

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

Natalia Grzybicka 305 014 Jakub Włodarczyk 305 064

Rozważmy nieskończoną studnię potencjału o szerokości $a = 10nm$. Jesteśmy w stanie symbolicznie wyznaczyć postać funkcji własnych dla cząstki (np. elektronu) znajdującej się w takiej studni. Analiza symboliczna dostarcza nam również informacji o dopuszczalnych stanach energetycznych, w jakich może znajdować się rozważana cząstka. Rozwiązaniem niezależnego od czasu równania Schrödingera dla potencjału postaci

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \in [0, a] \\ \infty & x \notin [0, a] \end{cases}$$

jest funkcja wyrażająca się poprzez

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Symulacja ma za zadanie wyznaczyć trzy funkcje własne bez znajomości ich postaci analitycznej.

Pierwszym krokiem jest wyznaczenie dopuszczalnych poziomów energetycznych dla elektronu w rozważanej studni.

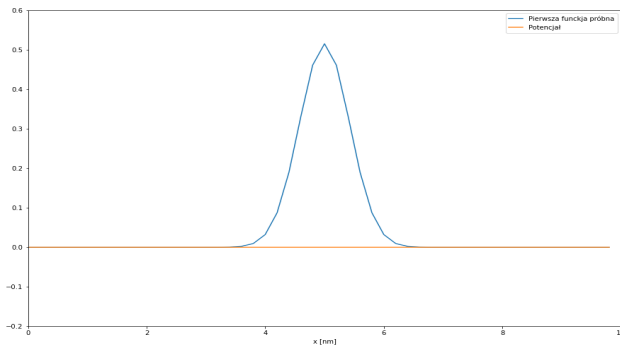
Wiadomo, iż wzór na n-ty taki poziom ma postać

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

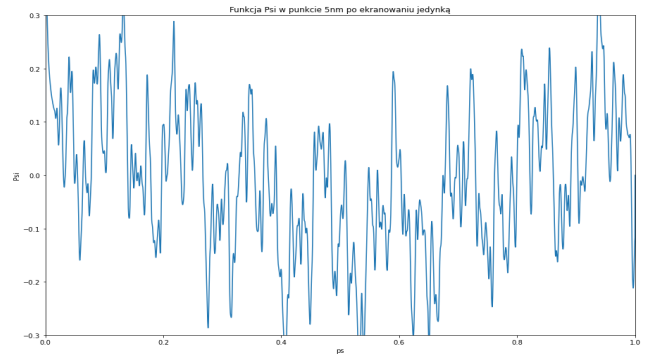
Symulacyjnie zostaną wyznaczone wartości E_1 , E_2 oraz E_3 .

Pierwszym krokiem jest umieszczenie w środku studni testowej funkcji (rysunek 1). Zapisać ją można jako sumę stanów stacjonarnych, nawet jeżeli stany te nie są jeszcze znane.

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \phi_n(x) \quad (1)$$



(a) Impuls zainicjowany w nieskończonej, 10nm studni potencjału



(b) Zebrane poprzez FDTD dane w dziedzinie czasu, symulowane w punkcie 5nm po 10 000 kroków

Rysunek 1

Funkcję tę można rozpatrzyć w dowolnym punkcie. Biorąc $x_0 = 5nm$, redukuje się ona do

$$\psi(x_0, t) = \sum_{n=1}^N c_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \phi_n(x_0)$$

Jest ona złożona z sinusoid o częstościach $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$. Zatem transformata Fouriera w dziedzinie czasu (time-domain Fourier transform) powinna ukazać energie własne.

Wykorzystana została tzw. finite-difference time-domain (FDTD) simulation. Jest to wszechstronna technika modelowania, używana m.in. do rozwiązywania równań Maxwella. Jako źródło w dziedzinie czasu używany jest impuls szerokopasmowy (przykładowo - impuls Gaussa). Za pomocą pojedynczej symulacji można uzyskać odpowiedź systemu w szerokim zakresie częstotliwości.

Symulacja umożliwiła zebranie danych w dziedzinie czasu, pochodzących od punktu startowego 5nm.

Chcemy wykonać transformatę Fouriera na zebranych danych. W celu zwiększenia rozdzielczości w dziedzinie częstotliwości, zbieramy dane z dziedziny czasu do buforu 2^{16} . Krok czasowy wynosi $\Delta t = 10^{-16}s$. W związku z tym rozdzielczość naszej transformaty (wykonanej przy użyciu funkcji Fast Fourier Transform - fft) wynosi:

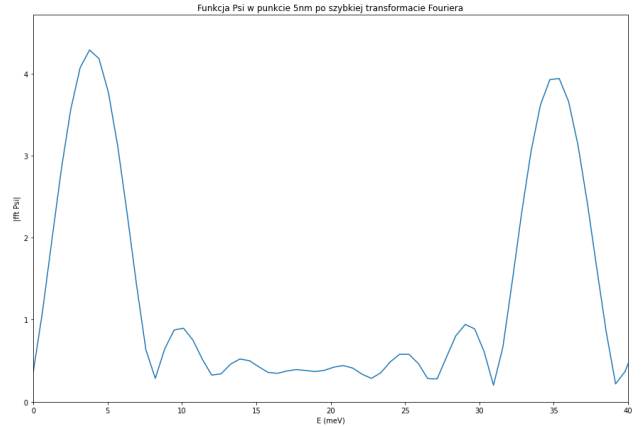
$$\Delta f = \frac{1}{2^{16} \times 10^{-16}s} \approx 0.1526 MHz$$

Można tę wielkość skonwertować na energię

$$\Delta E = h \cdot \Delta f = 0.63 meV$$

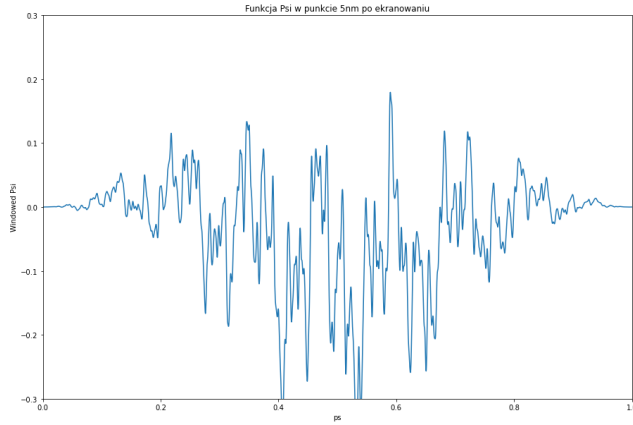
Zauważalnym jest, iż pierwszy pik przypada na energię $3.75 meV$ i takiego wyniku oczekiwano na podstawie wzoru wynikającego z analizy symbolicznej. Jest to podstawowy stan energetyczny elektronu w 10nm nieskończonej studni potencjału. Drugi widoczny pik, wskazujący energię $33.75 meV$, stanowi trzecią energię własną.

Pomiędzy dwoma pikami znajduje się wiele zakłóceń, które mogą być odbierane jako błędy. Są one wielorakiego pochodzenia, jednakże najważniejszą ich przyczyną jest fakt, iż nasza symulacja zaczyna się nagle dla $T = 0$ oraz kończy, również nagle, na $T = 10000$. Efekt ten można jednak znacząco skorygować poprzez proces zwany "ekranowaniem". Polega on na pomnożeniu danych zebranych w dziedzinie czasu przez pewną funkcję wygładzającą krawędzie. Jeden taki ekran nazywany jest "ekranem Hanninga". Wzór tej funkcji wygląda następująco

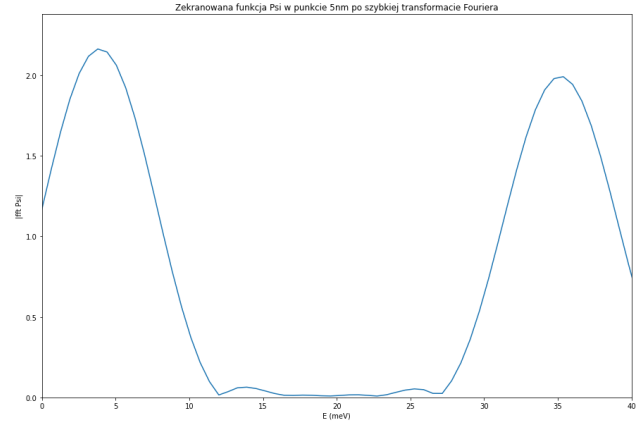


Rysunek 2: Transformata Fouriera zebranych przez FDTD danych

$$H(t) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi t}{T_{max}} \right) \right)$$

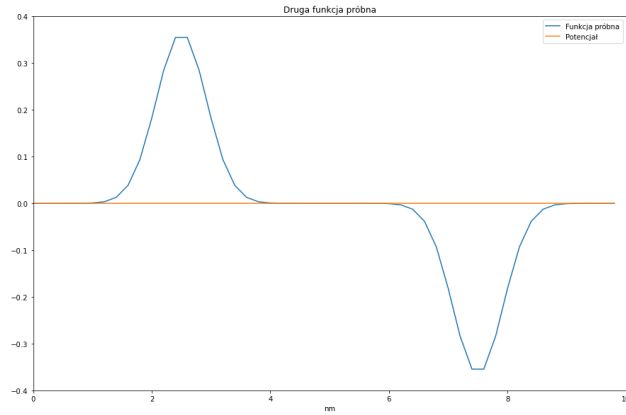


(a) Zebrane poprzez FDTD dane, na które nałożono ekranowanie

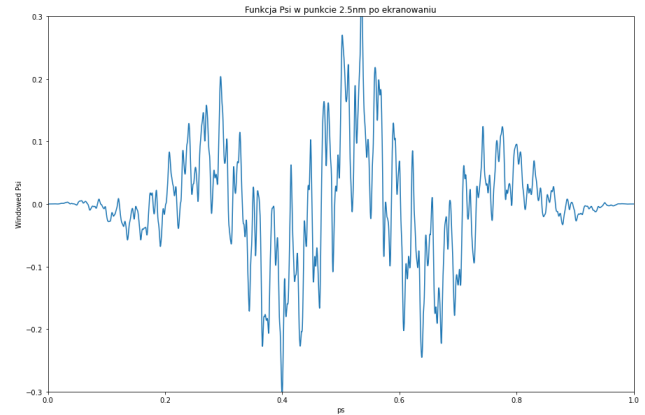


(b) Transformaty Fouriera danych zebranych przy użyciu FDTD, na które nałożono ekranowanie

Otrzymana funkcja jest o wiele bardziej wygładzona, jednak nie jest zupełnie wolna od widocznych zakłóceń. Szukając drugiej energii własnej należy wybrać testową funkcję, która nie będzie znajdować się w zerze drugiej funkcji własnej. Pierwsza testowa funkcja (rysunek 1) znajdowała się w takim zerze, zatem przy jej pomocy nie udało się wyznaczyć drugiej energii własnej. Ponadto, nowa funkcja testowa (rysunek 3) musi być ortogonalna do funkcji własnej stanu podstawowego.



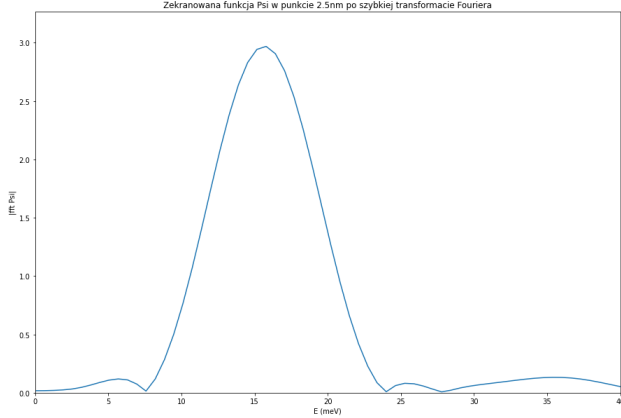
(a) Druga funkcja testowa



(b) Zekranowane dane pochodzące z FDTD zebrane w punkcie 2.5nm

Rysunek 3

Wyznaczona w ten sposób druga energia własna przypada na około 15meV , która to wartość jest przez nas oczekiwana. Potrzebując większej dokładności, należałoby wykonać transformatę Fouriera w buforze większym niż 2^{16} . Potrzeba więc modelu nieskończonej studni potencjału z dokładnością większą niż 0.2nm .



Rysunek 4: Transformata Fouriera zekranowanych danych pochodzących z FDTD dla punktu 2.5nm

matę Fouriera od $-\infty$ do $+\infty$. Nie mniej jednak, dobrym przybliżeniem jest sumowanie do pewnej odpowiednio dużej wartości M , reprezentującej wystarczająco długi czas.

$$\widetilde{\phi}_1^M(x, \omega_1) = \sum_{m=1}^M \psi(x, t) e^{i\omega_1(\Delta t \cdot m)} \Delta t \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} dt$$

Jest to dyskretna transformata dla częstości $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar}$. Policzona jest dla każdego x w rozważanym przez nas obszarze. Zastosować można jeszcze jeden zabieg, umożliwiający wyznaczenie funkcji własnej:

$$\begin{aligned} \widetilde{\phi}_1^M(x, \omega_1) &= \sum_{m=1}^M \psi(x, t) e^{i\omega_1(\Delta t \cdot m)} = \\ &= \sum_{m=1}^{M-1} \psi(x, t) e^{i\omega_1(\Delta t \cdot m)} + \psi(x, t) e^{i\omega_1(\Delta t \cdot M)} = \\ &= \widetilde{\phi}_1^{M-1}(x, \omega_1) + \psi(x, \Delta t \cdot M) (e^{i\omega_1 \Delta t})^M \end{aligned} \quad (2)$$

Obliczono zatem wartość $\widetilde{\phi}_1^M(x)$ na podstawie wartości poprzedniej $\widetilde{\phi}_1^{M-1}(x)$, do której dodaje się funkcję stanu pomnożoną przez człon Fouriera.

Używamy jednak również ekranowania, zatem

$$\widetilde{\phi}_1^M(x, \omega_1) = \widetilde{\phi}_1^{M-1}(x, \omega_1) + w(M \cdot \Delta t) \psi(x, M \cdot \Delta t) (e^{-i\omega_1 \Delta t})^M$$

gdzie $w(M \cdot \Delta t)$ stanowi ekran Hanninga. Gdyby od razu próbować rozwiązać równanie 2 na podstawie danych niezekranowanych, wynik zależałby mocno od punktu, w którym się zatrzymujemy. Ponadto duża wartość ψ w rozważanej przestrzeni na początku symulacji generowałaby problemy.

Wadą tego podejścia jest fakt, iż należy w pierwszej kolejności przewidzieć rozmiar symulacji, aby ustalić wartość T_{max} .

Poniżej znajdują się uzyskane tą metodą funkcje własne $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$ oraz $\phi_3(x)$. Przy rysowaniu funkcji teoretycznych przyjęto, iż długość studni wynosi 50 (dla tylu punktów przeprowadzano symulację). Jednakże wiadomo, iż w rzeczywistości studnia ta ma długość 10nm. Wobec tego przyjęto, iż pierwszy stan stacjonarny znajduje się w $m = 5$, drugi - $m = 10$, a trzeci - w $m = 15$.

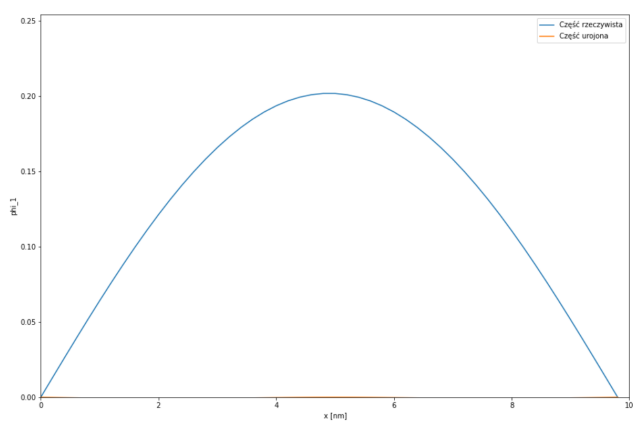
Znając energie własne, można przystąpić do konstrukcji stowarzyszonych z nimi funkcji własnych. W celu znalezienia $\phi_1(x)$, inicjuje się ponownie funkcję z rysunku 1. Testowa funkcja $\psi(x, t)$ zawiera funkcję własną stanu podstawowego

$$\phi_1(x, t) = c_1 e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \phi_1(x)$$

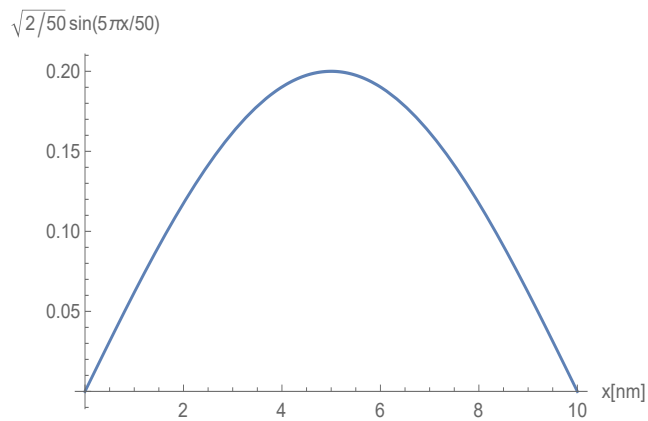
Równanie 1 zostało pomnożone przez $e^{i\frac{E_1}{\hbar}t}$ oraz scałkowane po czasie. Wówczas otrzymano

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=1}^N c_n e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \phi_n(x) e^{i\frac{E_1}{\hbar}t} dt = 2\pi c_1 \phi_1(x)$$

Zabieg ten sprowadza się do obliczenia transformaty Fouriera dla jednej częstości równej $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar}$. W programach symulacyjnych nie ma możliwości, aby policzyć transfor-

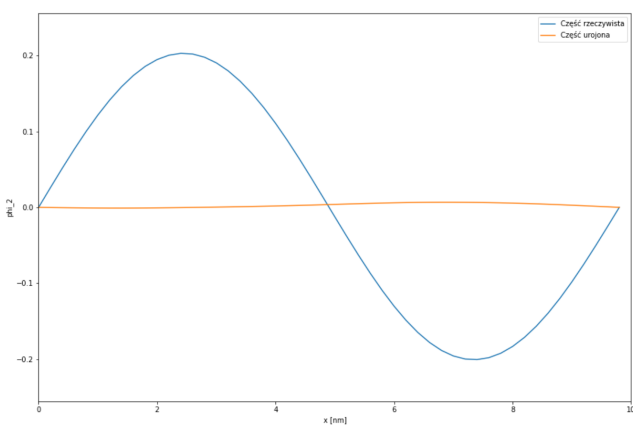


(a) $\phi_1(x)$; do jej wyznaczenia użyto testowej funkcji z rysunku 1

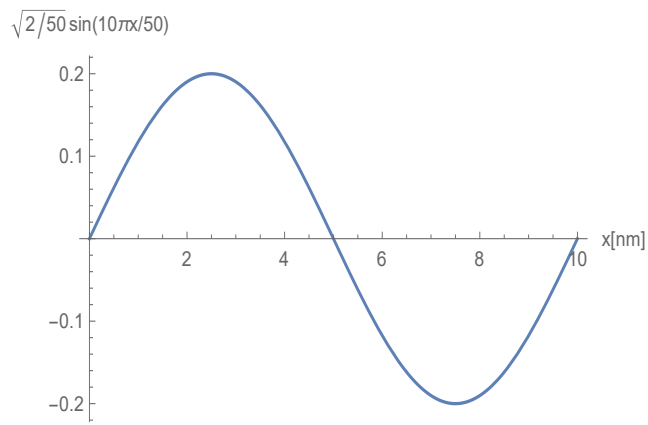


(b) Pierwsza teoretyczna funkcja własna

Rysunek 5

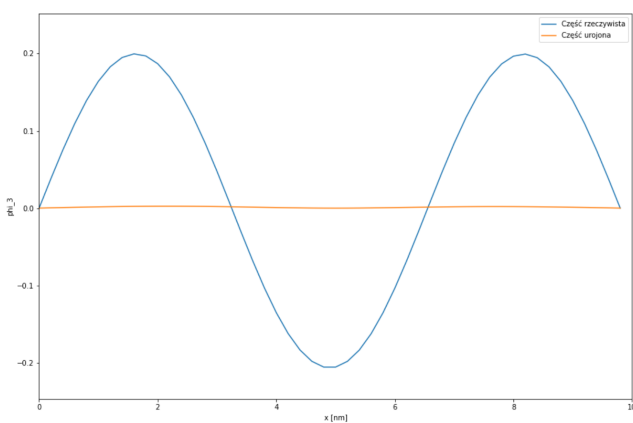


(a) $\phi_2(x)$; do jej wyznaczenia użyto funkcji testowej z rysunku 3

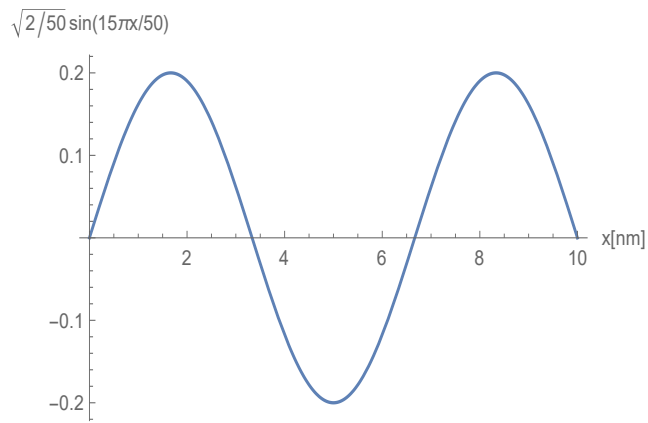


(b) Druga teoretyczna funkcja własna

Rysunek 6



(a) $\phi_3(x)$; do jej wyznaczenia użyto funkcji testowej z rysunku 1



(b) Trzecia teoretyczna funkcja własna

Rysunek 7