

# Projekt MOFiT2.

Paweł Rzońca

## Wstęp

Jest to projekt o temacie numer 12.

Zadanie polega na rozwiązaniu problemu wieloelektronowego w sferycznie symetrycznej kropce kwantowej metodą funkcjonału gęstości. Rozwiązywano problem **dwuwymiarowy**. W dalszej części wszystkie wartości i równania są podawane z jednostkami atomowymi  $\hbar = m = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ , chyba, że zaznaczono inaczej. Będziemy używać algorytmu przedstawionego w ([3]).

## Przygotowanie programu

Pierwszym etapem było rozwiązanie równania Schrödingera dla skończonej studni potencjału metodą gaussianów.

Przyjęto studnię potencjału sferycznie symetryczną

$$U(r) = \begin{cases} -V_0 & r < R \\ 0 & r \geq R \end{cases} \quad (1)$$

oraz pudło obliczeniowe  $[0, L]$ , gdzie  $L = 10$  nm.

Wykorzystano bazę  $7 \times 7 = 49$  elementową składającą się z siatki gaussianów umieszczonych w równych odstępach na całym pudle obliczeniowym. Bazę rozmieszczono tak, aby przy brzegach pudła obliczeniowego gaussiany znikwały, a odległości między sąsiednimi gaussianami dobrano tak, aby nieco się przekrywały. Program przystosowano do wyboru dowolnej (rozsądnej) bazy. Zwiększenie bazy, np. do  $15 \times 15$  elementowej skutkuje znakomitą zwiększeniem dokładności wyniku, aczkolwiek wydłuża czas obliczeń w sposób radykalny.

Testem dla tej części programu, było rozwiązanie równania w przypadku braku potencjału. Wtedy problem redukuje się do nieskończonej studni potencjału o szerokości pudła obliczeniowego. Analityczne rozwiązanie dane jest wzorem

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\pi^2}{2L^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad (2)$$

Z uwagi na to, iż gaussiany umieszczono w pewnej odległości od brzegów pudła ( $\approx 3\sigma$ ) stąd wartości energii mogą nie odpowiadać wartościom liczoną według wzoru (2) (baza może "czuć" odrobinę mniejsze pudło niż jest w rzeczywistości). Nie jest to problematyczne gdyż jest to wyłącznie test działania programu i wystarczy, aby stosunek kolejnych energii zgadzał się z analitycznym, wyniki przedstawiono w tabeli 1

W następnym kroku, w celu obliczenia potencjału Hartree, zaimplementowano obliczanie koncentracji jako sumy kwadratów kolejnych funkcji falowych (uwzględniając degenerację ze względu na spin), a następnie rozwiązywanie równania poissona

$$\nabla^2 V = -n_e(x, y). \quad (3)$$

Równanie to rozwiązywano metodą relaksacji Gaussa-Seidla (GS) z zerowym warunkiem początkowym. Uzyskany potencjał dodano do potencjału potencjału kropki według wzoru (4) i procedurę powtarzano

Tabela 1: Tabela zawierająca stosunki kolejnych energii dla nieskończonej studni potencjału

	analityczny	numeryczny
$E_{11}/E_{12}$	2.5	2.5109
$E_{12}/E_{21}$	1	1.0000
$E_{21}/E_{22}$	1.6	1.6026
$E_{22}/E_{31}$	1.25	1.2627
$E_{31}/E_{31}$	1	1.0000

Tabela 2: Tabela zawierająca stosunki kolejnych energii dla nieskończonej studni potencjału

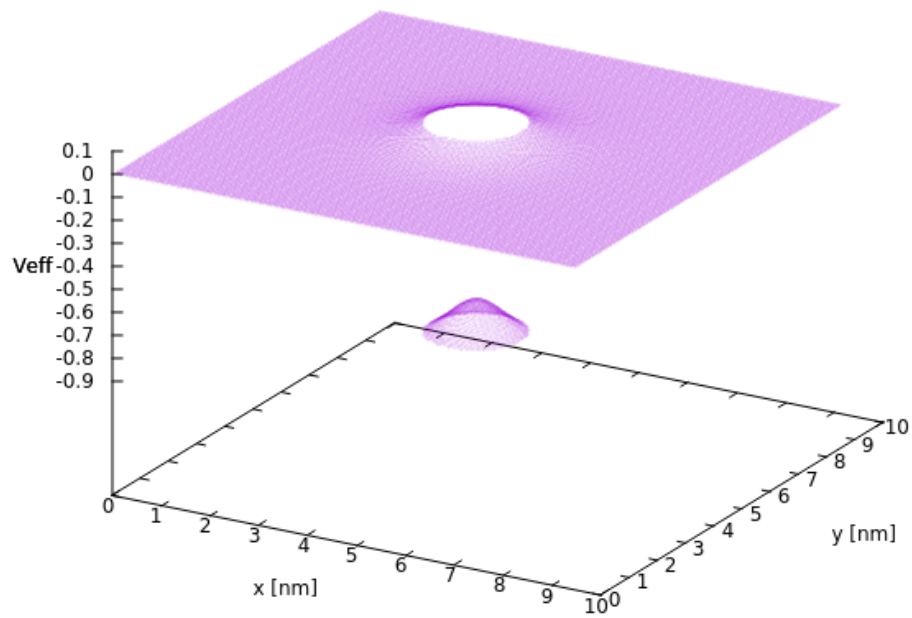
stan ilość elektronów	1	2	3	4	5
$E_1$	-0.734784	-0.578514	-0.487107	-0.397228	-0.309370
$E_2$		-0.399554	-0.323903	-0.250565	-0.178470
$E_3$			-0.324304	-0.249774	-0.178083
$E_4$				-0.139564	-0.075859
$E_5$					-0.048473

do samouzgodnienia. Przyjęto w obliczeniach  $\alpha = 0.02$ . Warunek zakończenia pętli ustalono na 0.01 eV. Warunek zakończenia pętli ustalono na 0.01 eV. Nie uwzględniono energii wymiennie-korelacyjnej, co jest możliwą drogą kontynuacji projektu.

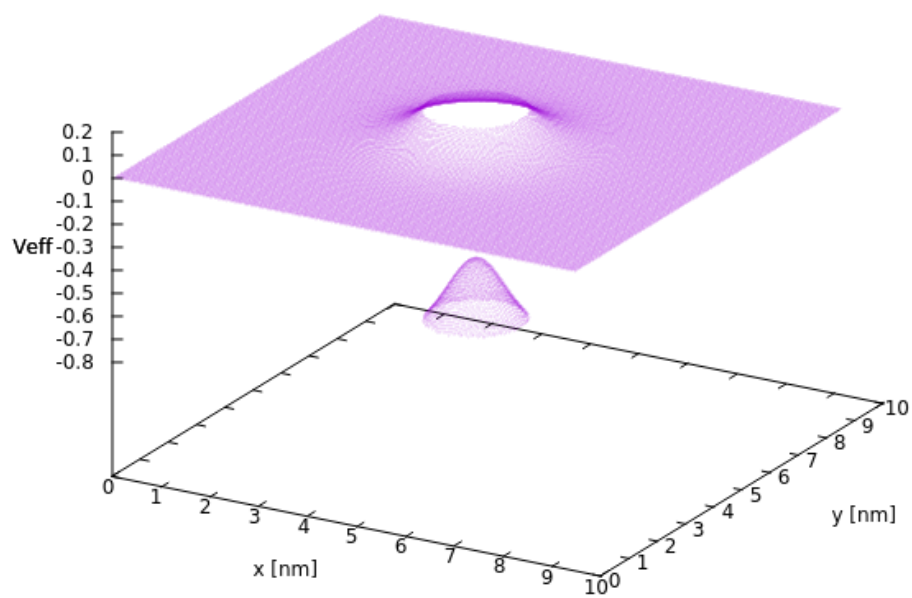
$$U_{new} = U_{dot} + (1 - \alpha)V_{old} + \alpha V_{new}. \quad (4)$$

## Wyniki

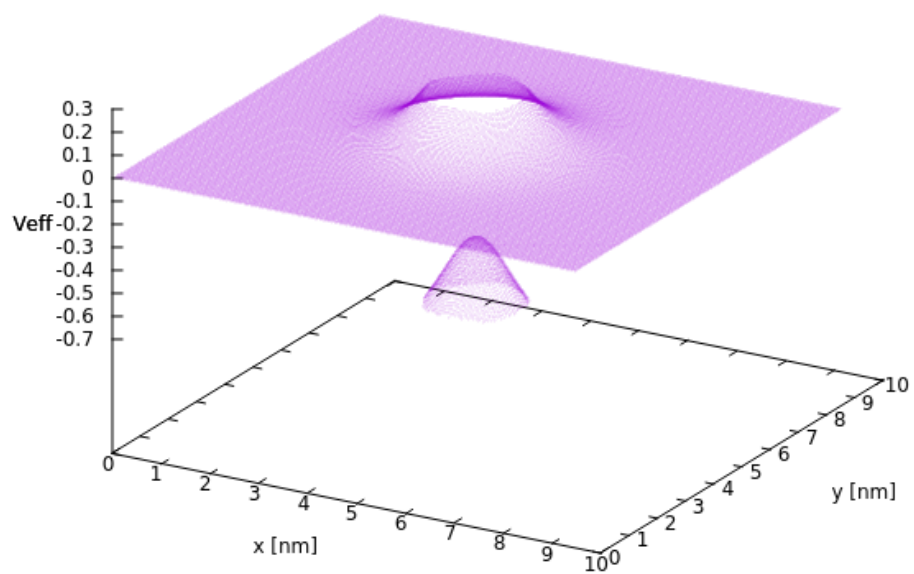
Przyjęto następujące warunki dla potencjału: promień studni  $R = 1$  nm, głębokość studni  $V_0 = 25$  eV. Obliczenia przeprowadzono dla  $N = 1, 2, \dots, 5$  elektronów. Na wykresach 1–5 przedstawiono uzyskane po samouzgodnieniu potencjały, natomiast na wykresach 6–10 koncentracje. Natomiast w tabeli 2 uzyskane energie uwzględnionych w obliczeniach stanów. Wszędzie gdzie nie zaznaczono jednostek użyto jednostek atomowych.



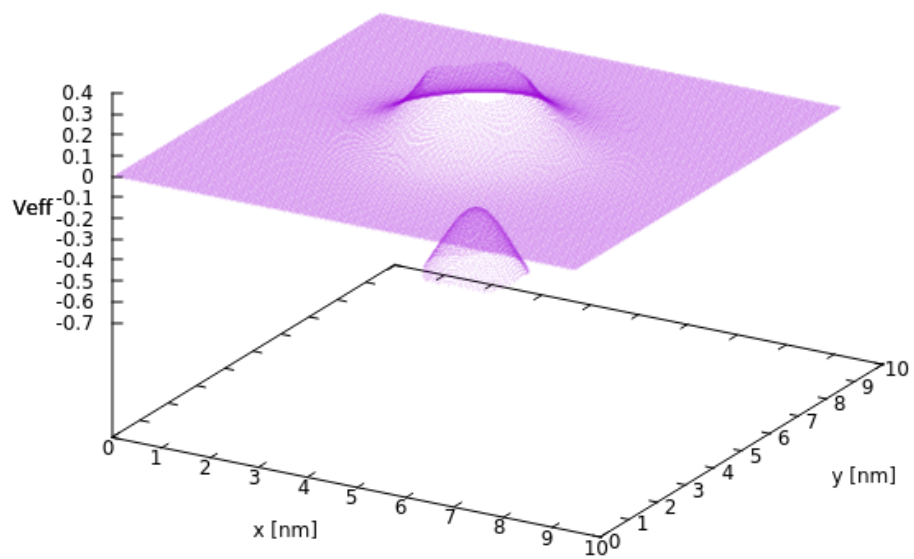
Rysunek 1: Profil potencjału efektywnego po samouzgodnieniu równania dla jednego elektronu.



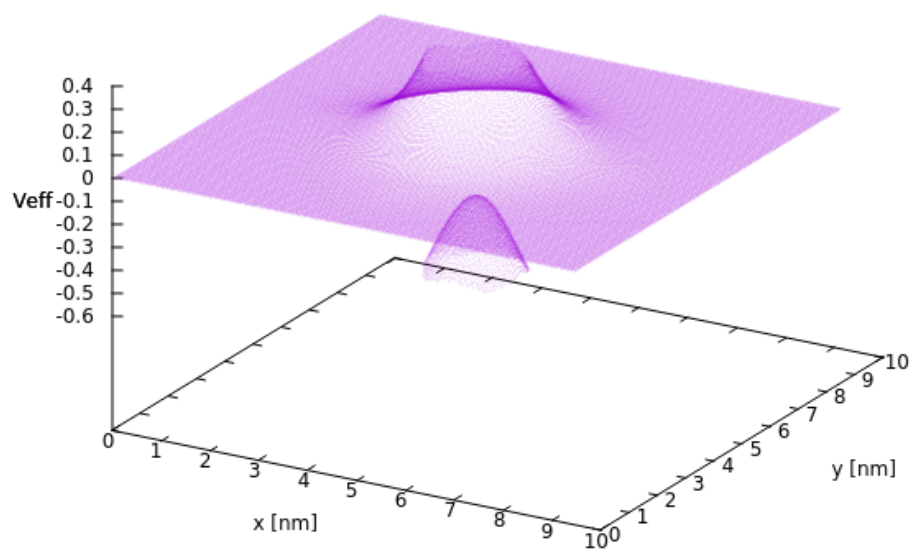
Rysunek 2: Profil potencjału efektywnego po samouzgodnieniu równania dla dwóch elektronu.



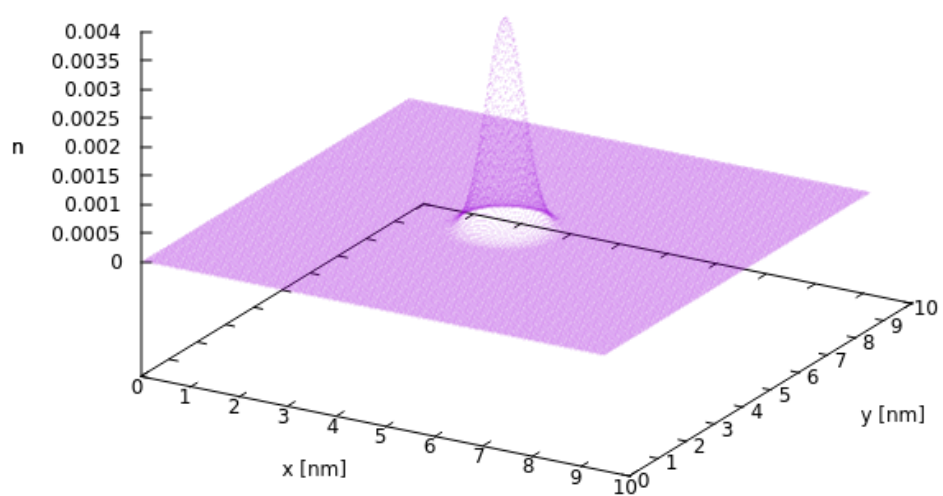
Rysunek 3: Profil potencjału efektywnego po samouzgodnieniu równania dla trzech elektronu.



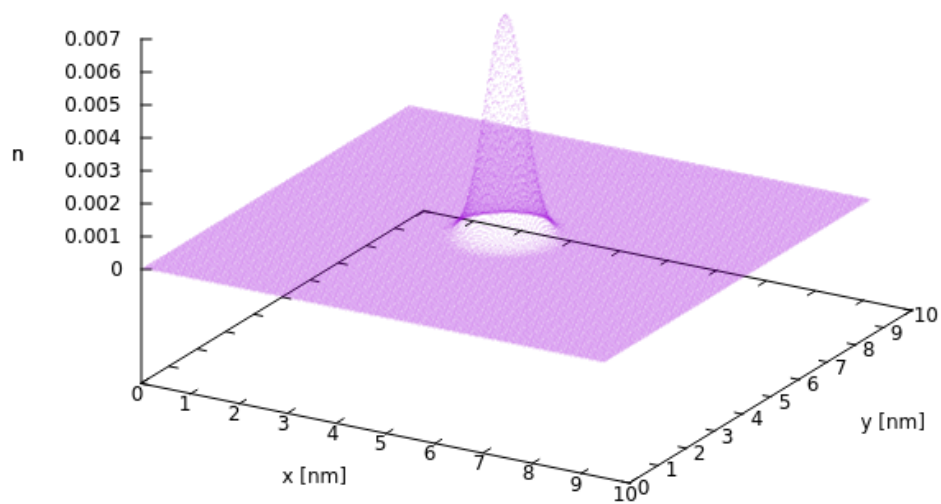
Rysunek 4: Profil potencjału efektywnego po samouzgodnieniu równania dla czterech elektronu.



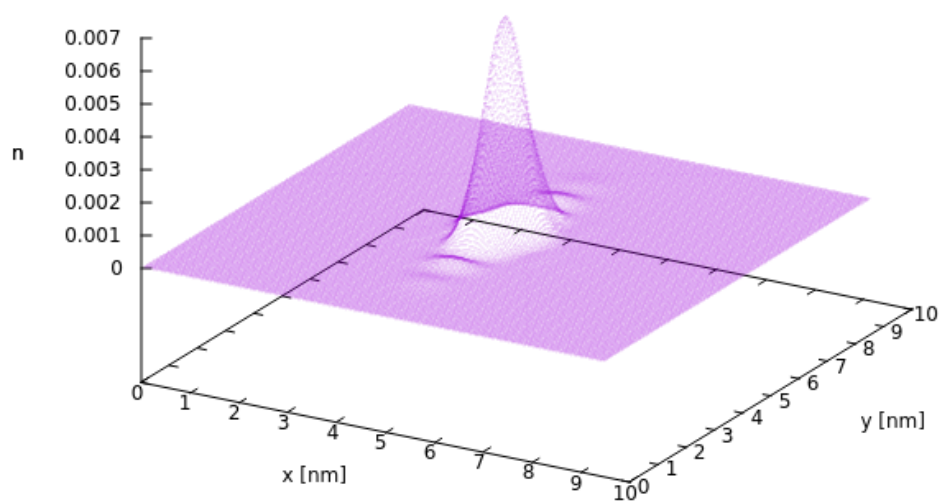
Rysunek 5: Profil potencjału efektywnego po samouzgodnieniu równania dla pięciu elektronu.



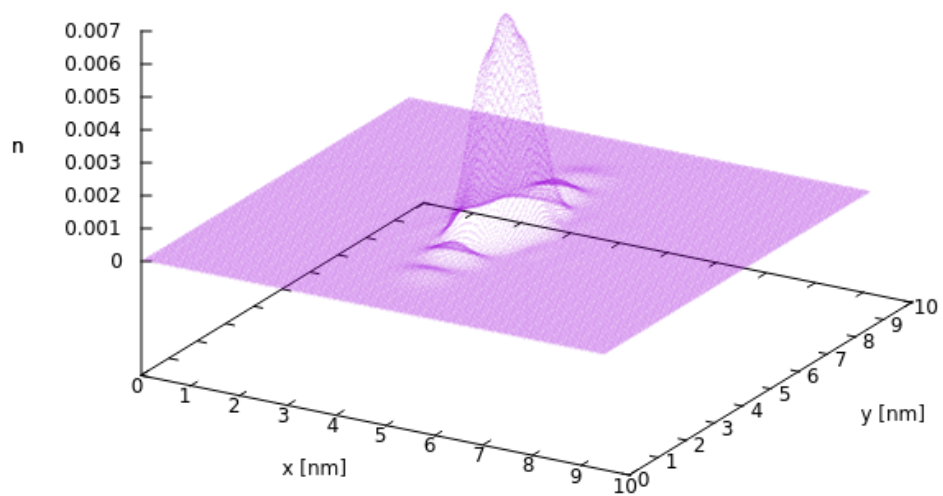
Rysunek 6: Koncentracja elektronowa po samouzgodnieniu równania dla jednego elektronu.



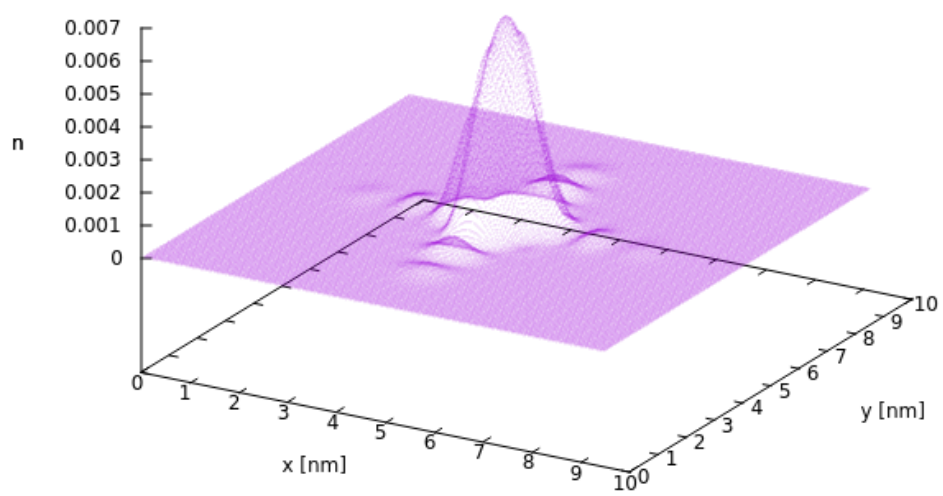
Rysunek 7: Koncentracja elektronowa po samouzgodnieniu równania dla dwóch elektronu.



Rysunek 8: Koncentracja elektronowa po samouzgodnieniu równania dla trzech elektronu.



Rysunek 9: Koncentracja elektronowa po samouzgodnieniu równania dla czterech elektronu.



Rysunek 10: Koncentracja elektronowa po samouzgodnieniu równania dla pięciu elektronu.

## Literatura

- [1] [http://newton.fis.agh.edu.pl/~wojcik/mof/mof2/Laboratorium\\_1.pdf](http://newton.fis.agh.edu.pl/~wojcik/mof/mof2/Laboratorium_1.pdf)
- [2] [http://newton.fis.agh.edu.pl/~wojcik/mof/mof2/projekty\\_2016.pdf](http://newton.fis.agh.edu.pl/~wojcik/mof/mof2/projekty_2016.pdf)
- [3] [http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady\\_mof/k22.pdf](http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady_mof/k22.pdf)
- [4] [http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady\\_mofit\\_2/r5.pdf](http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady_mofit_2/r5.pdf)
- [5] [http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady\\_mofit\\_2/r1.pdf](http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady_mofit_2/r1.pdf)
- [6] [http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady\\_mofit\\_1/r7.pdf](http://www.ftj.agh.edu.pl/~adamowski/wyklady_mofit_1/r7.pdf)