

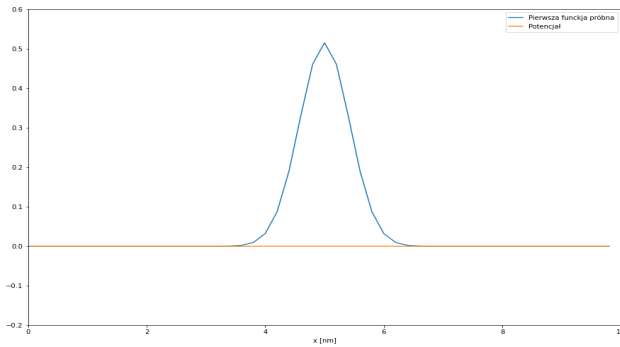
Poszukiwanie funkcji własnych cząstki w nieskończonej studni potencjału przy użyciu Time-Domain Simulation

Testowanie symulacji

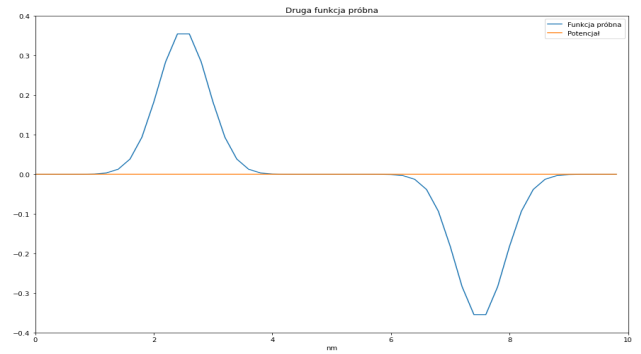
Natalia Grzybicka 305 014 Jakub Włodarczyk 305 064

Symulacja dała zadowalające rezultaty i udało się otrzymać symulacyjnie pierwsze trzy funkcje własne dla elektronu znajdującego się w nieskończonej studni potencjału.

Założono przy tym, że liczba punktów w rozważanej przestrzeni jest równa $NN = 50$. Ponadto do odnalezienia energii własnych oraz funkcji własnych użyto funkcji próbnych, widocznych na rysunku poniżej.



(a) pierwsza funkcja próbna



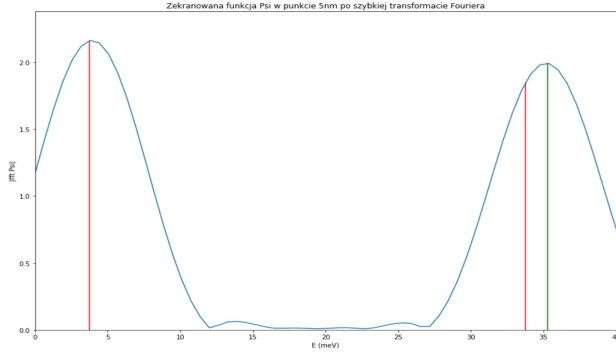
(b) druga funkcja próbna

Rysunek 1

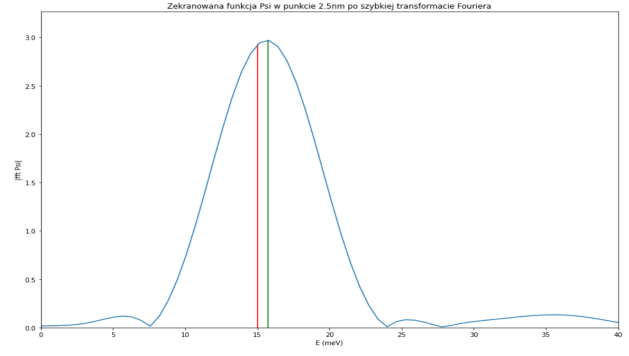
Wyznaczenie energii własnej wiązało się z odnalezieniem takiego miejsca na wykresie widocznym na rysunku 2, dla którego widoczny był pik. Teoria stanowi jednoznacznie, jakie są wartości pierwszych trzech energii własnych dla elektronu w rozważanej studni. Wynikają one ze wzoru

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

gdzie n stanowi indeks poszukiwanej energii własnej. W związku z powyższym, energia własna dla $n = 1$ wynosić powinna $E_1 = 3.75 \text{ meV}$, druga $E_2 = 15 \text{ meV}$ oraz trzecia $E_3 = 33.75 \text{ meV}$. Okazuje się jednak, że używany algorytm nie wyznacza energii własnych w sposób dokładny. Sprawdzono, nanosząc stosowne proste na wykres, iż wartość oczekiwanej energii własnej wyznaczona jest jedynie w przybliżeniu.



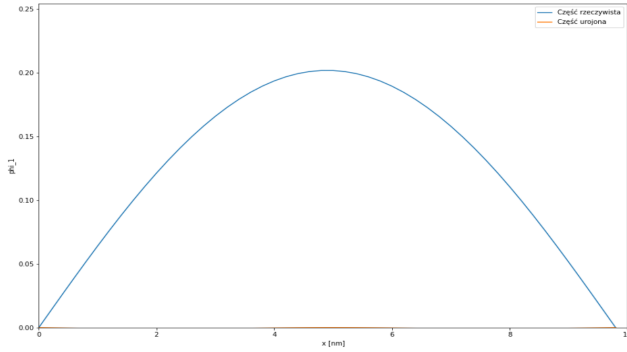
(a) 1. oraz 3. energia własna; zielona linia wskazuje na energię 35.30meV



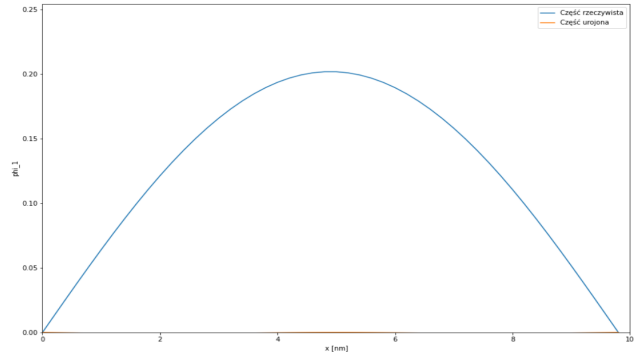
(b) 2. energia własna; zielona linia znajduje się w punkcie 15.75meV

Rysunek 2

W pierwotnej wersji symulacji, przy wyznaczaniu funkcji własnych, wartość odpowiadających im energii własnych wpisana została zgodnie z fizyczną teorią. Oznacza to, iż użyto wartości teoretycznych energii własnych. Sprawdzono, czy oczekiwane funkcje własne zostaną otrzymane, jeżeli odpowiednie energie własne przyjmą wartości otrzymane symulacyjnie. Poniżej znajduje się zestawienie funkcji własnych otrzymanych przy użyciu teoretycznych oraz wyznaczonych symulacyjnie energii własnych.

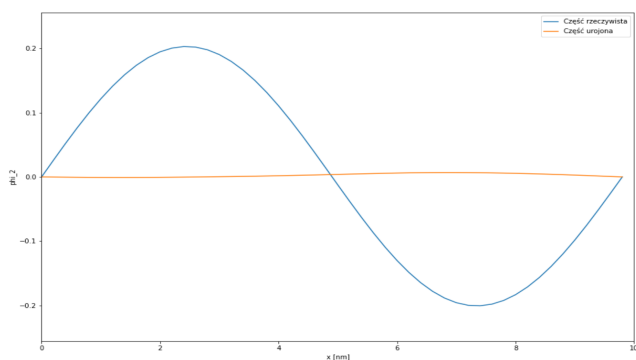


(a) E_1 teoretyczne

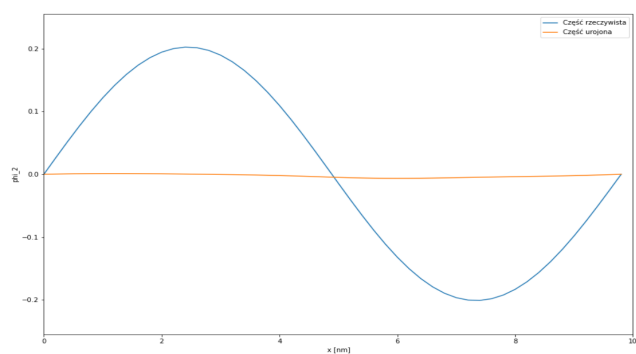


(b) E_1 symulacyjne

Rysunek 3: Pierwsza funkcja własna

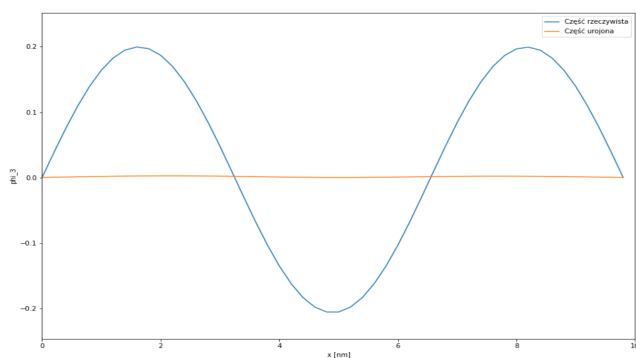


(a) E_2 teoretyczne

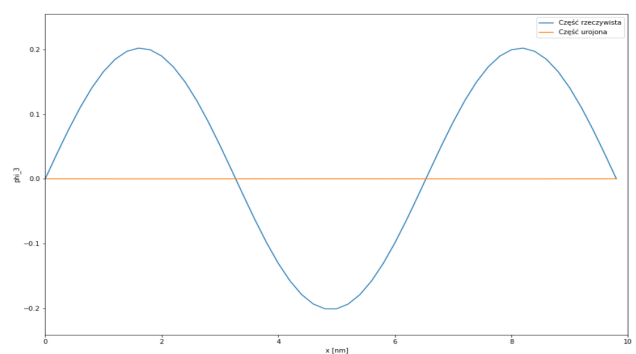


(b) E_2 symulacyjne

Rysunek 4: Druga funkcja własna



(a) E_3 teoretyczne

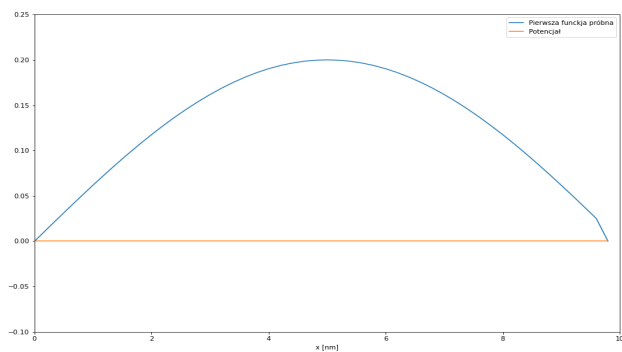


(b) E_3 symulacyjne

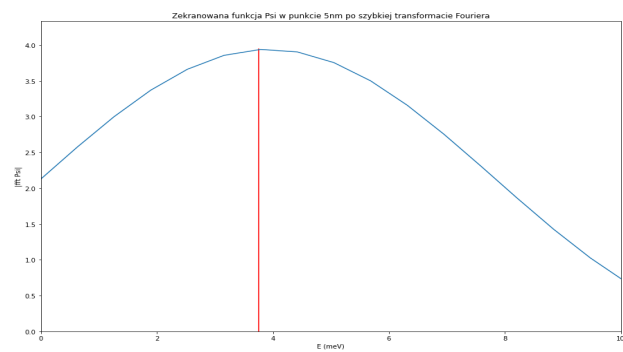
Rysunek 5: Trzecia funkcja własna

Pierwsza energia własna wyznaczona symulacyjnie pokryła się z przewidywaniami teoretycznymi. Druga oraz trzecia odbiegały od wartości teoretycznych, jednakże nie była to rozbieżność niepokojąco duża. Zgodnie z wykresami powyżej, tak niewielkie zmiany energii nie wpłynęły negatywnie na proces poszukiwania funkcji własnych.

Sprawdzono, czy zmiana funkcji próbnych z rysunku 1 wpłynie negatywnie na symulację. Okazało się, iż jeżeli za funkcję próbną przyjmiemy pierwszą funkcję własną, symulacyjnie otrzyma się wykres, z którego możliwe będzie odczytanie jedynie pierwszej energii własnej. Analogiczna sytuacja zajdzie, gdy za funkcję próbną przyjmie się drugą bądź trzecią funkcję własną. Wyznaczone w ten sposób energie własne również w tym wypadku nie pokryły się co do wartości z przewidywaniami teoretycznymi. Przyjęły bowiem dokładnie te same wartości, co w przypadku funkcji próbnych z rysunku 1.

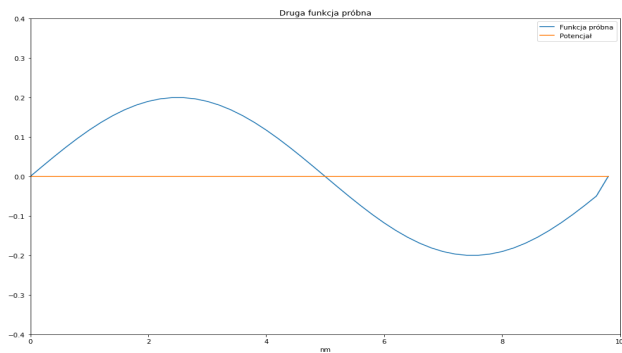


(a) Pierwsza funkcja próbna

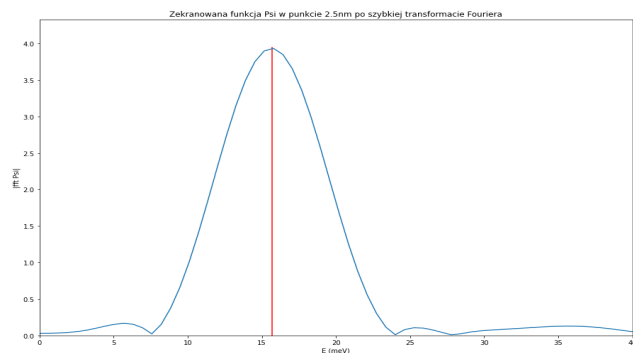


(b) Pik pierwszej energii własnej

Rysunek 6: Pierwsza energia własna

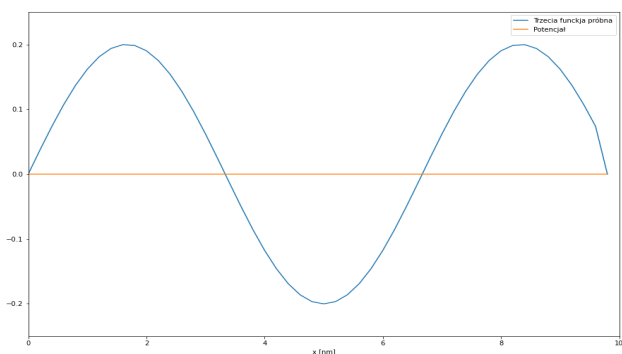


(a) Druga funkcja próbna

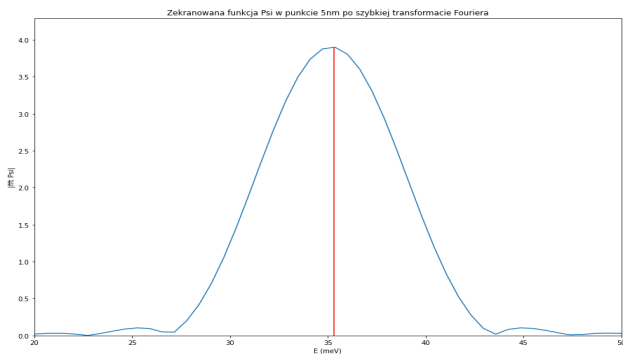


(b) Pik drugiej energii własnej

Rysunek 7: Druga energia własna



(a) Trzecia funkcja próbna



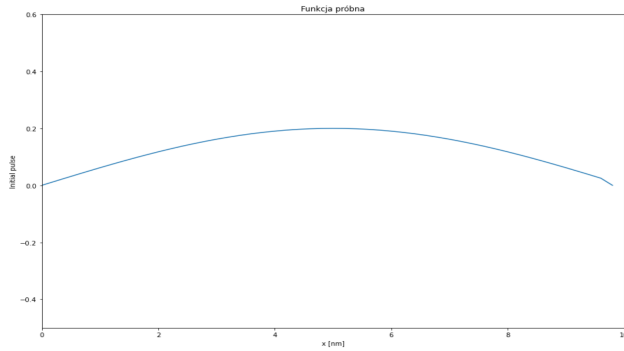
(b) Pik trzeciej energii własnej

Rysunek 8: Trzecia energia własna

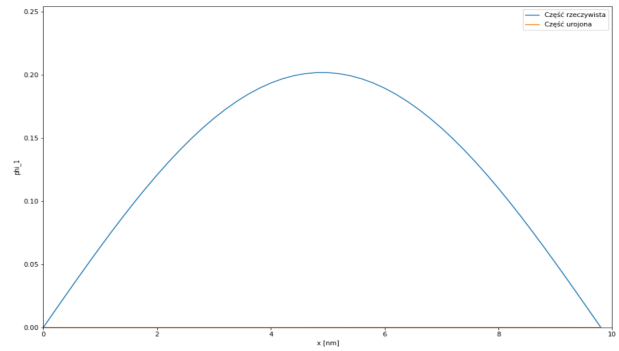
Sprawdzić też należało, czy podanie jako funkcji próbnej którejś z funkcji własnych nie będzie generowało błędów przy wyznaczaniu symulacyjnym funkcji własnych.

W celu wyznaczenia każdej z funkcji własnych podawano jako funkcję próbną oczekiwaną funkcję własną. W kodzie należało zadeklarować odpowiednią energię własną. Jej wartość była zgodna z teoretyczną (z poprzednich rozważań wynikało, iż podanie wartości otrzymywanych symulacyjnie nie stanowi problemu przy wyznaczaniu funkcji własnych).

Jeżeli szukano pierwszej funkcji własnej, ustawiano ją też jako funkcję próbną. Energia własna równa była $E_1 = 3.75 meV$. Otrzymana funkcja własna miała kształt zgodny z oczekiwaniami. Obliczenia powtórzono dla drugiej oraz trzeciej funkcji własnej. Zaznaczyć należy, iż zmiana funkcji własnej nakłada pewne ograniczenia na działanie symulacji. Jeżeli funkcją próbną jest pierwsza funkcja własna, zadeklarowana energia własna musi odpowiadać pierwszej energii własnej. Podanie E_3 nie spowoduje wygenerowania trzeciej funkcji własnej, co stanowi różnicę w stosunku do przypadku funkcji próbnej z rysunku 1 (a). Wówczas do wyznaczania pierwszej oraz trzeciej funkcji własnej wykorzystywana była ta sama funkcja próbna, a różnica leżała wyłącznie w wartości deklarowanej energii własnej.

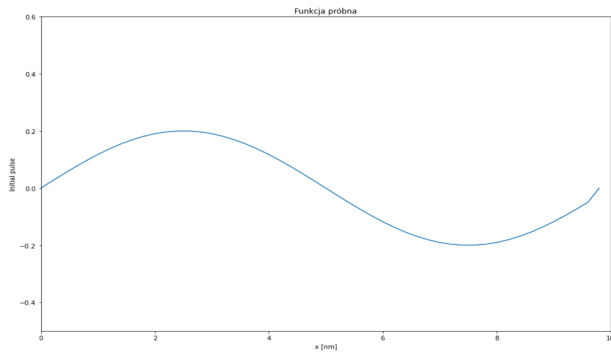


(a) Pierwsza funkcja próbna

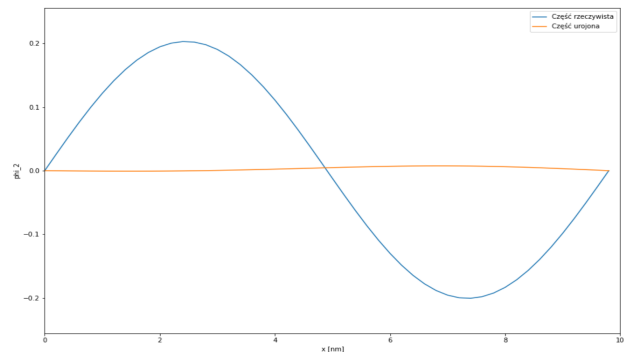


(b) Funkcja własna

Rysunek 9: Pierwsza funkcja własna

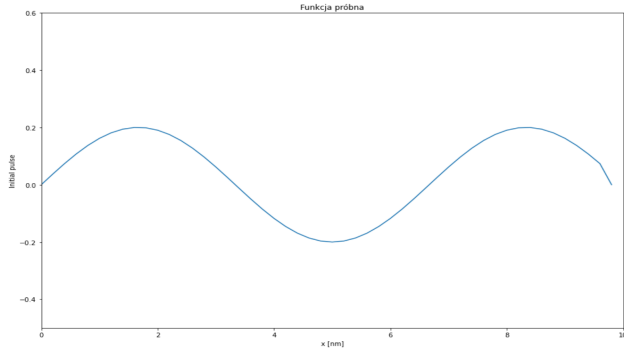


(a) Druga funkcja próbna

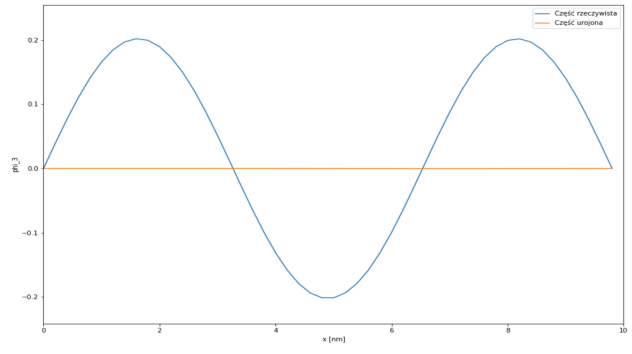


(b) Funkcja własna

Rysunek 10: Druga funkcja własna



(a) Trzecia funkcja próbna

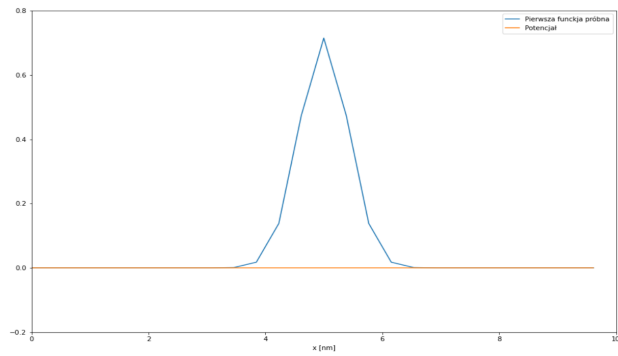


(b) Funkcja własna

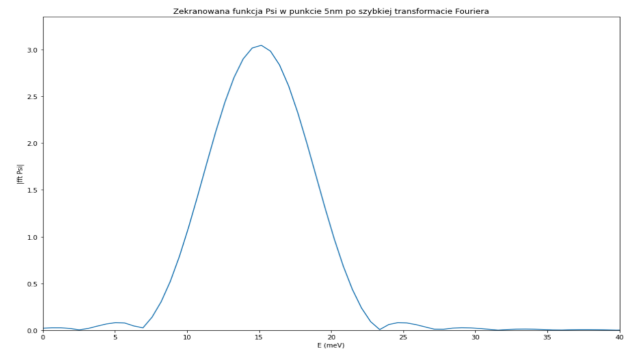
Rysunek 11: Trzecia funkcja własna

Liczba punktów NN, która przez cały czas ma stałą wartość 50, nie jest liczbą dużą. Sprawdzono zatem, czy zmiana liczby punktów znajdujących się w 10nm nieskończonej studni potencjału da lepsze rezultaty w toku trwania symulacji. Niestety okazało się, iż symulacja przestaje dawać oczekiwane rezultaty przy jakiegokolwiek zmianie wartości NN.

W pierwszym przypadku przyjęto $NN = 26$.

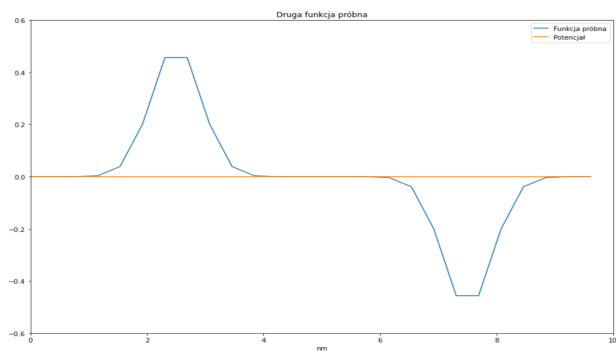


(a) Pierwsza funkcja próbna

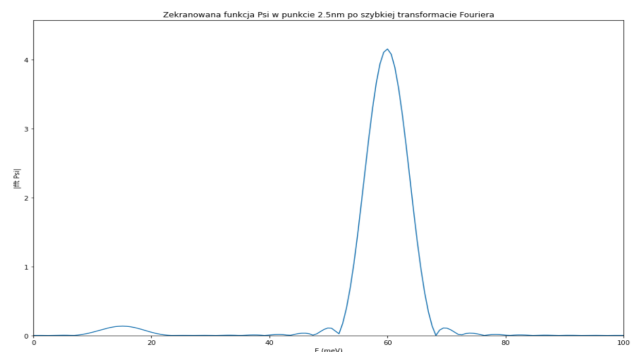


(b) Energia własna

Rysunek 12

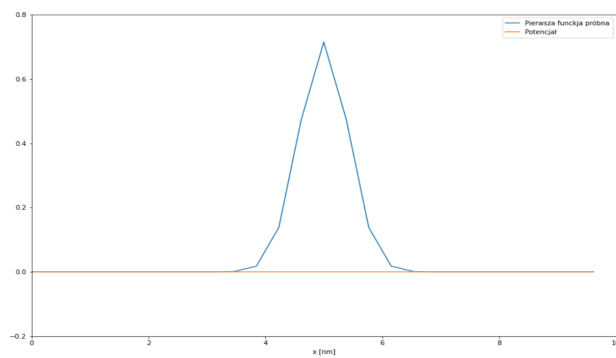


(a) Druga funkcja próbna

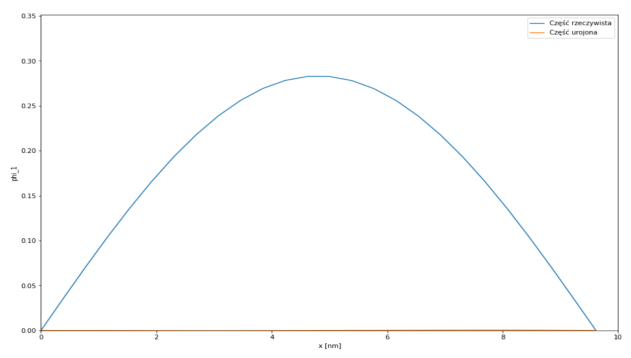


(b) Energia własna

Rysunek 13

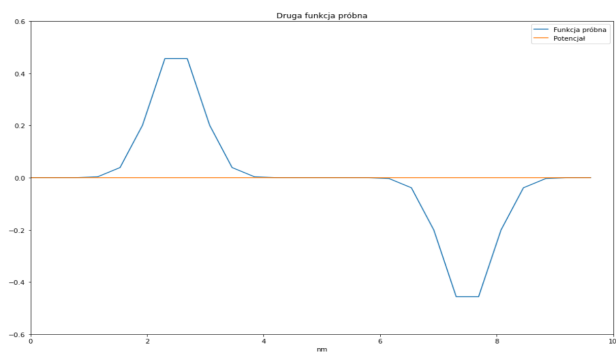


(a) Pierwsza funkcja próbna

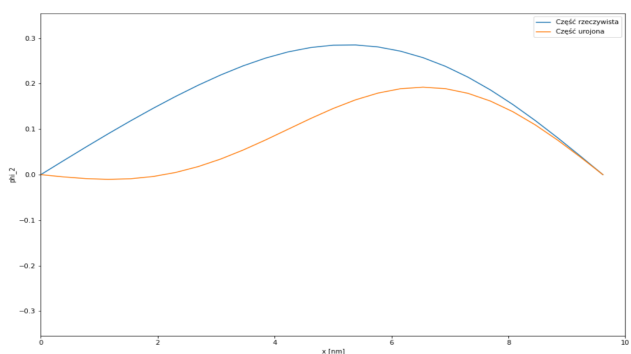


(b) Pierwsza funkcja własna

Rysunek 14

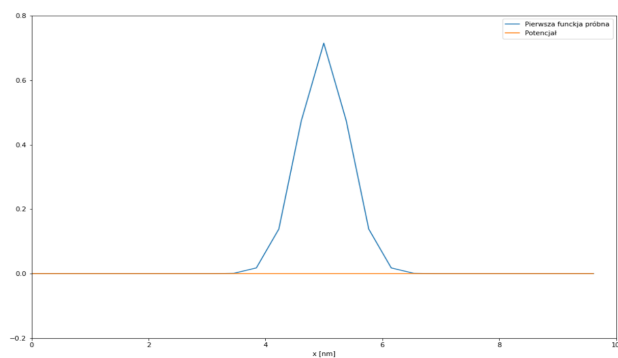


(a) Druga funkcja próbna

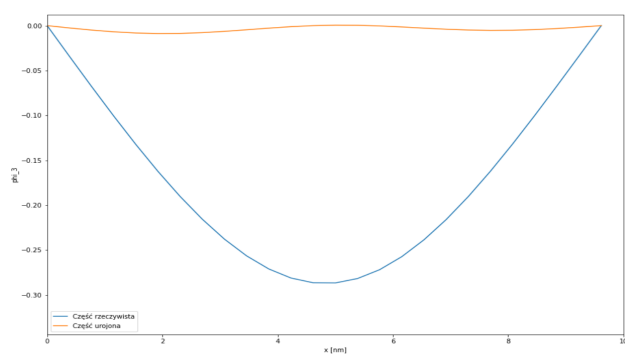


(b) Druga funkcja własna

Rysunek 15



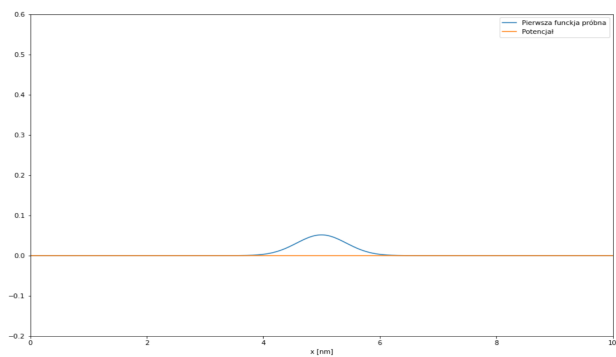
(a) Pierwsza funkcja próbna



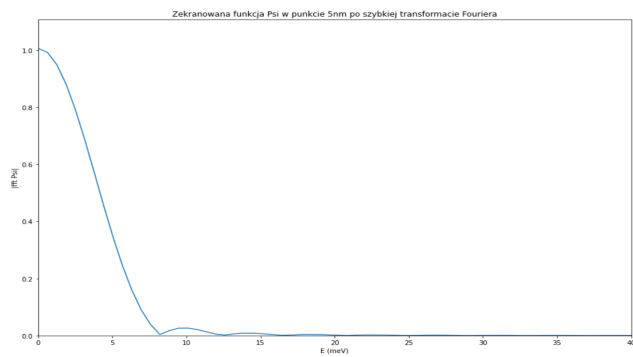
(b) Trzecia funkcja własna

Rysunek 16

W kolejnym przypadku zwiększono NN do wartości 5000.

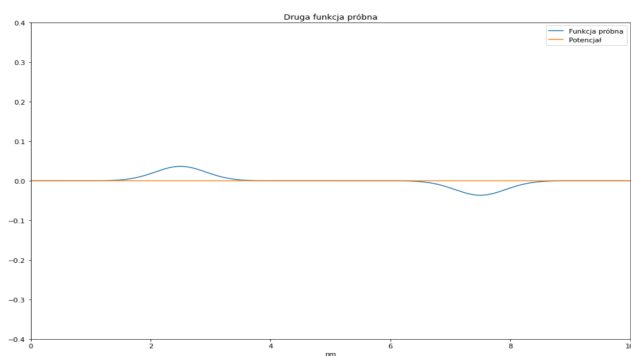


(a) Pierwsza funkcja próbna

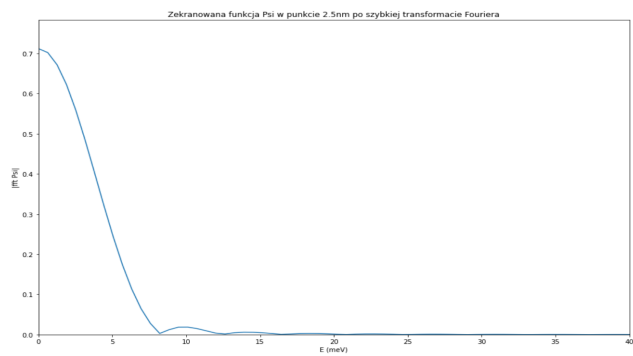


(b) Energia własna

Rysunek 17

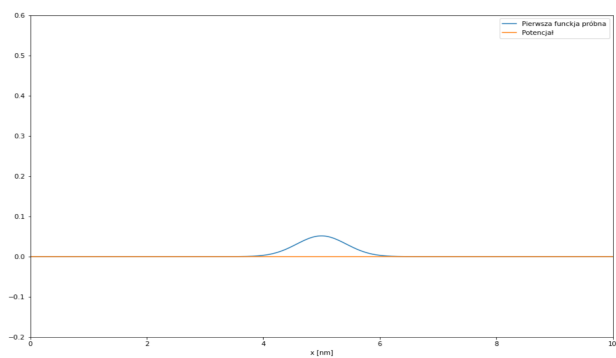


(a) Druga funkcja próbna

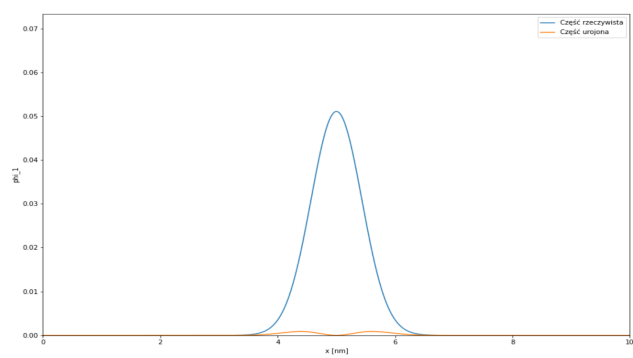


(b) Energia własna

Rysunek 18

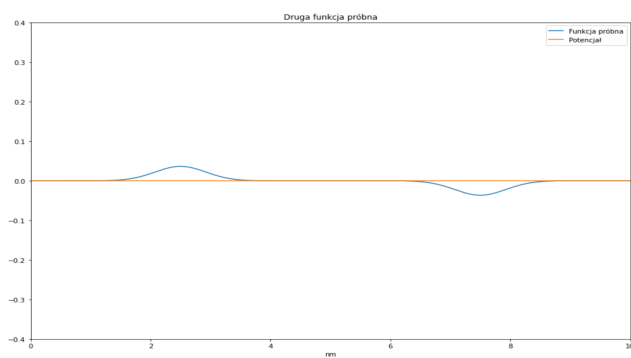


(a) Pierwsza funkcja próbna

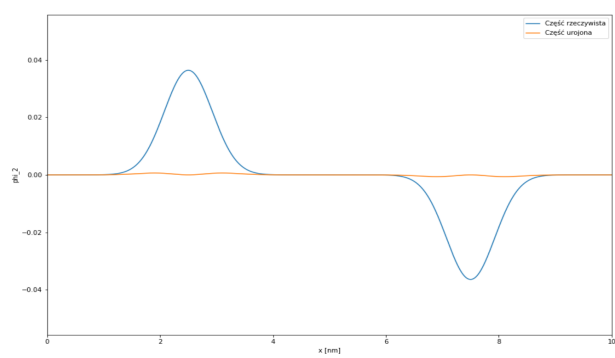


(b) Pierwsza funkcja własna

Rysunek 19

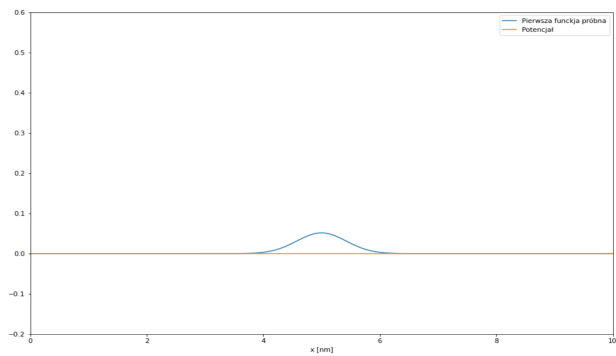


(a) Druga funkcja próbna

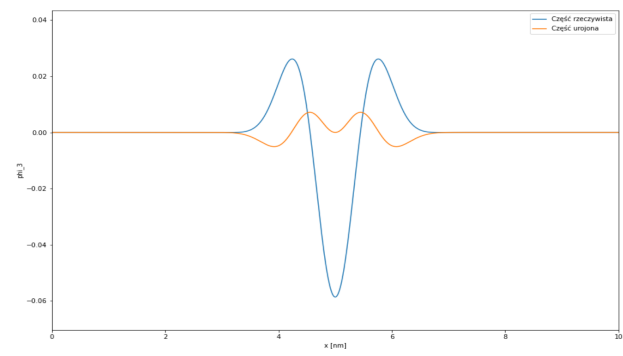


(b) Druga funkcja własna

Rysunek 20



(a) Pierwsza funkcja próbna



(b) Trzecia funkcja własna

Rysunek 21

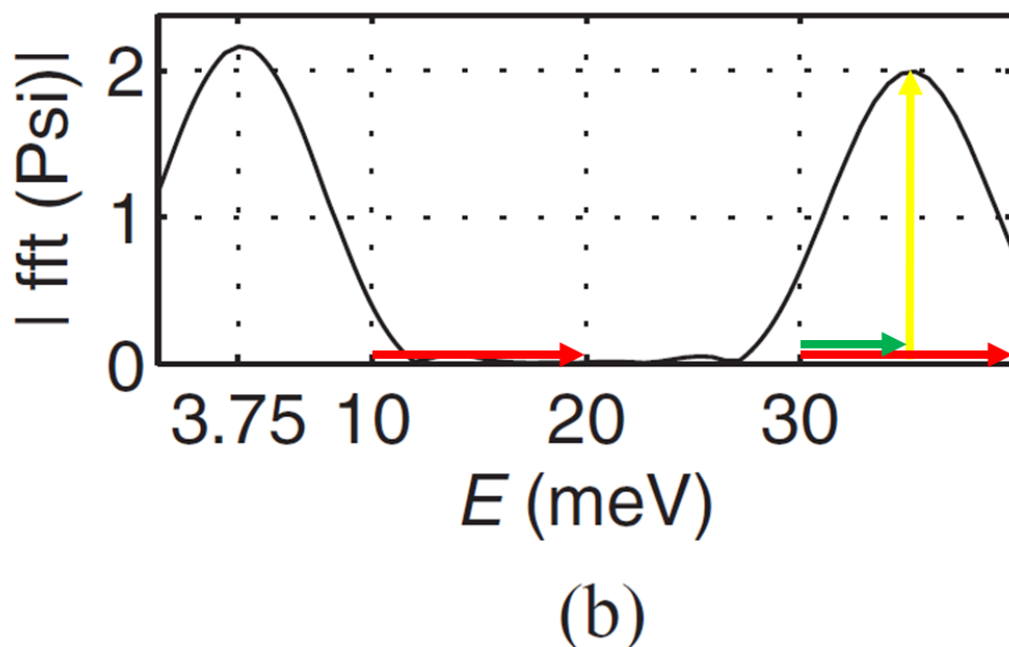
Jak widać z powyższych wykresów, zmiana NN generuje problemy zarówno przy wyznaczaniu energii własnych, jak i funkcji własnych. W przypadku $NN = 26$ otrzymano pik wskazujący na drugą energię własną w przypadku, gdy podana początkowo funkcja próbna powinna umożliwiać znalezienie jedynie 1. oraz 3. energii własnej. Jest to wynik niepokojący, gdyż autor książki, stanowiącej źródło do niniejszej symulacji, wyraźnie podkreślił, iż funkcja próbna z rysunku 1 (a) nie powinna pozwolić na wyznaczenie drugiej energii oraz funkcji własnej. Podanie drugiej funkcji próbnej nie umożliwiło odnalezienia drugiej energii własnej, gdyż pik znajduje się w miejscu odpowiadającym energii znacznie większej niż 15meV .

Generowane funkcje własne nie są zgodne z przewidywaniami teoretycznymi. O ile w przypadku pierwszej funkcji własnej symulacja dała wynik wymiennie akceptowalny (wystarczy bowiem przemnożyć otrzymaną funkcję przez pewną stałą, aby otrzymać amplitudę zgodną z teorią fizyczną), druga oraz trzecia funkcja własna nie posiada prawidłowo wyzerowanej części urojonej. Wobec tego symulacja dla $NN = 26$ nie działa poprawnie.

W przypadku $NN = 5000$ wszystkie otrzymane energie własne są równe zero, co jest wynikiem niefizycznym. Ponadto, podobnie jak w poprzednim przypadku, otrzymane funkcje własne mają nie w pełni wyzerowaną część urojoną. Ich kształt, abstrahując od kwestii niepoprawnej amplitudy, zdaje się przypominać oczekiwany kształt dla pierwszych trzech funkcji własnych. Nie mniej widoczne krzywe bardziej przypominają krzywe Gaussa, niżli oczekiwane sinusoidy.

Wobec tego prawdopodobnym jest, iż algorytm, na zasadzie którego działa symulacja, był projektowany dokładnie dla wartości $NN = 50$ i każda zmiana tej wielkości sprawia, iż nie są spełnione pewne ukryte założenia autora algorytmu. To z kolei prowadzi do wyników niepokojących bądź zupełnie niefizycznych.

Rysunek poniżej przedstawia graficzną analizę rysunku pochodzącego z książki, na podstawie której napisana została symulacja. Wynika z niego, iż jej autor, w toku wykonywania symulacji, nie otrzymał dokładnie wyznaczonych energii własnych, a jedynie ich przybliżone wartości¹.



Rysunek 22: Czerwone strzałki mają równe długości, odpowiadające $\Delta E = 10\text{meV}$; zielona strzałka stanowi równo połowę strzałki czerwonej; żółta strzałka wskazuje na pik; graficznie odczytywana wartość trzeciej energii własnej w przybliżeniu równa jest 35meV , a nie oczekiwanej 33.75meV

Źródło: Sullivan - Quantum Mechanics For Electrical Engineers

¹Notice that a peak has been found very close to the theoretical value of 15 meV . If we want better accuracy, we probably have to make the Fourier transform buffer greater than $2^{16} = 65,536$. We might also need to model the infinite well itself with better accuracy than 0.2 nm .