

Stany rezonansowe cząstek w nanostrukturach

ćwiczenia

Przedstawiamy tu trzy zadania dotyczące stanów rezonansowych, przeznaczone do wykonania w czasie ćwiczeń w laboratorium komputerowym i pracy własnej. Są to zadania do wyboru przez prowadzącego dla danej grupy studentów lub w danym cyklu kształcenia. (Każdy student wykonuje tylko jedno z nich). Zadania polegają na przeprowadzeniu wstępnych przygotowań analitycznych (na papierze), przygotowaniu programu do obliczeń i graficznej prezentacji wyników. Student sam decyduje o wyborze używanego języka programowania i środowiska, w którym chce pracować.

Zadanie 1: Stany rezonansowe symetrycznego układu studni i dwóch barier

Układ składa się z trzech warstw półprzewodnikowych. Zachowanie elektronu w tym układzie modelowane jest jednowymiarowym potencjałem typu prostokątne bariery i studnia:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq -b \\ V_0, & -b < x \leq -a \\ 0, & |x| < a \\ V_0, & a \leq x \leq b \\ 0, & x \geq b. \end{cases}$$

gdzie $V_0 > 0$.

Hamiltonian jest następujący:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Należy rozwiązać równanie Schroedingera dla energii z zakresu od 0 do V_0 w sposób analogiczny do przedstawionego na wykładzie, w rozdziale „Stany rezonansowe układu studnia bariera”. Należy wykorzystać symetrię układu – ponieważ układ nie zmienia się przy inwersji $x \rightarrow -x$, gęstość prawdopodobieństwa powinna być funkcją parzystą, tzn. $|\psi(-x)|^2 = |\psi(x)|^2$. Same funkcje mogą być parzyste, $\psi(-x) = \psi(x)$, lub nieparzyste, $\psi(-x) = -\psi(x)$. Wykorzystanie symetrii polega na znajdowaniu oddzielnie parzystych i nieparzystych rozwiązań. Zakładamy zatem odpowiednie związki między współczynnikami występującymi w funkcji z lewej i prawej strony. Zmniejsza to liczbę niewiadomych i czyni problem nieco łatwiejszym.

Wyniki należy przedstawić w postaci graficznej ze szczególnym uwzględnieniem rezonansowego charakteru rozwiązań, podobnie jak w rozdziale „Stany rezonansowe układu studnia bariera”. Mile widziane własne pomysły dotyczące sposobu przedstawienia wyników.

Program ma zapewniać możliwość zmiany parametrów fizycznych układu dotyczących potencjału a, b, V_0 i masy efektywnej elektronu m .

Zadanie 2: Stany rezonansowe w symetrycznej strukturze warstwowej modelowanej potencjałem analitycznym

Struktura podobna jak w poprzednim zadaniu modelowana jest ciągłym potencjałem

$$V(x) = (ax^2 - b)e^{-qx^2},$$

gdzie a, b i q są nieujemnymi parametrami rzeczywistymi.

Przyjmujemy hamiltonian w postaci

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Zadanie polega na **zastosowaniu metody stabilizacji** do znalezienia stanów rezonansowych w zakresie energii od asymptoty potencjału (poziom energii równy 0; $\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = 0$) do maksymalnej wartości potencjału (wysokości bariery) i stanów związanych, w zakresie energetycznym pomiędzy minimum potencjału ($-b$) a zerem (poziomem asymptotycznym).

Należy wykorzystać symetrię układu ($V(-x) = V(x)$) poszukując oddzielnie rozwiązań parzystych i nieparzystych. Dla stanów parzystych stosujemy bazę funkcji parzystych

$$\varphi_i(x) = e^{-\beta_i x^2}, \quad i = 1, \dots, N,$$

a dla stanów nieparzystych – bazę funkcji nieparzystych

$$\varphi_i(x) = x e^{-\beta_i x^2}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Wartości parametrów β_i w obydwu przypadkach ustalamy tak, aby tworzyły ciąg geometryczny. Zadajemy tylko wartości β_1 i β_N .

Przed przystąpieniem do programowania należy wyprowadzić wzory na elementy macierzowe $H_{ij}(\alpha) = \langle \varphi_i^\alpha | \hat{H} | \varphi_j^\alpha \rangle$ i $S_{ij}(\alpha) = \langle \varphi_i^\alpha | \varphi_j^\alpha \rangle$.

Warto przy tym zwrócić uwagę na następujące zależności

$$S_{ij}(\alpha) = \langle \varphi_i^\alpha | \varphi_j^\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(\alpha x) \varphi_j(\alpha x) dx = \alpha^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx = 2\alpha^{-1} \int_0^{\infty} \varphi_i(x) \varphi_j(x) dx$$

$$\begin{aligned} T_{ij}(\alpha) &= \left\langle \varphi_i^\alpha \left| -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right| \varphi_j^\alpha \right\rangle = -\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(\alpha x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_j(\alpha x) dx = -\frac{\alpha}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_j(x) dx \\ &= \frac{\alpha}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \varphi_i(x) \right) \left(\frac{d}{dx} \varphi_j(x) \right) dx = \frac{\alpha}{m} \int_0^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \varphi_i(x) \right) \left(\frac{d}{dx} \varphi_j(x) \right) dx \end{aligned}$$

($T_{ij}(\alpha)$ są elementami kinetycznej części macierzy hamiltonianu)

$$S_{ij} = S_{ji}, \quad H_{ij} = H_{ji}.$$

Należy zależności te wykorzystać przy wyprowadzaniu wzorów a następnie przy konstruowaniu programu tak, aby uniknąć wielokrotnego obliczania tych samych elementów macierzowych. W szczególności elementy macierzy \mathbf{S} i \mathbf{T} mogą być obliczone raz a przy zmianie wartości α tylko mnożone przez odpowiednie czynniki.

Do rozwiązania równania

$$\mathbf{H}(\alpha)\mathbf{C}^{\text{opt}}(\alpha) = E(\alpha)\mathbf{S}(\alpha)\mathbf{C}^{\text{opt}}(\alpha),$$

należy użyć gotowej procedury, którą można znaleźć np. w bibliotece LAPACK.

Wśród danych wejściowych do programu mają znaleźć się dane charakteryzujące układ: parametry potencjału a, b, q i masa efektywna elektronu m oraz dane dotyczące metody, tzn. używanej bazy: liczba funkcji bazowych N i wykładniki β_1 i β_N .

Wyniki powinny być przedstawione graficznie w postaci grafu stabilizacyjnego (Rys. MB.11 w wykładzie) i histogramu przedstawiającego gęstość pierwiastków otrzymanych w pobliżu poziomu rezonansowego wraz z dopasowaną krzywą Lorentza (Rys. MB.12). Ostatecznym wynikiem mają być wartości położenia poziomu rezonansowego, E_r , i jego szerokości, Γ , uzyskane z dopasowania profilu Lorentza.

Zadanie 3: Stany rezonansowe w sferycznie symetrycznej kropce kwantowej

Rozważana tu sferycznie symetryczna kropka kwantowa jest kulką z jednego półprzewodnika otoczoną sferyczną warstwą drugiego i zatopiona w materiale tworzącym nieskończone otoczenie. Oddziaływanie tej struktury na znajdujący się w niej elektron modelujemy sferycznie symetrycznym potencjałem

$$V(r) = (ar - b)e^{-qr},$$

gdzie a, b i q są parametrami o rzeczywistych wartościach dodatnich.

Problem, choć w zasadzie trójwymiarowy sprowadza się do zagadnienia radialnego (zależnego tylko od współrzędnej r) z hamiltonianem

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2mr^2} + V(r),$$

gdzie $l(l+1)$ jest wartością momentu pędu cząstki; $l = 0, 1, 2 \dots$.

Zadanie polega na **zastosowaniu metody obrotu zespolonego współrzędnych** do znalezienia stanów rezonansowych elektronu w kropce w zakresie energii od asymptoty potencjału (poziom energii równy 0) do maksymalnej wartości potencjału (wysokości bariery).

Należy zastosować bazę N funkcji

$$\varphi_i(r) = r^n e^{-\beta_i r},$$

gdzie n jest takie samo dla wszystkich funkcji a parametry β_i tworzą ciąg geometryczny, zadany przez podanie skrajnych elementów: β_1 i β_N .

Przed przystąpieniem do pisania programu należy przygotować wzory na elementy macierzowe

$$H_{ij}(\theta) = \langle \varphi_i | \hat{H}(e^{i\theta}r) | \varphi_j \rangle = \int_0^{\infty} \varphi_i(r) \hat{H}(e^{i\theta}r) \varphi_j(r) dr$$

oraz

$$S_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \int_0^{\infty} \varphi_i(r) \varphi_j(r) dr.$$

Zwróćmy uwagę na to, że elementy S_{ij} nie zależą od kąta obrotu θ . Podobnie zależność od θ części kinetycznej macierzy hamiltonianu da się wyłączyć w postaci stałego czynnika

$$\begin{aligned} T_{ij}(\theta) &= \left\langle \varphi_i \left| -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{d(e^{i\theta}r)^2} \right| \varphi_j \right\rangle = -\frac{e^{-2i\theta}}{2m} \int_0^{\infty} \varphi_i(r) \frac{d^2}{dr^2} \varphi_j(r) dr = \\ &= \frac{e^{-2i\theta}}{2m} \int_0^{\infty} \left(\frac{d}{dr} \varphi_i(r) \right) \left(\frac{d}{dr} \varphi_j(r) \right) dr = e^{-2i\theta} T_{ij}(\theta = 0). \end{aligned}$$

Obliczanie elementów S_{ij} i $T_{ij}(\theta = 0)$ będzie można w programie wyłączyć poza pętlę, w której zmieniamy θ . Nie da się tego zrobić dla części potencjalnej macierzy hamiltonianu

$$V_{ij}(\theta) = \langle \varphi_i | V(e^{i\theta}r) | \varphi_j \rangle = \int_0^{\infty} \varphi_i(r) V(e^{i\theta}r) \varphi_j(r) dr.$$

Uwaga: wszystkie występujące tu całki sprowadzają się do całek typu

$$\int_0^{\infty} r^m e^{-\gamma r} dr = \frac{m!}{\gamma^{m+1}}.$$

Do rozwiązania uogólnionego problemu własnego

$$\mathbf{H}(\theta) \mathbf{C}^{\text{opt}}(\theta) = E(\theta) \mathbf{S} \mathbf{C}^{\text{opt}}(\theta)$$

należy użyć odpowiedniej procedury z biblioteki LAPACK.

Dane wejściowe do programu muszą zawierać parametry potencjału a, b, q , masę efektywną elektronu m i liczbę l określającą wartość momentu pędu elektronu oraz dane dotyczące bazy funkcyjnej: liczbę funkcji N i ich parametry n, β_1 i β_N . Wyniki powinny być przedstawione w postaci graficznej, tj. w postaci θ -trajektorii (patrz Rys. MB.14). Ostatecznym wynikiem jest optymalna wartość zespolonej energii rezonansu.