

Sprawozdanie projektowe

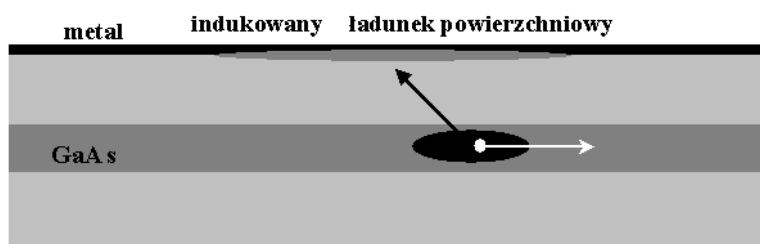
Rozpraszanie energii induktonu na skutek retardacji (opóźnienia) formowania się ładunku indukowanego

Amadeusz Filipek

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH

Celem projektu jest zasymulowanie funkcji falowej induktonu poruszającego się w nanodrucie i oddziaływującego z przyłożoną metalową elektrodą. Następnie pokazanie, że opóźnienie w formowaniu się ładunku indukowanego w metalowej elektrodzie powoduje rozpraszanie induktonu.

Rozpatrujemy funkcję falową elektronu w nanodrucie półprzewodnikowym z przyłożoną od zewnątrz metalową elektrodą. Ze względu na wymiary nanodrutu, który można rozpatrywać jako obiekt kwazi-jednowymiarowy rozważania przeprowadzamy w jednym wymiarze. Rozpatrywany układ wygląda następująco :



Rysunek 1. Schemat symulowanego układu

Na powierzchni elektrody metalowej pod wpływem przepływającego elektronu powstaje ładunek indukowany. Ładunek ten oddziałuje z elektronem, wpływając na jego funkcję falową i efektywnie tworząc indukton. Rozkład ładunku indukowanego wyznaczany jest na podstawie równania Poissona, jednakże problem można uprościć jeśli założymy, że metalowa elektroda jest nieskończoną płaszczyzną. Wtedy rozkład ładunku indukowanego możemy wyznaczyć za pomocą metody obrazów. Na jej podstawie uzyskujemy potencjał od ładunku indukowanego postaci :

$$U_{ind}(x) = -\frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{|\psi(x')|^2}{\sqrt{(x-x')^2 + 4d^2}}$$

gdzie $\psi(x)$ stanowi funkcję falową elektronu, ε stanowi stałą dielektryczną materiału oraz d stanowi odległość środka nanodrutu od powierzchni metalowej elektrody. Dodatkowo wprowadzamy potencjał zewnętrzny $V(x)$ w postaci odwróconego Gaussiana, który stanowić będzie obszar w obrębie którego indukton się porusza.

$$V(x) = -V_0 \exp \left[-\left(\frac{x-x_0}{a} \right)^2 \right]$$

Obliczenia przeprowadzamy w jednostkach atomowych gdzie $\hbar = e = m_e = 1$. Wtedy jednostką energii jest energia Hartree a jednostką długości promień atomu Bohra. Przy tak przyjętych jednostkach Hamiltonian naszego układu przyjmuje postać :

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + U_{ind}(x)$$

Dla rozważanego układu możemy zdefiniować dwie energie. Pierwsza w postaci $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ dla induktonu z opóźnionym potencjałem indukowanym nie jest zachowana. Druga energia zdefiniowana w postaci :

$$E_{tot} = E - 1/2 \langle \psi | U_{ind}(x) | \psi \rangle$$

stanowi energię całkowitą i jest zachowana dla naszego układu.

Obliczenia numeryczne przeprowadziłem w pudle obliczeniowym o wymiarach $x \in [-500, 500] \text{ nm}$. Zdefiniowałem siatkę 201 punktów węzłowych oddległych o $\Delta x = 5 \text{ nm}$. Wartość kroku czasowego przyjąłem równą $\Delta t = 1 \text{ fs}$. Rozpatrywany przeze mnie ośrodek to GaAs zatem $\epsilon = 13.5$ oraz $m = 0.067$. Odległość środka nanodrutu od elektrody przyjąłem równą $d = 10 \text{ nm}$. Parametry potencjału zewnętrznego przyjąłem równe $V_0 = 0.00005 \text{ j. at.}$, $x_0 = 0 \text{ nm}$ oraz $a = 150 \text{ nm}$.

Pierwszy krok symulacji stanowiło wyznaczenie funkcji falowej stanu podstawowego induktonu. W tym celu wykorzystałem metodę ewolucji w czasie urojonym. Podczas wyznaczania stanu podstawowego nie brałem pod uwagę potencjału zewnętrznego. Startową funkcję falową przyjąłem w postaci Gaussiana o środku w punkcie 300 nm oraz rozmyciu $\sigma = 50 \text{ nm}$. Uzyskany w ten sposób stan podstawowy ma postać przybliżoną do funkcji Gaussa.

Tak uzyskaną funkcję falową przemnożyłem przez funkcję $\exp[i k x]$ tak aby funkcja mogła ruszyć podczas symulacji w czasie. Parametr k stanowi pęd cząstki i za jego pomocą definiuję energię cząstki. Wartość parametru k przyjąłem równą -0.001 . Równanie Schroedingera zależne od czasu rozwiązałem korzystając z aproksymacji różnicowej drugich pochodnych :

$$\psi_i^{l+1} = \psi_i^{l-1} - 2idt \left(-\frac{1}{2} \frac{\psi_{i+1}^l - 2\psi_i^l + \psi_{i-1}^l}{dx^2} + (V(x_i) + U_{ind}(x_i)) \psi_i^l \right)$$

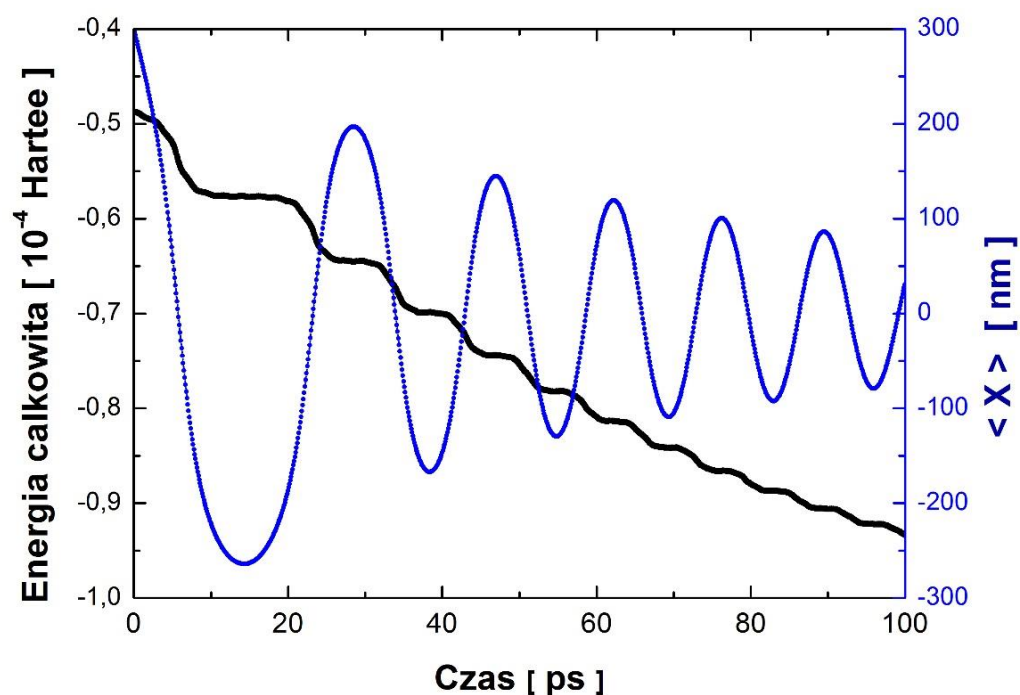
gdzie indeks i numeruje kolejne węzły siatki przestrzennej natomiast indeks l numeruje kolejne kroki czasowe. Powyższe równanie nie pozwala wystartować ponieważ wymaga dwóch poprzednich kroków czasowych. Pierwszy krok czasowy wyznaczyłem z następującego równania :

$$\psi_i^1 = \psi_i^0 - idt \left(-\frac{1}{2} \frac{\psi_{i+1}^0 - 2\psi_i^0 + \psi_{i-1}^0}{dx^2} + (V(x_i) + U_{ind}(x_i)) \psi_i^0 \right)$$

W trakcie symulacji wartość oczekiwaną położenia induktonu liczyłem na podstawie wzoru :

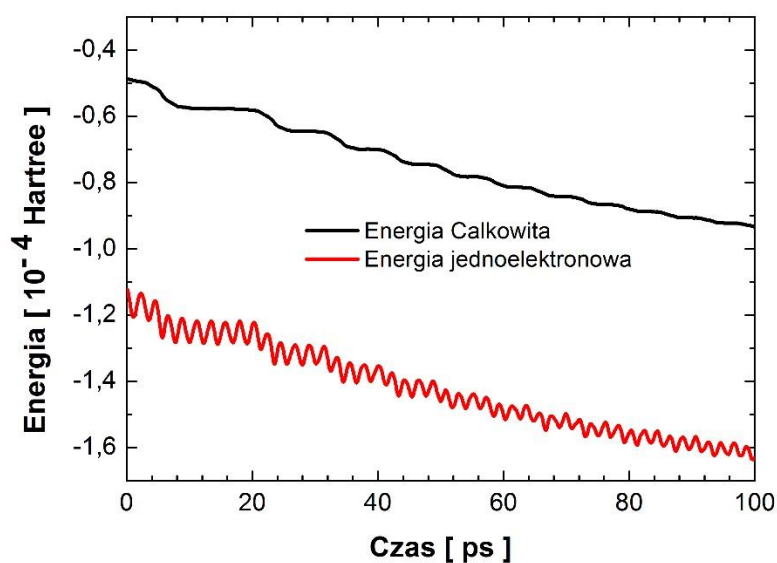
$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle$$

Wprowadziłem opóźnienie potencjału indukowanego licząc go co dziesiąty krok czasowy. Uzyskaną przeze mnie symulację położenia oraz energii całkowitej induktonu przedstawia wykres :



Wykres 1. Wartość oczekiwana położenia oraz energia całkowita induktonu w funkcji czasu

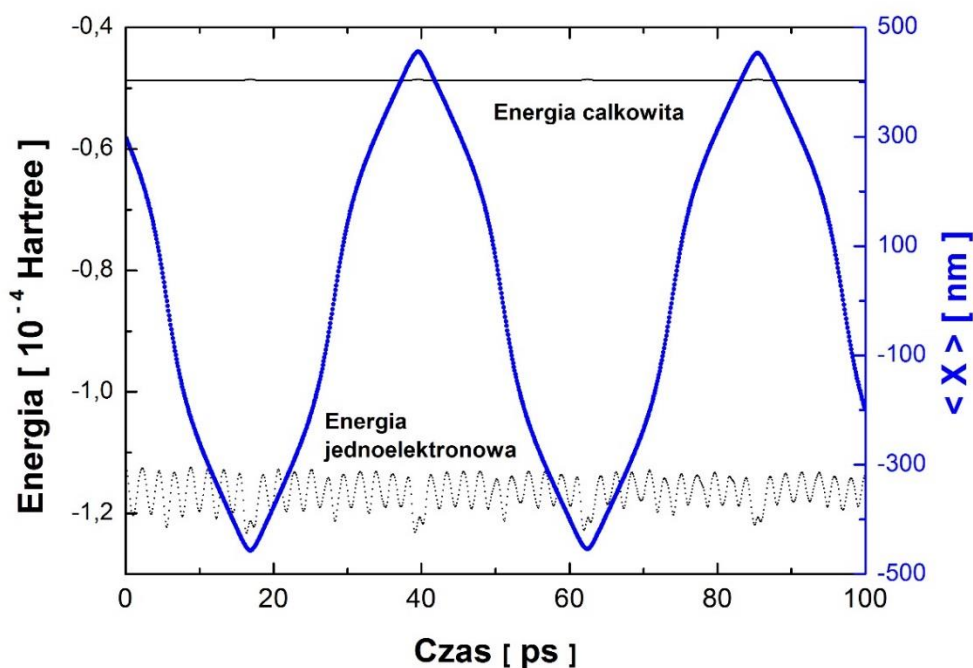
Na podstawie powyższego wykresu można przeanalizować ruch induktonu. Indukton oscyluje wokół położenia równowagi potencjału zewnętrznego jednakże jego amplituda jest coraz mniejsza. Ruch oscylacyjny induktonu jest tłumiony, co oznacza, że jego energia maleje na rzecz energii gazu elektronowego ładunku indukowanego w elektrodzie. Energia całkowita induktonu maleje. Na kolejnym wykresie zestawilem energię całkowitą oraz energię jednoelektronową :



Wykres 2. Energia całkowita oraz energia jednoelektronowa w funkcji czasu

Obydwie energie maleją w sposób relaksacyjny dążąc do określonej wartości. Energia jednoelektronowa jest przesunięta w stosunku do energii całkowitej oraz zawiera widoczne oscylacje. Indukton oddając energię dąży do swojego stanu podstawowego.

Następnie korzystając z tych samych parametrów usunąłem opóźnienie potencjału indukowanego licząc go w każdym kroku czasowym. Uzyskaną symulację położenia oraz obydwu energii przedstawia wykres :



Wykres 3. Wartość oczekiwana położenia oraz energie całkowita i jednoelektronowa w funkcji czasu

Widzimy, że tor ruchu induktonu znacznie różni się od przedstawionego na wykresie 1. Indukton oscyluje wokół położenia równowagi ale jego amplituda się nie zmienia. Ma energię wystarczającą aby pokonać potencjał zewnętrzny $V(x)$ i odbija się od ścianek pudła obliczeniowego (na brzegach zadane są warunki nieskończonej studni potencjału). Zarówno w położeniu jak i energii całkowitej widać brak zmian energii induktonu w czasie. Jedyną zmianą w porównaniu do poprzedniej symulacji było usunięcie opóźnienia potencjału indukowanego. Opóźnienie potencjału indukowanego jest zatem bezpośrednią przyczyną utraty energii induktonu na rzecz gazu elektronowego elektrody.

Podsumowując wykonałem symulację czasową funkcji falowej elektronu, który nazwany został induktonem ze względu na oddziaływanie z chmurą elektronową przyłożonej elektrody. Potencjał wyindukowany w elektrodzie oddziałuje z elektronem efektywnie nadając mu nowe właściwości. Wykonana przeze mnie symulacja pokazała że opóźnienie w indukowaniu się potencjału elektrody powoduje utratę energii induktonu na rzecz gazu elektronowego elektrody.