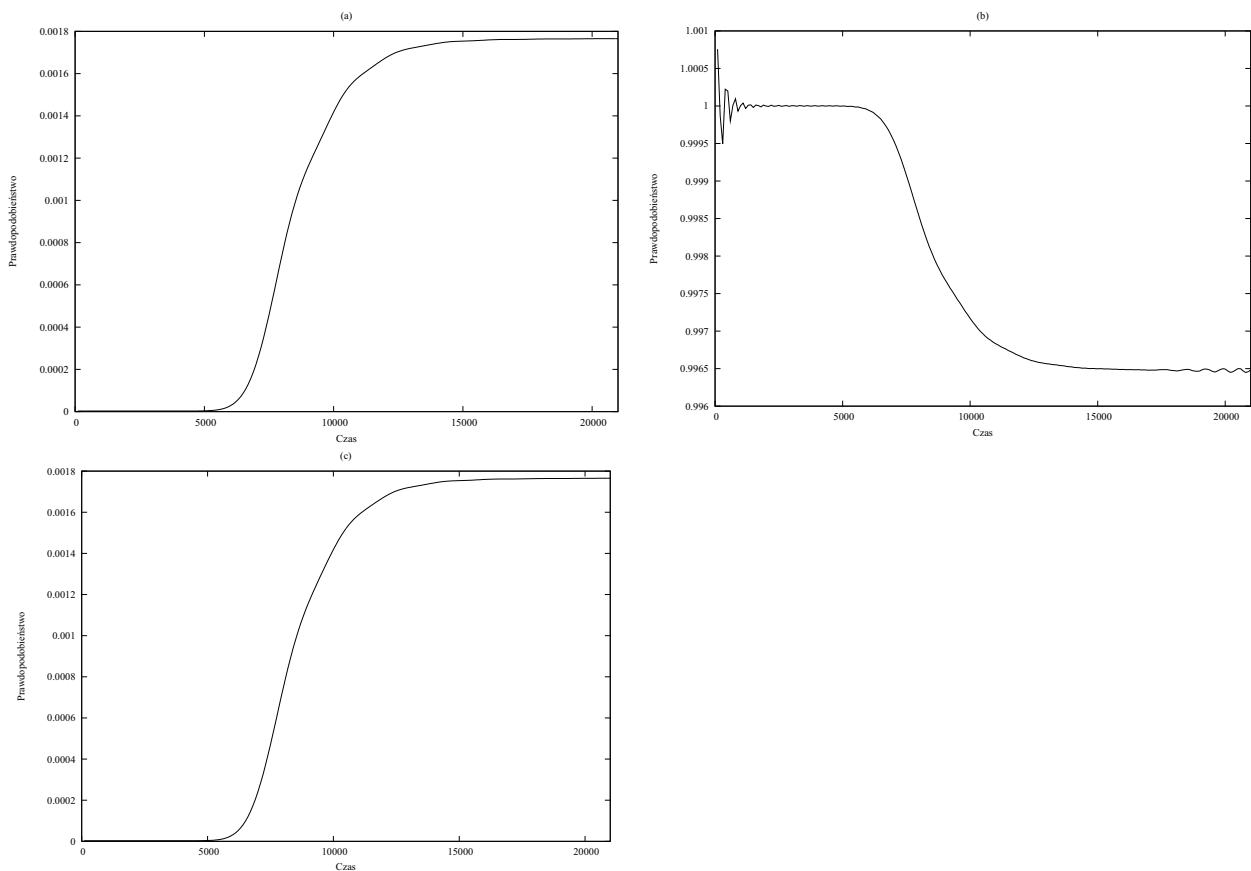
### 5.1.2 Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w studni, przed i za nią w funkcji czasu



Rysunek 10: Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w górę dla pojedynczej studni potencjału w obszarze przed (a) w (b) i za (c) studnią w funkcji czasu.

Kolejnym etapem jest określenie z jakim prawdopodobieństwem elektron znajduje się w poszczególnych częściach badanej struktury. W chwili początkowej elektron o spinie do góry znajduje się przed studnią z prawdopodobieństwem równym 1. Zbliżając się do studni prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w studni zaczyna rosnąć (rysunek 10 (b)) osiągając w pewnej chwili maksimum. W tym momencie prawdopodobieństwo, że elektron o spinie do góry

jest w studni jest na poziomie 0.25. Od tej chwili elektron zaczyna się odbijać od krawędzi studni i prawdopodobieństwo znalezienia go przed studnią zaczyna rosnąć (rysunek 10 (a)).



Rysunek 11: Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w dół dla pojedynczej studni potencjału w obszarze przed (a) w (b) i za (c) studnią w funkcji czasu. Oscylacje dla rysunku (b) są związane ze zbyt bliskim położeniem obu elektronów chwili początkowej.

Elektron o spinie w dół na początku symulacji znajduje się w studni z prawdopodobieństwem równym 1 (rysunek 11 (a) i (c)). W momencie, kiedy elektron o spinie w górę zaczyna zbliżać się do studni przekazuje elektronowi o spinie w dół część energii i zaczyna wypychać go poza obszar studni (rysunek 11 (a) i (c))

### 5.1.3 Energia pojedynczych elektronów

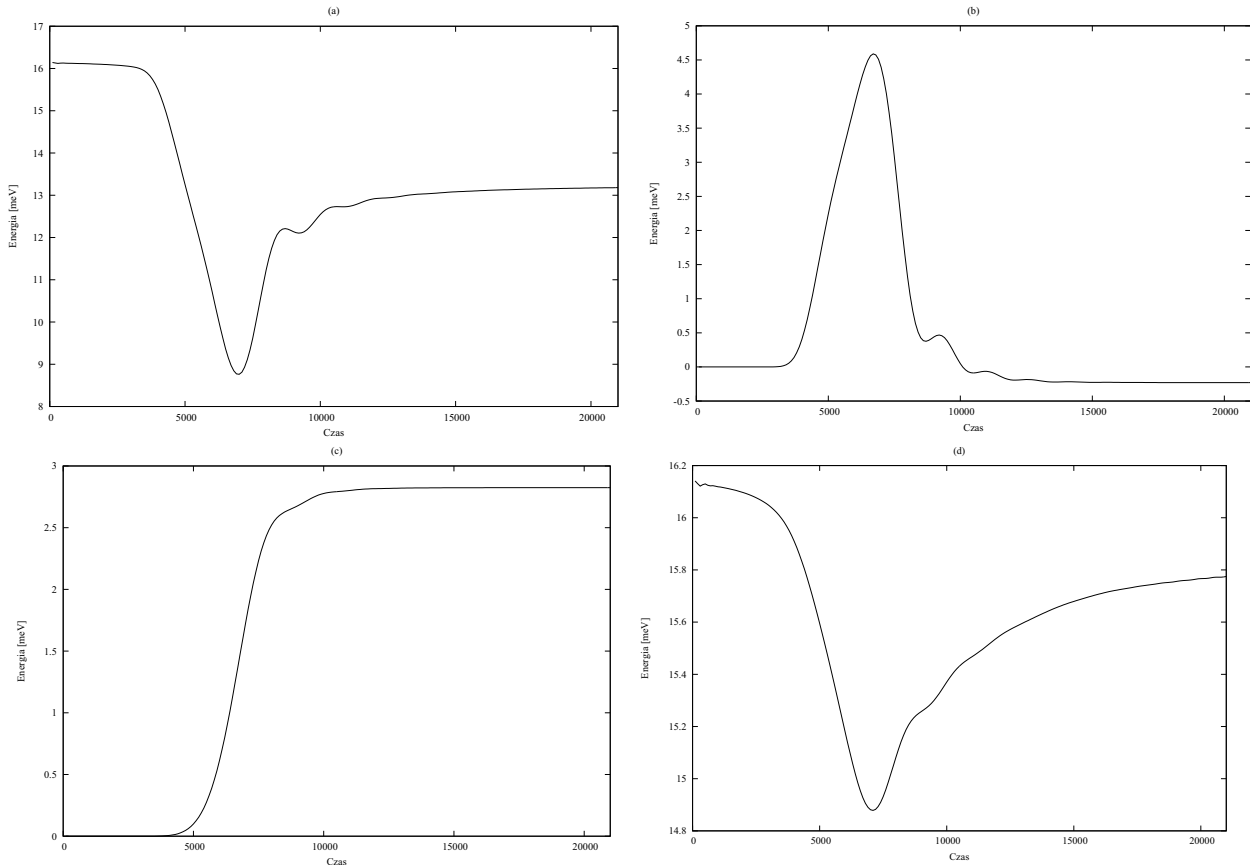
Przedmiotem analizy była zarówno energia elektronu o spinie do góry i o spinie w dół jak i całkowita energia układu elektronów. Struktura, w której znajdują się elektrony, została podzielona na trzy obszary. Policzono wkład do energii osobno z każdego obszaru. W przypadku pojedynczej studni można mówić o obszarze przed i za studnią oraz w samej studni. Przyjmując, że hamiltonian pojedynczego elektronu ma formę

$$h_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + V(z_1) + \frac{1}{2} V_{ee}(z_1, z_2), \quad (36)$$

a jego wartość wyraża się wzorem

$$\bar{E}_1 = \int_S \psi h_1 \psi dz_1, \quad (37)$$

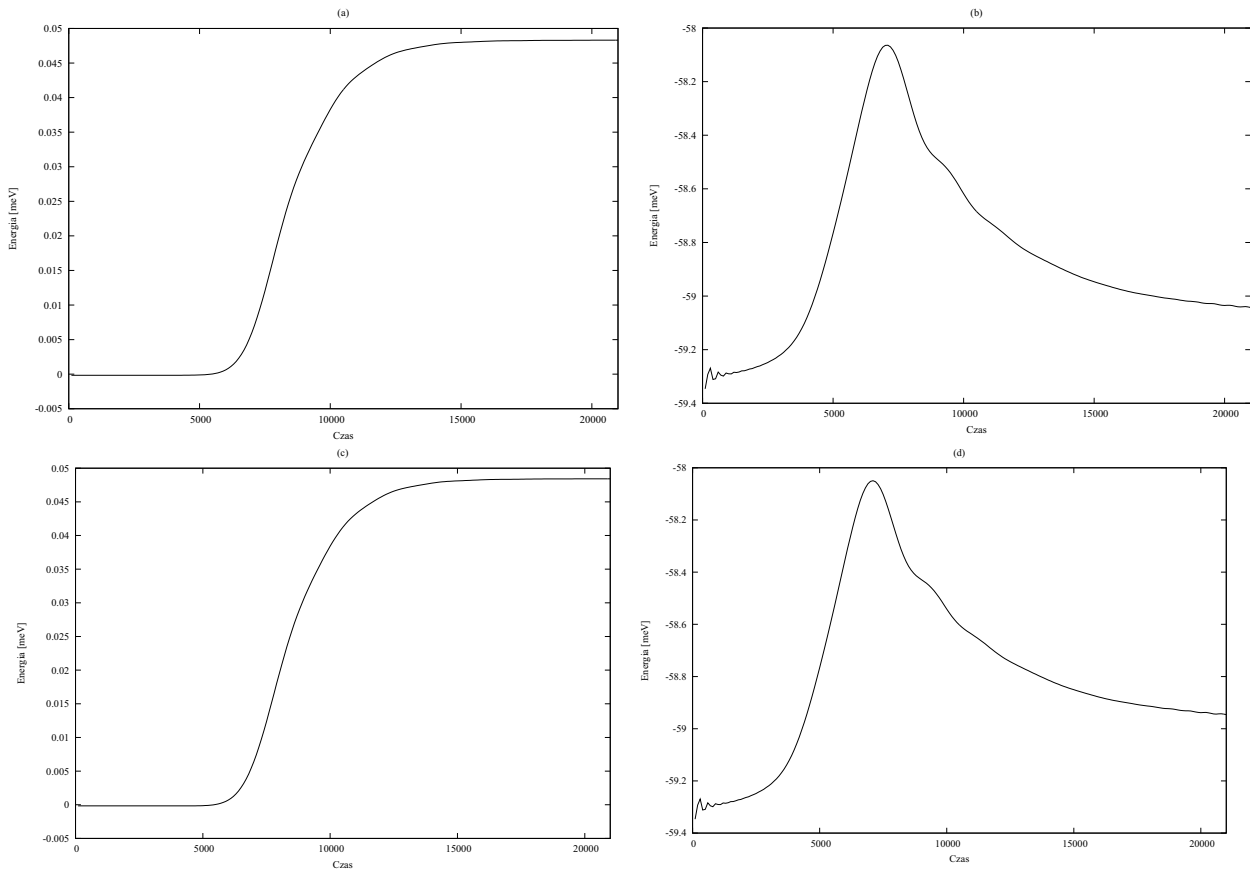
gdzie  $S$  to jeden z obszarów struktury. Czyli jest to energia obliczona dla tej części pakietu falowego, który znalazł się w rozważanym obszarze struktury. Na rysunkach 12 znajdują się wyniki obliczeń.



Rysunek 12: energia elektronu o spinie w górę dla pojedynczej studni policzona w obszarach przed studnią (a) w studni (b) za studnią (c) oraz suma energii ze wszystkich obszarów (d).

Na początku symulacji energia elektronu przed studnią (rysunek 12 (a)) jest równa sumie energii ze wszystkich obszarów a energia w pozostałych obszarach jest równa 0. W momencie zbliżania się elektronu do studni co raz większa część energii znajduje się w studni (rysunek 12 (b)). Energia w studni rośnie osiągając w pewnej chwili maksimum, jest to moment kiedy elektron znajduje się z prawdopodobieństwem około 0.25 w studni (rysunek 10). W kolejnym etapie elektron odbija się od studni i energia w studni zaczyna maleć, z kolei energia przed studnią zaczyna rosnąć. W momencie, kiedy z niezerowym prawdopodobieństwem elektron znajdzie się w studni, energia elektronu za studnią (rysunek 12 (c)) zaczyna jednostajnie rosnąć osiągając wartość maksymalną. W fazie końcowej energia w każdym z obszarów osiąga pewną wartość i pozostaje na tym poziomie.

Energia elektronu (rysunek 12 (d)) w pewnym momencie zaczyna maleć oddając część swojej energii elektronowi o spinie w dół w studni. Następnie elektron o spinie w dół oddaje z powrotem energię ale tylko część i układ nie wraca już do stanu początkowego.



Rysunek 13: energia elektronu o spinie w dół dla pojedynczej studni policzona w obszarach przed studnią (a) w studni (b) za studnią (c) oraz suma energii ze wszystkich obszarów (d).

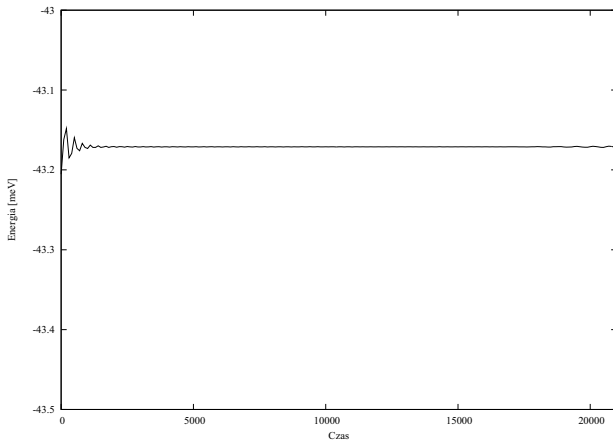
Energia elektronu o spinie w dół w chwili początkowej przed i za studnią jest równa 0, ponieważ prawdopodobieństwo znalezienia elektronu poza studnią jest równe 0. W chwili kiedy elektron o spinie w górę zaczyna zbliżać się do studni część jego energii zostaje przekazana elektronowi o spinie w dół, co widać na rysunku przedstawiającym energię w studni (rysunek 13 (b)) oraz na rysunku przedstawiającym sumę energii ze wszystkich obszarów dla elektronu o spinie w dół (rysunek 13 (d)).

Z rysunku 12 (d) oraz rysunku 13 (d) widać jak elektrony o różnych spinach wymieniają między sobą energię na przemian ją oddając i odzyskując. Całkowita energia obu elektronów pozostaje stała, co zostało pokazane na rysunku 14.

#### 5.1.4 Widmo elektronu w funkcji wektora falowego $k$

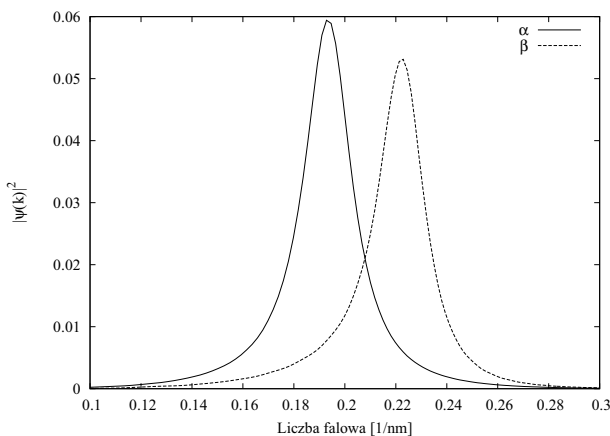
Widmo przetransmitowanego lub odbitego elektronu w funkcji wektora falowego  $k$  pokazane jest na rysunku 15, gdzie porównane zostało widmo elektronu o spinie do góry z wyłączonym ( $\alpha$ ) oraz włączonym ( $\beta$ ) oddziaływaniem pomiędzy elektronami. Widać, że pik w przypadku włączonego





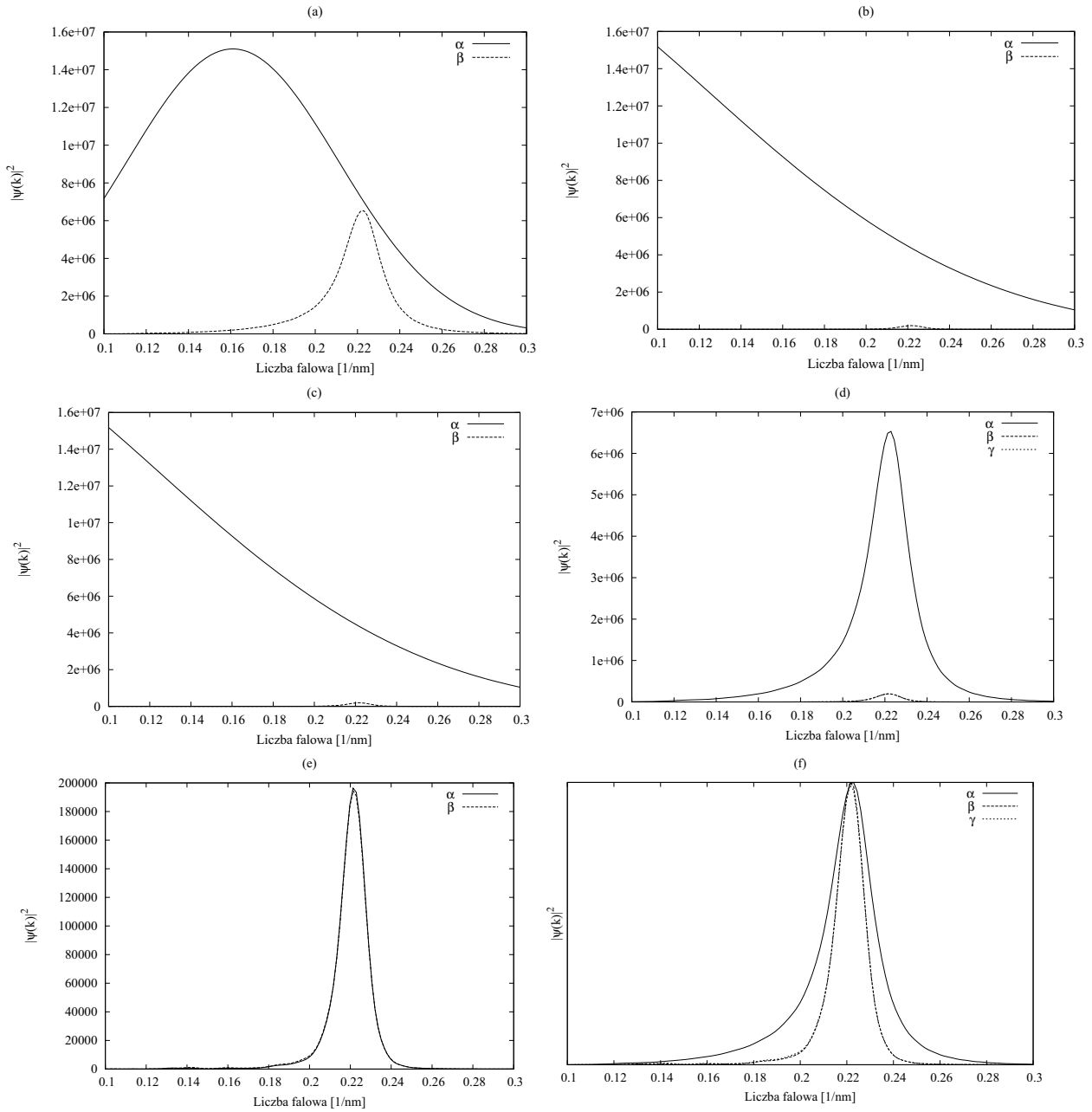
Rysunek 14: Całkowita energia układu elektronów dla pojedynczej studni. Fluktuacje energii na samym początku wynikają z faktu, że elektrony w chwili początkowej nie są wystarczająco oddalone od siebie. Nie wpływa to jednak na wyniki obliczeń w kolejnych krokach czasowych.

oddziaływanie jest przesunięty ku wyższym wartościom wektora  $k$ . Wynika to z rosnącej energii oddziaływania wraz ze zbliżaniem się elektronów do siebie. Z kolei obniżenie maksymalnej wartości jest spowodowane transmisją i odbiciem z wymianą spinu. Poprzez oddziaływanie elektron o spinie w dół z pewnym prawdopodobieństwem opuszcza studnię a elektron o spinie do góry zostaje w niej uwięziony.



Rysunek 15: Unormowane widmo elektronu o spinie do góry w chwili końcowej z wyłączonym oddziaływanie pomiędzy parą elektronów ( $\alpha$ ) oraz włączonym ( $\beta$ ).

Na rysunku 16 zostało pokazane widmo elektronu o spinie do góry (a) i w dół (b) oraz (c) w chwili początkowej i końcowej. Wartość maksymalna widma w przypadku obu elektronów występuje dla tych samych wartości wektora falowego  $k$  (d) co świadczy o transmisji lub odbiciu z wymianą spinu. Kształt pików dla transmisji oraz odbicia elektronu o spinie w dół jest identyczny (e). Porównanie kształtu wszystkich pików jest przedstawione na rysunku 16 (f).

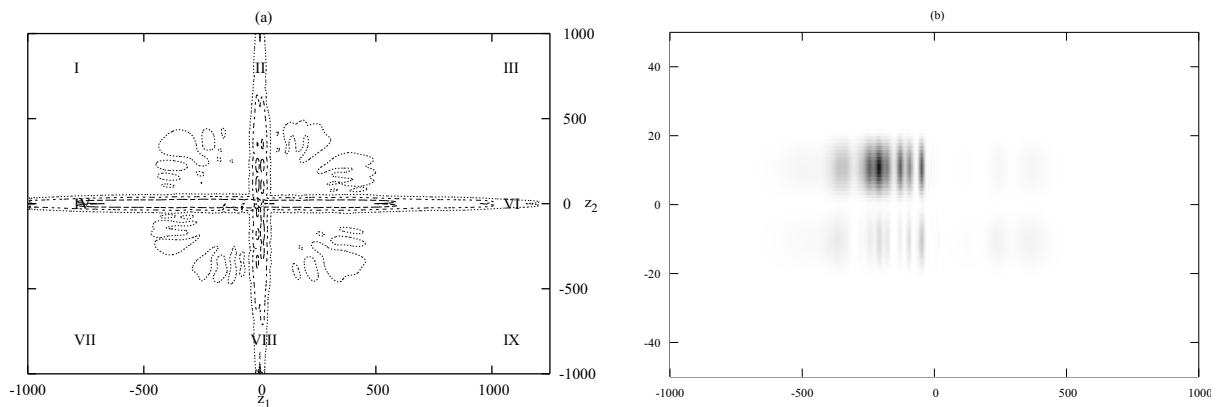


Rysunek 16: Widmo w chwili początkowej ( $\alpha$ ) oraz w chwili końcowej ( $\beta$ ) dla transmisji elektronu o spinie w górę (a), o spinie w dół (b) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół (c) w funkcji  $k$ . Na rysunku (d) zostały porównane widma w chwili końcowej dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ). Na rysunku (e) zostały porównane tylko widma dla elektronu o spinie w dół przetransmitowanego ( $\alpha$ ) i odbitego ( $\beta$ ). Z kolei na rysunku (f) pokazany jest kształt widma (krzywe są w różnej skali) dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ).

## 5.2 Rozpraszanie na podwójnej studni

### 5.2.1 Gęstość prawdopodobieństwa

Tak jak w przypadku pojedynczej studni, na rysunku 17 (a) przedstawiony jest logarytm z gęstości prawdopodobieństwa dla końcowej fazy symulacji. Również największe prawdopodobieństwo występuje dla konfiguracji, w której elektron o spinie w górę odbije się od studni a elektron o spinie w dół pozostanie w studni (obszar IV). Następnym najbardziej prawdopodobnym obszarem jest obszar VI, gdzie elektron o spinie w górę transmituje a elektron o spinie w dół opuszcza studnie, wypchany przez nadlatujący elektron. Obszary oznaczone numerami II oraz VIII informują z jakie są szanse na opuszczenie studni przez elektron o spinie w dół podczas gdy elektron o spinie w górę zostanie w studni. W przeciwieństwie do pojedynczej studni, dla podwójnej studni prawdopodobieństwo jest podobne dla wszystkich konfiguracji, w których oba elektrony znajdują się poza obszarem studni. Z kolei na rysunku (b) przedstawiona jest gęstość prawdopodobieństwa w tej samej chwili co logarytm z gęstości na rysunku (a).

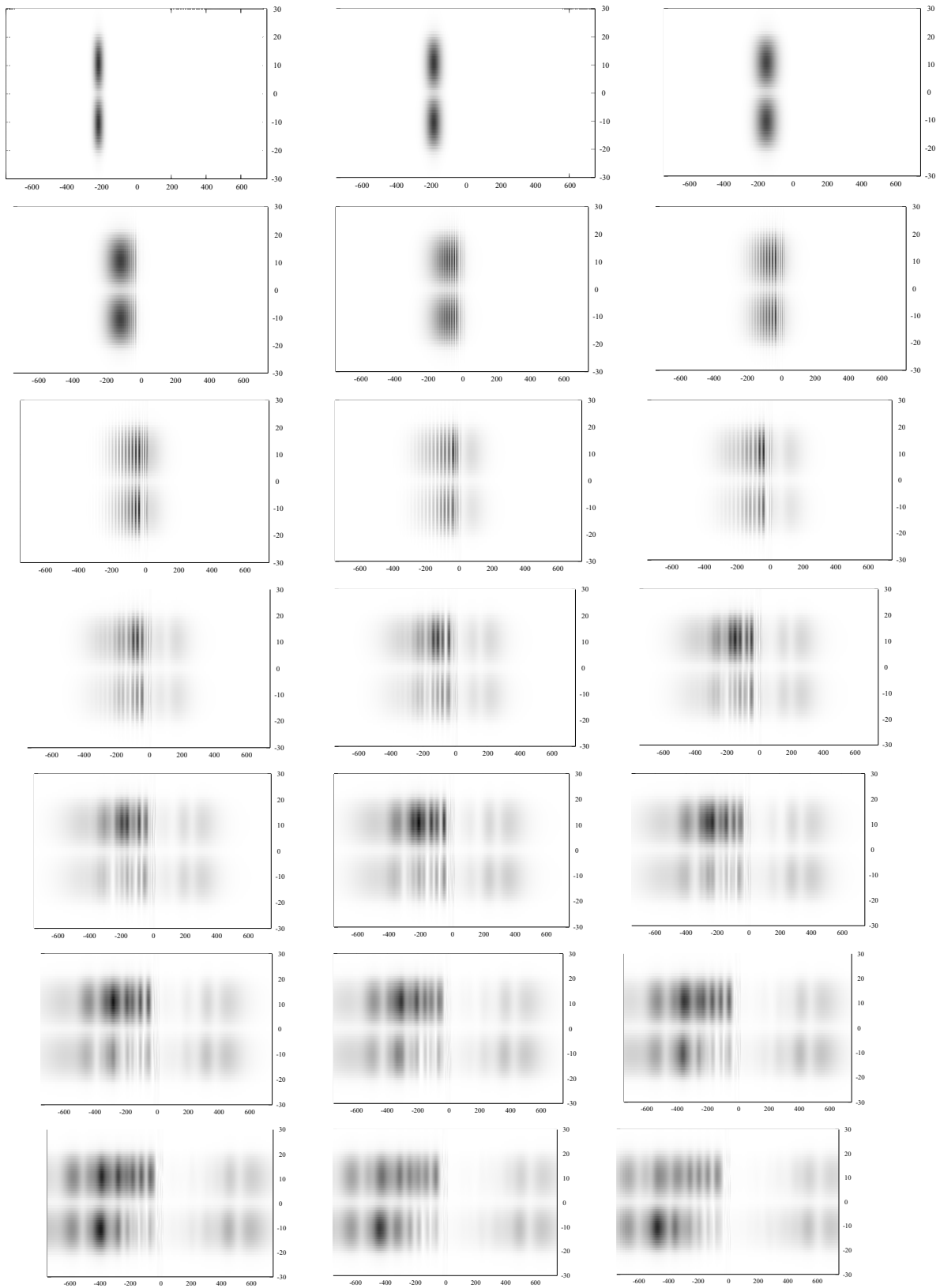


Rysunek 17: Logarytm z gęstości prawdopodobieństwa (a) oraz gęstość prawdopodobieństwa (b) w końcowej fazie symulacji na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  dla układu dwuelektronowego z podwójną studnią potencjału o środku w punkcie  $z = 0$  i szerokości  $20nm$ . Dla rysunku (b) gęstość prawdopodobieństwa nie jest widoczna w innych obszarach niż pokazanych.

Gęstość prawdopodobieństwa dla kolejnych kroków czasowych od początku do końca symulacji została przedstawiona na rysunku 18. Widać jak elektron o spinie do góry zbliża się do studni, po czym część elektronu odbija się od studni a część transmituje na drugą stronę.

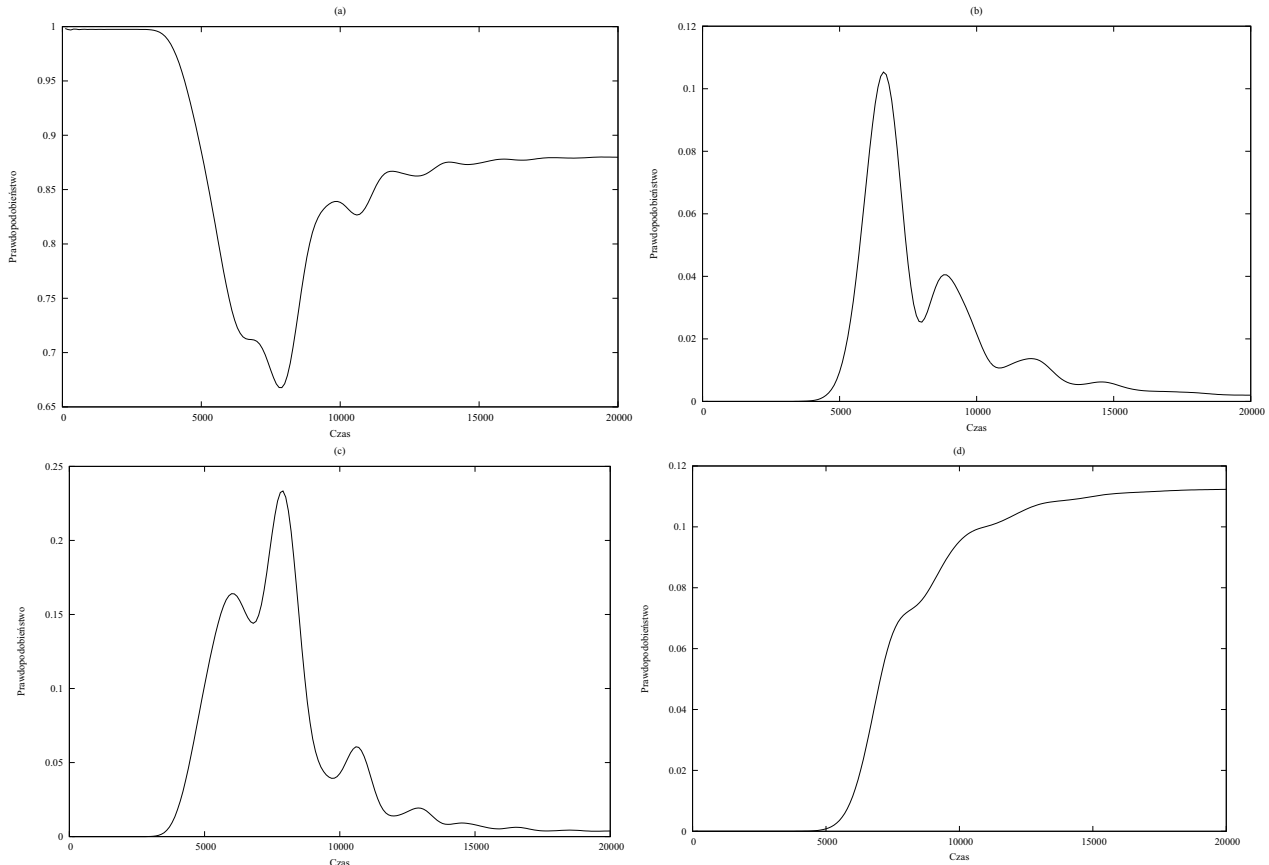
### 5.2.2 Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w studni, przed i za nią w funkcji czasu

Położenie elektronu w funkcji czasu dla podwójnej studni jest pokazane na rysunku 19. W chwili początkowej elektron jest zlokalizowany tylko przed studnią. Wraz z upływem czasu zbliża się do pierwszej studni, przez którą przechodzi tunelując przez cienką barierę potencjału odgradzającą obie studnie. Na rysunku 19 (c) widać jak elektron o spinie w górę zaczyna odbijać się od



Rysunek 18: Gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie  $z_1 z_2$  w kolejnych krokach czasowych.

krawędzi studni i jego prawdopodobieństwo znalezienia w drugiej studni zaczyna rosnąć. W tym samym czasie elektron zaczyna tunelować do obszaru za studnią co widać na wykresie 19 (d). Po pewnym czasie odbity elektron zaczyna wracać do pierwszej studni. Większość pakietu odbija się od studni wracając do obszaru przed studnią. Pewna część pozostaje w obu studniach a inna tuneluje do obszaru za studnią.

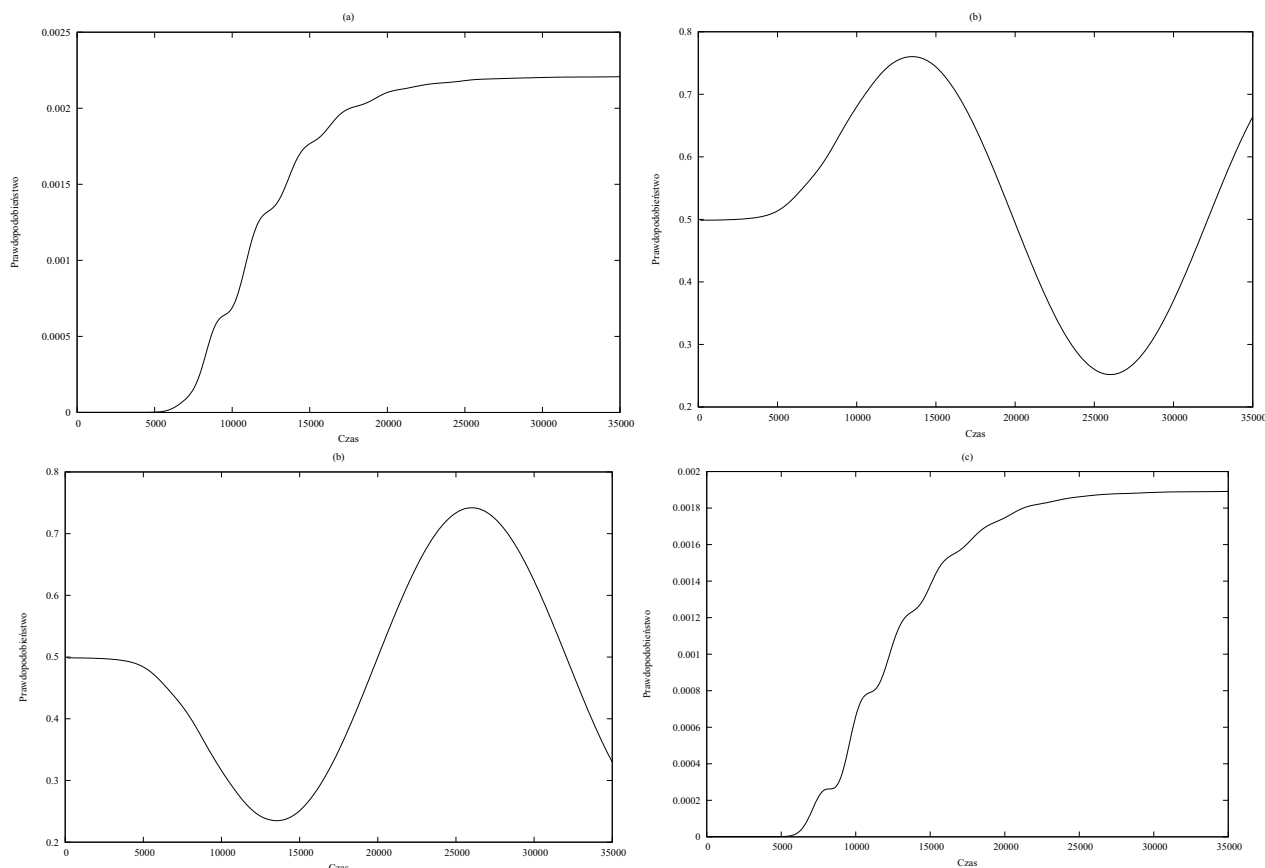


Rysunek 19: Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w górę dla podwójnej studni potencjału w obszarze przed (a) w pierwszej (b) w drugiej (c) i za (d) studnią w funkcji czasu.

Elektron o spinie w dół w chwili początkowej znajduje się w obu studniach z równym prawdopodobieństwem wynoszącym 0.5 (rysunek 20 (b) i (c)). W momencie kiedy elektron o spinie w górę zaczyna zbliżać się do studni, wypycha on elektron poza obszar studni (rysunek 20 (a) i (d)) oraz wypycha elektron z pierwszej studni do drugiej (rysunek 20 (b) i (c)). Kiedy nadlatujący elektron całkowicie opuści obszar studni elektron z powrotem dąży do stanu, w którym z równym prawdopodobieństwem znajduje się w obu studniach, czego niestety nie można pokazać ze względu na ograniczenia co do długości symulacji. Pęd przekazany przez elektron o spinie w górę powoduje, że elektron o spinie w dół odbija się wewnątrz studni od krawędzi.

### 5.2.3 Energia pojedynczych elektronów

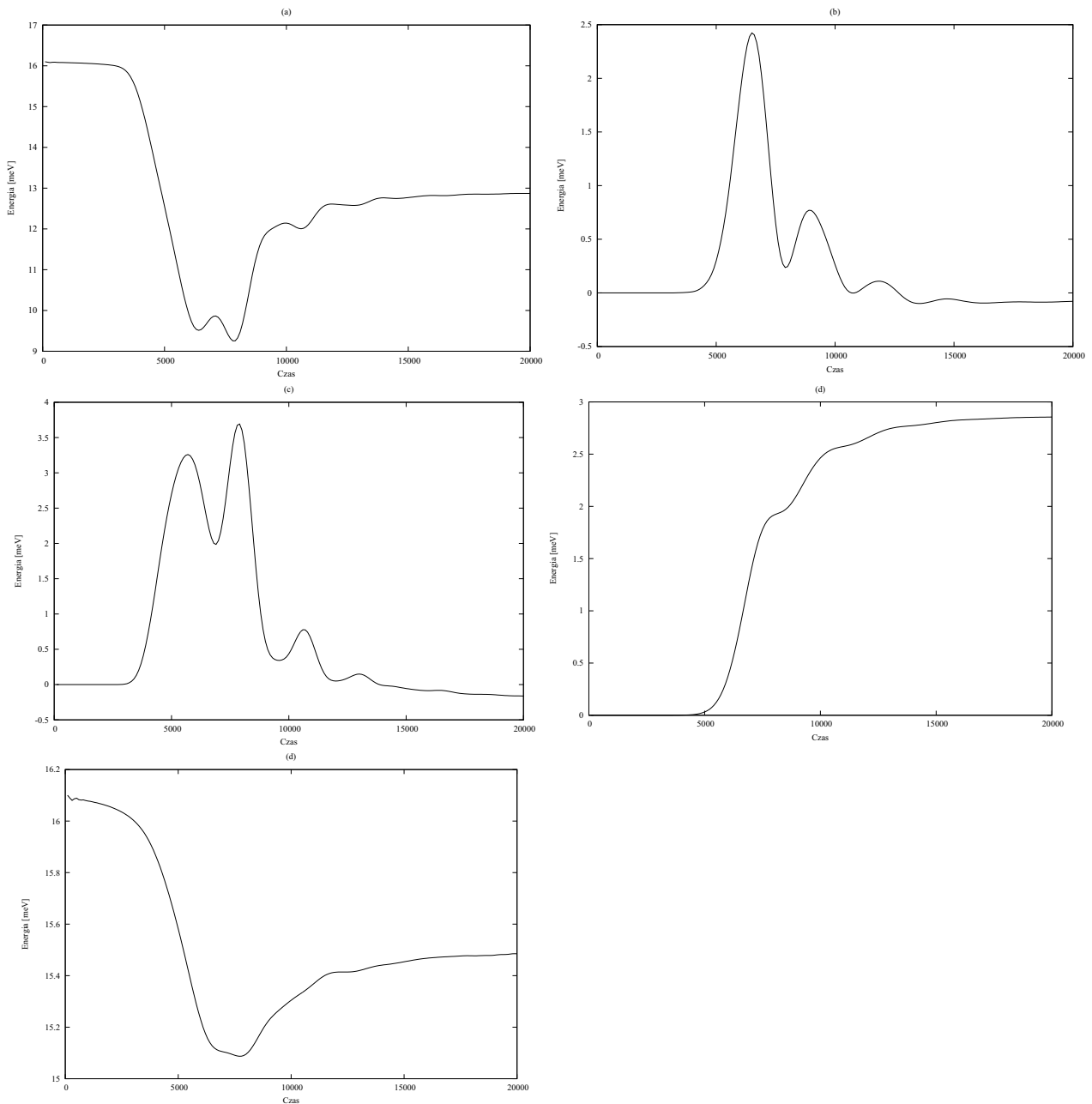
Energia elektronu dla struktury składającej się z podwójnej studni potencjału będzie rozpatrywana w czterech obszarach - przed studnią, w pierwszej i drugiej studni oraz za studnią



Rysunek 20: Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w dół dla podwójnej studni potencjału w obszarze przed (a) w pierwszej (b) w drugiej (c) i za (d) studnią w funkcji czasu.

(rysunek 21). W fazie początkowej rozkład energii wygląda podobnie jak dla struktury z jedną studnią, cała energia elektronu o spinie w górę znajduje się przed studnią. Kiedy elektron o spinie w górę znajdzie się w pierwszej studni oddaje część swojej energii elektronowi o spinie w dół w pierwszej studni wypychając go do drugiej studni. W tym samym czasie tuneluje przez cienką barierę potencjału ( $2nm$  przy szerokości jednej studni równej  $20nm$ ). Na tym etapie energia elektronu o spinie w górę w pierwszej studni pozostaje bez zmian. Rośnie za to jego energia w drugiej studni, gdzie z pewnym prawdopodobieństwem odbija się od krawędzi studni oraz bariery potencjału (rysunek 21 (b)). Energia w drugiej studni osiąga pierwsze maksimum i elektron odbity wraca do pierwszej studni. Teraz z kolei zaczyna odbijać od drugiej krawędzi studni, co powoduje, że energia w pierwszej studni zaczyna rosnąć osiągając swoje pierwsze maksimum (rysunek 21 (c)). Część elektronu wraca przed studnie a część się odbija i ponownie wraca do drugiej studni, gdzie energia osiąga kolejne maksimum. Drugie maksimum jest większe od pierwszego ponieważ nakłada się tutaj ta część która dopiero znalazła się w studni z tą, która uległa już kolejnemu odbiciu. Taki efekt powtarza się kilka razy co widać po falowaniu krzywej energii w pierwszej i drugiej studni.

Po pewnym czasie układ stabilizuje się i część elektronu pozostaje w obu studniach, część odbija się a część transmituje za studnie (rysunek 21 (d)). Całkowita energia elektronu (ry-

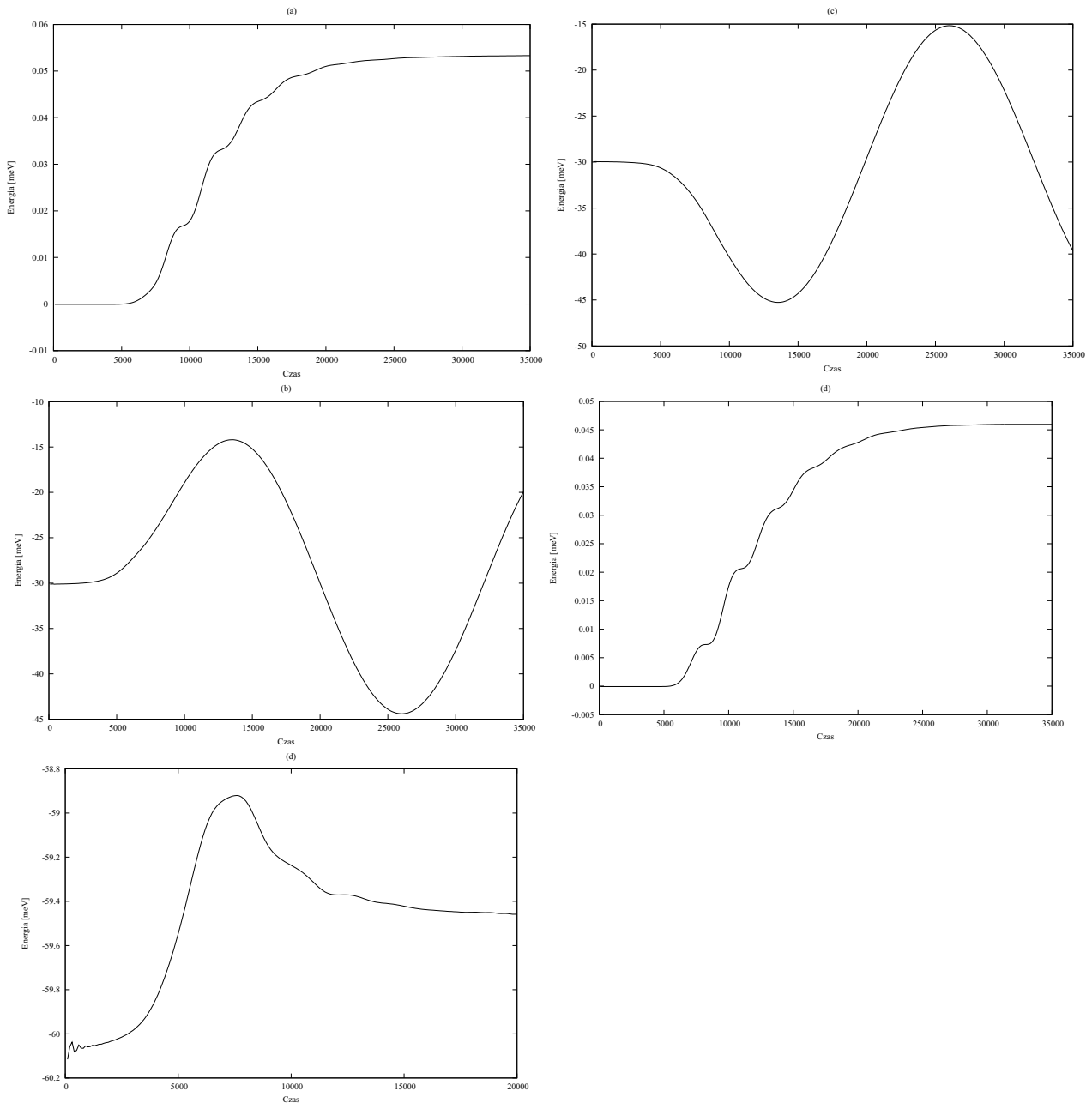


Rysunek 21: energia elektronu o spinie w górę dla podwójnej studni policzona w obszarach przed studnią (a) w pierwszej studni (b) w drugiej studni (c) za studnią (d) oraz suma energii ze wszystkich obszarów (e).

sunek 21 (d)) ulega zmianie ze względu na fakt, że elektron o spinie w górę pierwsze oddaje część swojej energii elektronowi o spinie w dół wprowadzając go w ruch oraz wypychając poza studnie po czym odbiera ją opuszczając studnię.

W chwili początkowej energia elektronu o spinie w dół poza studnią jest równa 0 a energia w obu studniach jest taka sama. W momencie kiedy elektron o spinie w górę dostaje się do studni wypycha elektron o spinie w dół z pierwszej studni do drugiej i energia elektronu w drugiej studni zaczyna rosnąć (rysunek 22 (b) i (c)). Kiedy elektron o spinie w górę opuści już

praktycznie studnie (osie czasowe na rysunkach 21 i 22 mają różną skalę), elektron o spinie w dół próbuje osiągnąć stan jaki był w chwili początkowej. Elektron o spinie w górę część swojej energii elektronowi o spinie w dół (rysunek 22 (e)) i powoduje, że energia elektronu poza obszarem studni jest niezerowa (rysunek 22 (a) i (d)).

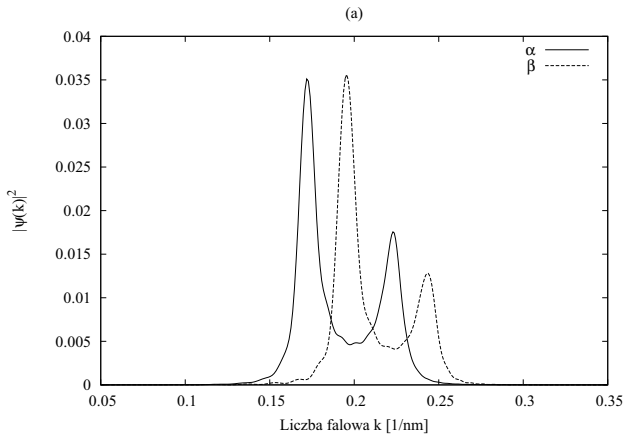


Rysunek 22: energia elektronu o spinie w dół dla podwójnej studni policzona w obszarach przed studnią (a) w pierwszej studni (b) w drugiej studni (c) za studnią (d) oraz suma energii ze wszystkich obszarów (e).



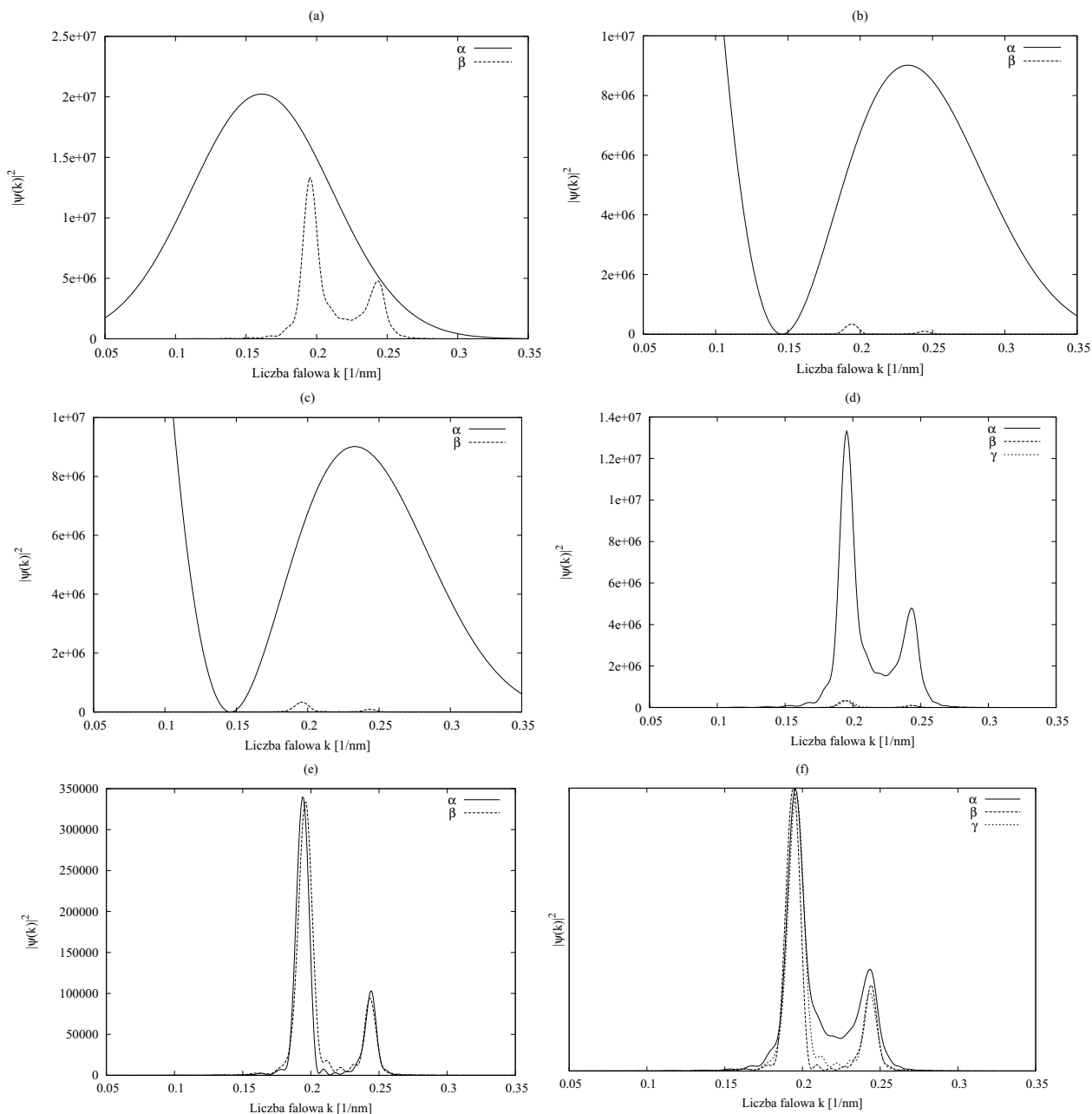
### 5.2.4 Widmo elektronu w funkcji wektora falowego $k$

Na rysunku 23 zostało porównane widmo elektronu o spinie do góry z wyłączonym oddziaływaniem (krzywa ( $\alpha$ )) oraz włączonym (krzywa ( $\beta$ )). Piki zostały przesunięte ku wyższym wartościom wektora falowego  $k$ . W przypadku podwójnej studni wartość maksymalna pierwszego piku pozostała na podobnym poziomie a drugiego piku została obniżona.

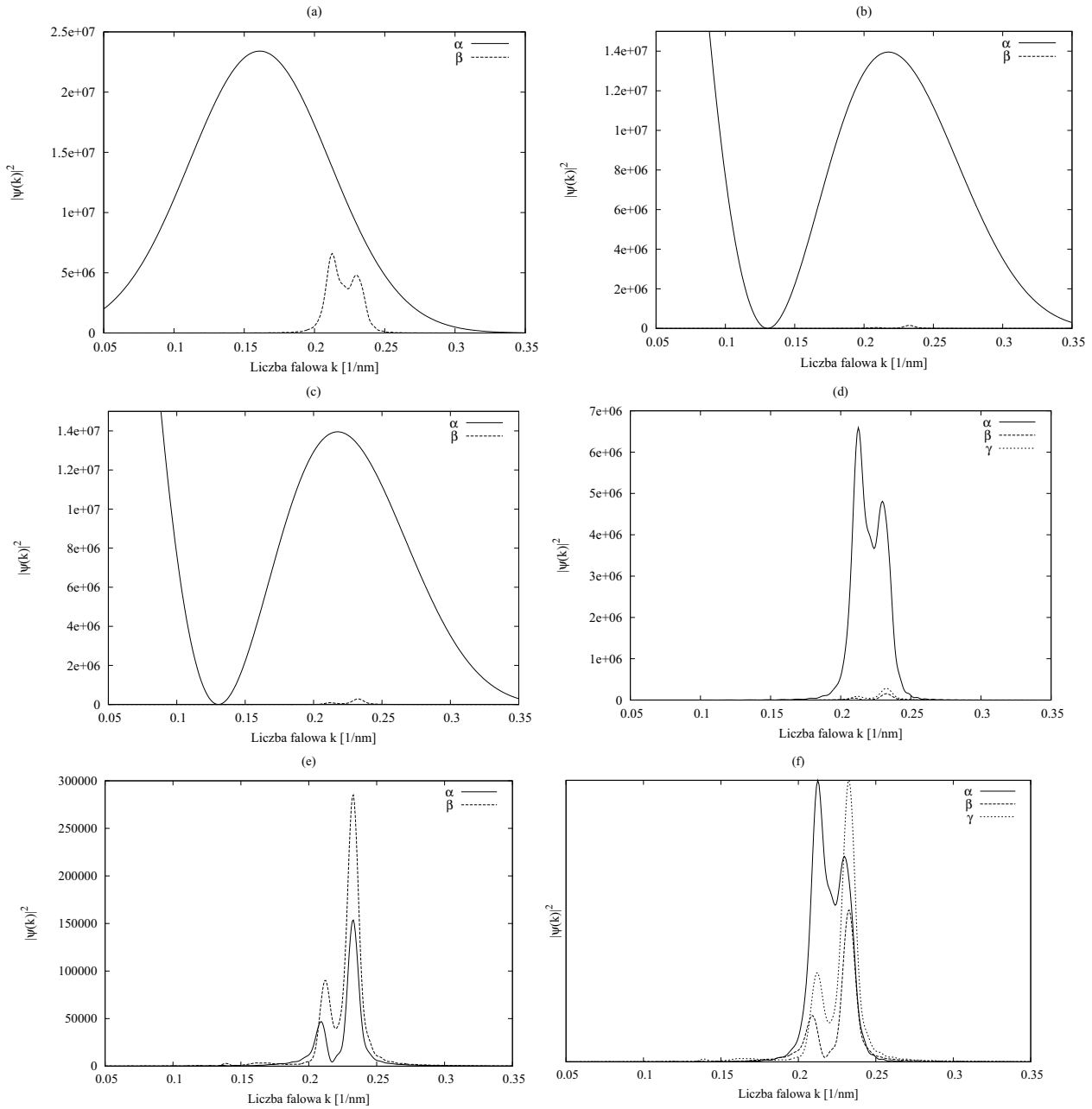


Rysunek 23: Unormowane widmo elektronu o spinie do góry w chwili końcowej z wyłączonym oddziaływaniem pomiędzy parą elektronów ( $\alpha$ ) oraz włączonym ( $\beta$ ) dla bariery między studniami równej  $2nm$ .

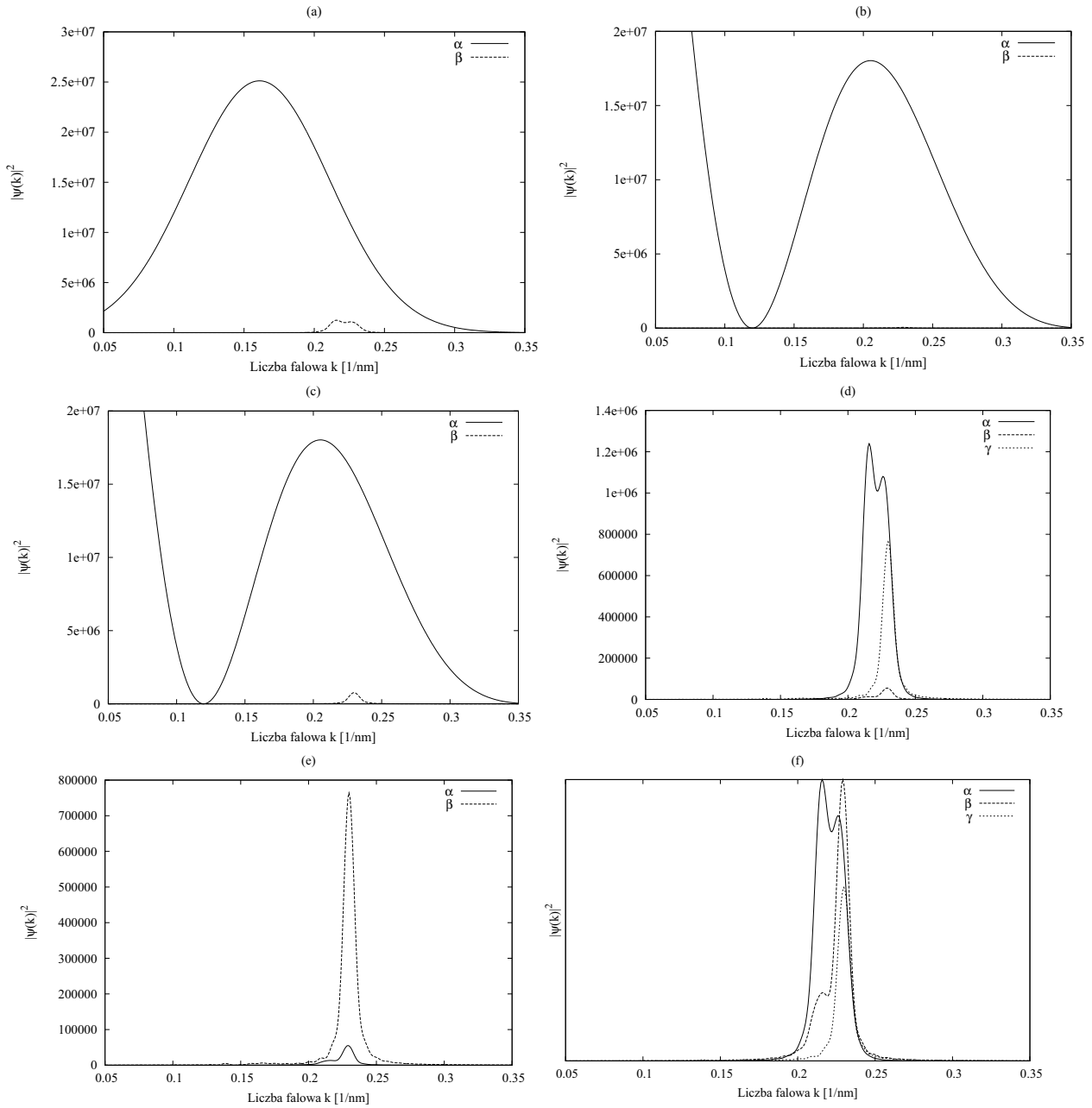
Na rysunkach 24, 25 oraz 26 zostały przedstawione wyniki dla podwójnej studni rozdzielonej barierą o szerokości równej odpowiednio  $2nm$ ,  $4nm$  oraz  $6nm$ . Tak jak w przypadku pojedynczej studni na wykresach przedstawione jest widmo w chwili początkowej ( $\alpha$ ) oraz końcowej ( $\beta$ ) dla elektronu o spinie do góry (a) oraz w dół przetransmitowanego (b) i odbitego (c). Na wykresach (d) zostały porównane widma początkowe dla obu elektronów. Piki występują dla tych samych wartości wektora  $k$  czyli jest to transmisja (odbicie) z wymianą spinu. W przypadku podwójnej studni piki widma elektronu o spinie w dół dla transmisji oraz odbicia nie są identyczne (e) i różnice pogłębiają się wraz ze wzrostem szerokości bariery między studniami. Dla większych szerokości bariery efekty związane z odbiciem elektronu zaczynają przeważać nad transmisją. Również różnice w kształcie widma stają się coraz bardziej widoczne wraz ze wzrostem szerokości bariery. Dla bariery  $6nm$  widmo elektronu o spinie w dół ma zupełnie inny charakter niż widmo elektronu o spinie do góry. Dla bariery  $2nm$  różnice te nie są tak wyraźne.



Rysunek 24: Widmo w chwili początkowej ( $\alpha$ ) oraz w chwili końcowej ( $\beta$ ) dla transmisji elektronu o spinie w górę (a), o spinie w dół (b) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół (c) w funkcji  $k$  dla bariery pomiędzy studniami  $2nm$ . Na rysunku (d) zostały porównane widma w chwili końcowej dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ). Na rysunku (e) zostały porównane tylko widma dla elektronu o spinie w dół przetransmitowanego ( $\alpha$ ) i odbitego ( $\beta$ ). Z kolei na rysunku (f) pokazany jest kształt widma (krzywe są w różnej skali) dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ).

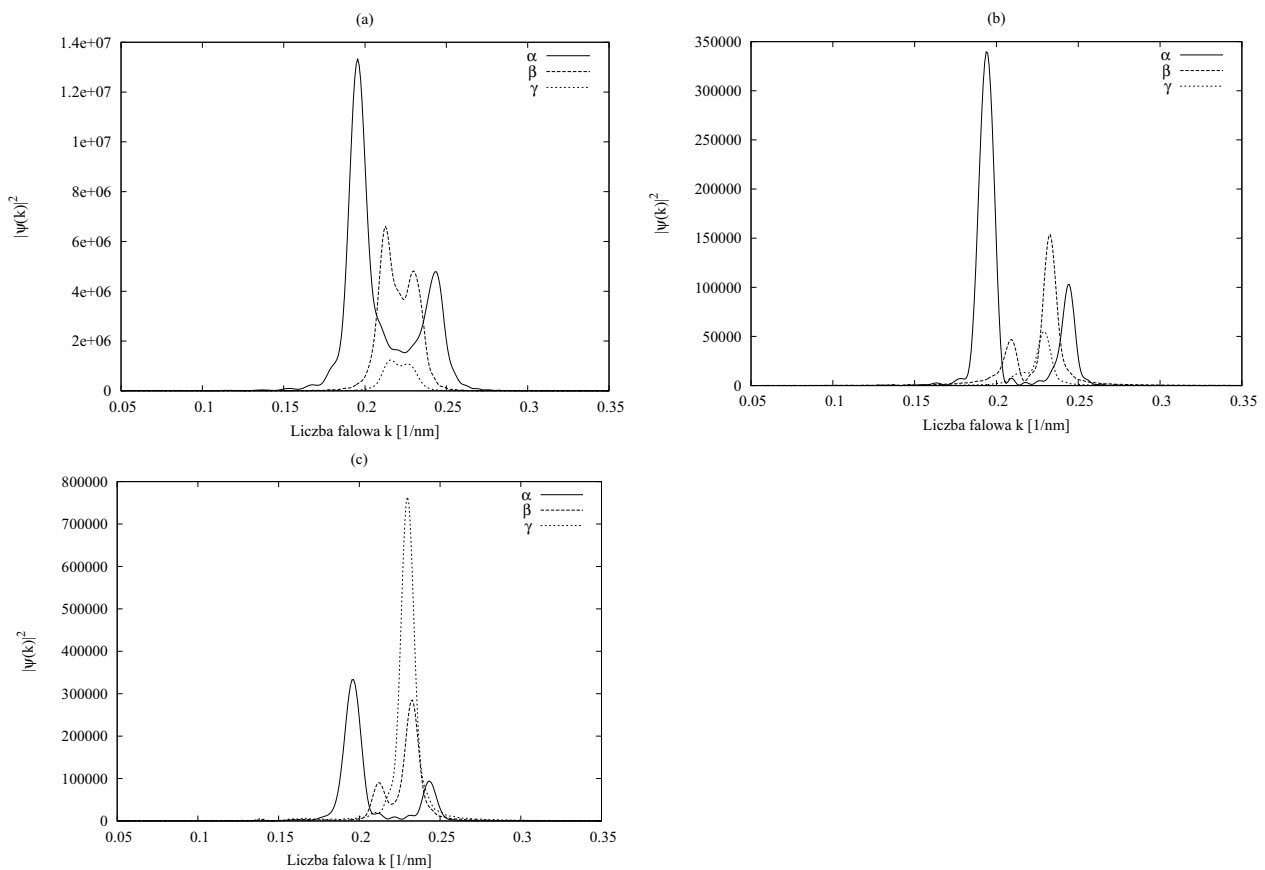


Rysunek 25: Widmo w chwili początkowej ( $\alpha$ ) oraz w chwili końcowej ( $\beta$ ) dla transmisji elektronu o spinie w górę (a), o spinie w dół (b) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół (c) w funkcji  $k$  dla bariery pomiędzy studniami  $4nm$ . Na rysunku (d) zostały porównane widma w chwili końcowej dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ). Na rysunku (e) zostały porównane tylko widma dla elektronu o spinie w dół przetransmitowanego ( $\alpha$ ) i odbitego ( $\beta$ ). Z kolei na rysunku (f) pokazany jest kształt widma (krzywe są w różnej skali) dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ).



Rysunek 26: Widmo w chwili początkowej ( $\alpha$ ) oraz w chwili końcowej ( $\beta$ ) dla transmisji elektronu o spinie w górę (a), o spinie w dół (b) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół (c) w funkcji  $k$  dla bariery pomiędzy studniami  $6nm$ . Na rysunku (d) zostały porównane widma w chwili końcowej dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ). Na rysunku (e) zostały porównane tylko widma dla elektronu o spinie w dół przetransmitowanego ( $\alpha$ ) i odbitego ( $\beta$ ). Z kolei na rysunku (f) pokazany jest kształt widma (krzywe są w różnej skali) dla transmisji elektronu o spinie w górę ( $\alpha$ ), o spinie w dół ( $\beta$ ) oraz dla elektronu odbitego o spinie w dół ( $\gamma$ ).

Na rysunku 27 zostały porównane widma dla elektronu o spinie w górę (a) oraz o spinie w dół przetransmitowanego (b) i odbitego (c) dla różnych szerokości bariery między studniami. Wraz ze wzrostem szerokości bariery piki dla elektronu o spinie do góry (a) zaczynają maleć i zbliżać się do siebie. Coraz szersza bariera powoduje, że elektron w coraz mniejszym stopniu transmituje przez układ. Dla bariery  $6nm$  oba piki praktycznie zlewają się w jeden nieduży pik. W przypadku widma transmisji elektronu o spinie w dół (b) widać, że pierwszy pik stopniowo zanika wraz ze wzrostem szerokości bariery. Drugi pik pierwszy rośnie (krzywa ( $\beta$ )) a następnie też zaczyna maleć. Podobnie jak dla elektronu o spinie do góry piki zbliżają się siebie wraz ze wzrostem szerokości bariery. Sytuacja wygląda zupełnie inaczej dla widma odbicia elektronu o spinie w dół. Pierwszy pik również zanika ale drugi zaczyna rosnąć wraz zmianą szerokości bariery. Efekty związane z odbiciem stają się coraz bardziej wyraźne dla coraz szerszej bariery.



Rysunek 27: Porównanie widma transmisji elektronu o spinie w górę (a) oraz transmisji elektronu o spinie w dół za studnię (b) oraz przed studnię (c) dla różnych szerokości bariery pomiędzy studniami w funkcji  $k$ . Szerokość bariery pomiędzy studniami była równa  $2nm$  ( $\alpha$ ),  $4nm$  ( $\beta$ ) oraz  $6nm$  ( $\gamma$ ).

## 6 Podsumowanie

W pracy zostały przedstawione wyniki obliczeń dla układu składającego się z pojedynczej oraz podwójnej studni potencjału. Celem pracy było zbadanie efektów oddziaływania w procesie tunelowania jednego z elektronów przez studnię zajętą przez drugi elektron ze szczególnym uwzględnieniem transportu z wymianą spinu.

Pierwszym etapem było wykonanie obliczeń z wyłączonym oddziaływaniem w celu uzyskania punktu odniesienia. W przypadku elektronu o spinie do góry wprowadzenie potencjału oddziaływania pomiędzy elektronami powodowało przesunięcie wartości maksymalnych widma ku wyższej wartości wektora  $k$  oraz ich obniżenie. Przesunięcie jest spowodowane przez potencjał oddziaływania. Zmniejszenie wysokości pików spowodowane jest z kolei transmisją oraz odbiciem z wymianą spinu.

Wraz ze zmianą szerokości bariery charakter widma elektronu o spinie do góry wyraźnie się zmienia. Rosnąca szerokość bariery powoduje redukcję transmisji oraz łączenie się ekstremów w jeden pik. Nasilają się z kolei efekty związane z odbiciem z wymianą spinu.

Oddziaływanie pomiędzy elektronem o spinie do góry i o spinie w dół powodują poza transmisją elektronu o niezerowym pędzie również transmisję i odbicie z wymianą spinu. W pracy zostało przedstawione widmo zarówno dla transmisji elektronu o spinie w dół jak i odbicia oraz ich porównanie. Dla układu z pojedynczą studnią oba widma były identyczne ale już dla bariery o szerokości  $2nm$  symetria została złamana i pogłębiała się wraz ze wzrostem szerokości bariery.

W przypadku widma transmisji elektronu o spinie w dół wraz ze wzrostem szerokości bariery wartości oba ekstrema zostały zmniejszone, szczególnie to dla mniejszych wartości wektora  $k$ . Dla widma odbicia z kolei ekstremum dla większych wartości wektora  $k$  zostało wyciągnięte w górę a drugie praktycznie zniknęło.

## Literatura

- [1] S. Bednarek *Mechanika kwantowa*
- [2] S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej and J. Adamowski *Effective interaction for charge carriers confined in quasi-one-dimensional nanostructures* Phys. Rev. B 68, 045328 (2003)
- [3] S. Moskal, S. Bednarek and J. Adamowski *Controlled exchange interaction for quantum logic operations with spin qubits in coupled quantum dots* Phys. Rev. A 76, 032302 (2007)
- [4] S. Moskal, S. Bednarek and J. Adamowski *Time-evolution simulation of a controlled-NOT gate with two coupled asymmetric quantum dots* Phys. Rev. A 71, 062327 (2005)
- [5] D. V. Melnikov, T. Fujisawa, D. G. Austing, S. Tarucha, J.-P. Leburton *Many-body excitations in tunneling current spectra of a few-electron quantum dot* arXiv:0707.4271v1 (2007)

## Spis rysunków

1	Kropki kwantowe. . . . .	10
2	Współczynnik transmisji w funkcji liczby falowej $k$ . . . . .	12
3	$T(k)$ dla jednego elektronu, pojedyncza studnia. . . . .	13
4	$T(k)$ dla jednego elektronu, podwójna studnia. . . . .	14
5	Gęstość prawdopodobieństwa elektronu uwięzionego. . . . .	15
6	Funkcja falowa stanów wzbudzonych. . . . .	16
7	Potencjał oddziaływania $V_{ee}$ . . . . .	17
8	Gęstość prawdopodobieństwa w płaszczyźnie $z_1 z_2$ dla pojedynczej studni . . . .	19
9	Gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie $z_1 z_2$ w kolejnych krokach czasowych	20
10	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w górę dla pojedynczej studni	21
11	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w dół dla pojedynczej studni	22
12	Energia elektronu o spinie w górę dla pojedynczej studni . . . . .	23
13	Energia elektronu o spinie w dół dla pojedynczej studni . . . . .	24
14	Całkowita energia układu elektronów dla pojedynczej studni . . . . .	25
15	Porównanie widma z oddziaływaniem i bez . . . . .	25
16	Widmo elektronów w funkcji $k$ dla pojedynczej studni . . . . .	26
17	Gęstość prawdopodobieństwa w płaszczyźnie $z_1 z_2$ dla podwójnej studni . . . . .	27
18	Gęstość prawdopodobieństwa na płaszczyźnie $z_1 z_2$ w kolejnych krokach czasowych	28
19	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w górę dla podwójnej studni	29
20	Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu o spinie w dół dla podwójnej studni .	30
21	Energia elektronu o spinie w górę dla podwójnej studni . . . . .	31
22	Energia elektronu o spinie w dół dla podwójnej studni . . . . .	32
23	Porównanie widma z oddziaływaniem i bez . . . . .	33
24	Widmo elektronów w funkcji $k$ dla bariery $2nm$ . . . . .	34
25	Widmo elektronów w funkcji $k$ dla bariery $4nm$ . . . . .	35
26	Widmo elektronów w funkcji $k$ dla bariery $6nm$ . . . . .	36
27	Porównanie widma dla różnych szerokości bariery . . . . .	37