

Quantum dots

Eksakt diagonalisering

Espen Flage-Larsen

9. Juni 2006

Oversikt

- 1 Introduksjon
 - Intensjonen
 - Definisjon
 - Motivasjon
 - Enpartikkel quantum dot
 - Topartikkel quantum dot
- 2 Diagonalisering av topartikkelproblemet
 - Definisjoner
 - Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
 - Perturbasjonsteori et alternativ?
 - Resultater av diagonaliseringen
- 3 Diagonalisering av mangepartikkelproblemet
- 4 Et blick framover

Oversikt

1

Introduksjon

- Intensjonen

- Definisjon

- Motivasjon

- Enpartikkel quantum dot

- Topartikkel quantum dot

2

Diagonalisering av topartikkelproblemet

- Definisjoner

- Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt

- Perturbasjonsteori et alternativ?

- Resultater av diagonaliseringen

3

Diagonalisering av mangepartikkelproblemet

4

Et blikk framover

Intensjon

I denne masteroppgaven har vi undersøkt quantum dots og

- hvorvidt Oslo Shell Model Code (OSMC) kunne brukes til eksakt diagonalisering
- sammenliknet to og tre dimensjoner hvor dette var mulig
- sammenliknet ulike numeriske metoder for å generere matriselementene
- sammenliknet perturbasjonsteori med den eksakte diagonaliseringen

Intensjon

I denne masteroppgaven har vi undersøkt quantum dots og

- **hvorvidt Oslo Shell Model Code (OSMC) kunne brukes til eksakt diagonalisering**
- sammenliknet to og tre dimensjoner hvor dette var mulig
- sammenliknet ulike numeriske metoder for å generere matriselementene
- sammenliknet perturbasjonsteori med den eksakte diagonaliseringen

Intensjon

I denne masteroppgaven har vi undersøkt quantum dots og

- hvorvidt Oslo Shell Model Code (OSMC) kunne brukes til eksakt diagonalisering
- sammenliknet to og tre dimensjoner hvor dette var mulig
- sammenliknet ulike numeriske metoder for å generere matriselementene
- sammenliknet perturbasjonsteori med den eksakte diagonaliseringen

Intensjon

I denne masteroppgaven har vi undersøkt quantum dots og

- hvorvidt Oslo Shell Model Code (OSMC) kunne brukes til eksakt diagonalisering
- sammenliknet to og tre dimensjoner hvor dette var mulig
- sammenliknet ulike numeriske metoder for å generere matriselementene
- sammenliknet perturbasjonsteori med den eksakte diagonaliseringen

Intensjon

I denne masteroppgaven har vi undersøkt quantum dots og

- hvorvidt Oslo Shell Model Code (OSMC) kunne brukes til eksakt diagonalisering
- sammenliknet to og tre dimensjoner hvor dette var mulig
- sammenliknet ulike numeriske metoder for å generere matriselementene
- sammenliknet perturbasjonsteori med den eksakte diagonaliseringen

Oversikt

1

Introduksjon

- Intensjonen
- **Definisjon**
- Motivasjon
- Enpartikkel quantum dot
- Topartikkel quantum dot

2

Diagonalisering av topartikkelproblemet

- Definisjoner
- Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
- Perturbasjonsteori et alternativ?
- Resultater av diagonaliseringen

3

Diagonalisering av mangepartikkelproblemet

4

Et blikk framover

Definisjon

Begrepet quantum dot strekkes langt og en klar definisjon blir vanskelig. I mange tilfeller kan følgende definisjon være til hjelp

Definisjon

Quantum dot kan defineres som en avskilt øy med størrelse sammenlignbar med deBroglie bølgelengden til partiklene som eksiterer på denne øya.

Definisjon

Ta med noen eksempler?

Oversikt

1

Introduksjon

- Intensjonen
- Definisjon
- **Motivasjon**
- Enpartikkel quantum dot
- Topartikkel quantum dot

2

Diagonalisering av topartikkelproblemet

- Definisjoner
- Valg av integrasjonsteknikk og matrise-kutt
- Perturbasjonsteori et alternativ?
- Resultater av diagonaliseringen

3

Diagonalisering av mangepartikkelproblemet

4

Et blikk framover

Legg inn noe her

Legg inn motivasjon

Oversikt

1

Introduksjon

- Intensjonen
- Definisjon
- Motivasjon
- **Enpartikkel quantum dot**
- Topartikkel quantum dot

2

Diagonalisering av topartikkelproblemet

- Definisjoner
- Valg av integrasjonsteknikk og matrise-kutt
- Perturbasjonsteori et alternativ?
- Resultater av diagonaliseringen

3

Diagonalisering av mangepartikkelproblemet

4

Et blikk framover

Definisjoner

Definisjon

Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})^2 + V(x, y, z) + e\phi + \vec{p} \cdot \vec{B}$$

Definisjon

Harmonisk oscillator potensial

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m^* \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right)$$

Definisjoner

Definisjon

Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A})^2 + V(x, y, z) + e\phi + \vec{p} \cdot \vec{B}$$

Definisjon

Harmonisk oscillator potensial

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m^* \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right)$$

Approksimasjoner

Approksimasjoner

Sfærisk symmetrisk potensial

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m^* \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

Konstant magnetfelt langs z-aksen og intet elektrisk felt

$$\vec{B} = B \vec{e}_z, \quad \vec{E} = 0,$$

Vektorfeltet \vec{A} velges derfor

$$\vec{A} = \frac{B}{2} (-y, x, 0)$$

To dimensjoner

Schrödinger's likning gir løsningene

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nm}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+|m|)!}} \beta^{(|m|+1)/2} r^{|m|} e^{-\beta r^2/2} L_n^{|m|}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{2D} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

To dimensjoner

Schrödinger's likning gir løsningene

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nm}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+|m|)!}} \beta^{(|m|+1)/2} r^{|m|} e^{-\beta r^2/2} L_n^{|m|}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{2D} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

To dimensjoner

Schrödinger's likning gir løsningene

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nm}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+|m|)!}} \beta^{(|m|+1)/2} r^{|m|} e^{-\beta r^2/2} L_n^{|m|}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{2D} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

To dimensjoner

Dersom $B = 0$ ($\omega_B = 0$) vil egenverdiene ta følgende form

Energi ved $B = 0$

$$E_{2D}^{B=0} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega_0$$

Definisjon

Degenerasjon

$$d = 2n + |m| + 1$$

Den totale degenerasjonen vil være $D = 2d$ på grunn av spin degenerasjon.

To dimensjoner

Dersom $B = 0$ ($\omega_B = 0$) vil egenverdiene ta følgende form

Energi ved $B = 0$

$$E_{2D}^{B=0} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega_0$$

Definisjon

Degenerasjon

$$d = 2n + |m| + 1$$

Den totale degenerasjonen vil være $D = 2d$ på grunn av spin degenerasjon.

To dimensjoner

Dersom $B = 0$ ($\omega_B = 0$) vil egenverdiene ta følgende form

Energi ved $B = 0$

$$E_{2D}^{B=0} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega_0$$

Definisjon

Degenerasjon

$$d = 2n + |m| + 1$$

Den totale degenerasjonen vil være $D = 2d$ på grunn av spin degenerasjon.

To dimensjoner

Dette gir opphav til en skallstruktur mye likt det som finnes i atomer. I to dimensjoner vil denne strukturen være bestemt av den totale degenerasjonsgraden D .

$N=2n+ m $	$D=2d$	$S=\text{Antall partikler i skall}$
0	2	2
1	4	6
2	6	12
3	8	20

To dimensjoner

Vi ønsker nå å studere egenverdien som funksjon av magnetfeltet

Omskrevet energi

$$\frac{E_{2D}}{\hbar\omega_0} = (2n + |m| + 1) \sqrt{1 + \frac{\omega_B^2}{\omega_0^2}} + m\hbar \frac{\omega_B}{\omega_0}$$

To dimensjoner

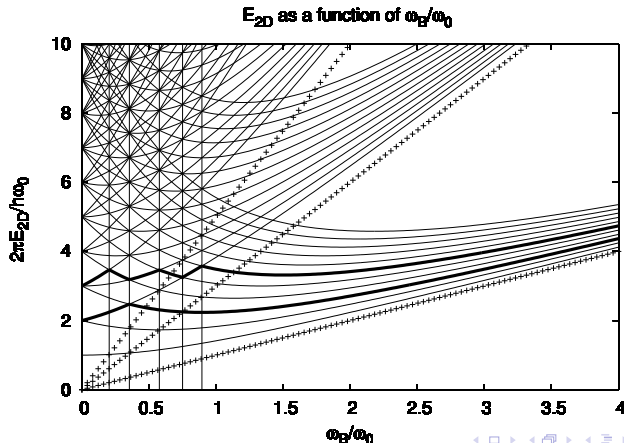
Vi ønsker nå å studere egenverdien som funksjon av magnetfeltet

Omskrevet energi

$$\frac{E_{2D}}{\hbar\omega_0} = (2n + |m| + 1) \sqrt{1 + \frac{\omega_B^2}{\omega_0^2}} + m\hbar \frac{\omega_B}{\omega_0}$$

To dimensjoner

Dette gir følgende Fock-Darwin spekter



Tre dimensjoner

I det tre-dimensjonale tilfellet vil Schrödinger's likning gi løsninger

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nl}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+l+1/2)!}} \beta^{(l+3/2)/2} r^l e^{-\beta r^2/2} L_n^{l+1/2}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{3D} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

Tre dimensjoner

I det tre-dimensjonale tilfellet vil Schrödinger's likning gi løsninger

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nl}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+l+1/2)!}} \beta^{(l+3/2)/2} r^l e^{-\beta r^2/2} L_n^{l+1/2}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{3D} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

Tre dimensjoner

I det tre-dimensjonale tilfellet vil Schrödinger's likning gi løsninger

Definisjon

Radiale egenfunksjoner

$$\psi_{nl}(r) = \sqrt{\frac{2n!}{(n+l+1/2)!}} \beta^{(l+3/2)/2} r^l e^{-\beta r^2/2} L_n^{l+1/2}(\beta r^2)$$

Definisjon

Eigenverdier

$$E_{3D} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega + m\hbar\omega_B$$

Tre dimensjoner

Der $|m| \leq l$. Akkurat som i det to-dimensjonale tilfellet definerer vi

Eigenverdi ved $B = 0$

$$E_{3D}^{B=0} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega_0$$

Hvilket medfører

- $2l + 1$ muligheter for gitt l
- økt degenerasjonsgrad i forhold til det to-dimensjonale tilfellet

Tre dimensjoner

Der $|m| \leq l$. Akkurat som i det to-dimensjonale tilfellet definerer vi

Eigenverdi ved $B = 0$

$$E_{3D}^{B=0} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega_0$$

Hvilket medfører

- $2l + 1$ muligheter for gitt l
- økt degenerasjonsgrad i forhold til det to-dimensjonale tilfellet

Tre dimensjoner

Der $|m| \leq l$. Akkurat som i det to-dimensjonale tilfellet definerer vi

Eigenverdi ved $B = 0$

$$E_{3D}^{B=0} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega_0$$

Hvilket medfører

- $2l + 1$ muligheter for gitt l
- økt degenerasjonsgrad i forhold til det to-dimensjonale tilfellet

Tre dimensjoner

Der $|m| \leq l$. Akkurat som i det to-dimensjonale tilfellet definerer vi

Eigenverdi ved $B = 0$

$$E_{3D}^{B=0} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega_0$$

Hvilket medfører

- $2l + 1$ muligheter for gitt l
- økt degenerasjonsgrad i forhold til det to-dimensjonale tilfellet

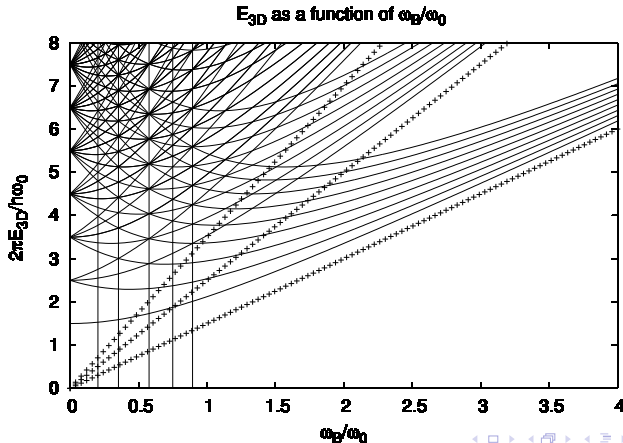
Tre dimensjoner

Dette gir opphav til følgende skallstruktur

$N=2n+1$	$D=2d$	$S=\text{Antall partikler i skall}$
0	2	2
1	6	8
2	12	20
3	20	40

Tre dimensjoner

Med tilhørende Fock-Darwin spekter



Oversikt

1

Introduksjon

- Intensjonen
- Definisjon
- Motivasjon
- Enpartikkel quantum dot
- **Topartikkel quantum dot**

2

Diagonalisering av topartikkelproblemet

- Definisjoner
- Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
- Perturbasjonsteori et alternativ?
- Resultater av diagonaliseringen

3

Diagonalisering av mangepartikkelproblemet

4

Et blikk framover

Definisjoner

Definisjon

Hamilton operatoren

$$H = \sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p}_i + \frac{e}{c} \vec{A}_i \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 r_i^2 + e\phi + \vec{p}_i \cdot \vec{B} \right\} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

På grunn av vekselvirkningen har ikke denne Hamilton operatoren en generell analytisk løsning. Ved å transformere til relative og massesenter koordinater kan vi separere vekselvirkningsbidraget.

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Definisjoner

$$\begin{aligned}\vec{r} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \\ \vec{R} &= \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)\end{aligned}$$

Definisjoner

$$\begin{aligned}\vec{p} &= \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2), \\ \vec{P} &= \vec{p}_1 + \vec{p}_2\end{aligned}$$

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Definisjoner

$$H = 2H_r + \frac{1}{2}H_R + H_S,$$

$$H_R = \frac{(\vec{P} + \vec{A}_R)^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_R^2 R^2,$$

$$H_r = \frac{(\vec{p} + \vec{A}_r)^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_r^2 r^2 + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon r},$$

$$H_S = \vec{p}_1 \cdot \vec{B} + \vec{p}_2 \cdot \vec{B}$$

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Definisjoner

$$\vec{A}_r = \frac{1}{2} \left(\vec{A}(\vec{r}_1) - \vec{A}(\vec{r}_2) \right),$$

$$\vec{A}_R = \vec{A}(\vec{r}_1) + \vec{A}(\vec{r}_2),$$

$$\omega_r = \frac{\omega_0}{2},$$

$$\omega_R = 2\omega_0$$

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Transformasjon til relative og massesenter koordinater

Observer at

- problemet er forenklet
- massesenterdelen har en analytisk løsning tilsvarende harmonisk oscillator
- den relative delen har ingen **generell** analytisk løsning
- for å løse den relative delen generelt trenger vi å diagonalisere
- spin delen er uavhengig av transformasjonen

Oversikt

- 1 Introduksjon
 - Intensjonen
 - Definisjon
 - Motivasjon
 - Enpartikkel quantum dot
 - Topartikkel quantum dot
- 2 **Diagonalisering av topartikkelproblemet**
 - **Definisjoner**
 - Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
 - Perturbasjonsteori et alternativ?
 - Resultater av diagonaliseringen
- 3 Diagonalisering av mangepartikkelproblemet
- 4 Et blikk framover

Matriseelementene i to dimensjoner

Herifra og ut vil vi

- fokusere på den relative delen
- bruke harmonisk oscillator egenfunksjoner som basis

Definisjon

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ defineres utifra den totale Hamilton operatoren for systemet uten vekselvirkningen.

$$H_0|NMnm\rangle = E|NMnm\rangle$$

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ vil da være en kombinasjon av relativ og massesenter harmonisk oscillator funksjoner

Matriseelementene i to dimensjoner

Herifra og ut vil vi

- fokusere på den relative delen
- bruke harmonisk oscillator egenfunksjoner som basis

Definisjon

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ defineres utifra den totale Hamilton operatoren for systemet uten vekselvirkningen.

$$H_0|NMnm\rangle = E|NMnm\rangle$$

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ vil da være en kombinasjon av relativ og massesenter harmonisk oscillator funksjoner

Matriseelementene i to dimensjoner

Herifra og ut vil vi

- fokusere på den relative delen
- bruke harmonisk oscillator egenfunksjoner som basis

Definisjon

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ defineres utifra den totale Hamilton operatoren for systemet uten vekselvirkningen.

$$H_0|NMnm\rangle = E|NMnm\rangle$$

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ vil da være en kombinasjon av relativ og massesenter harmonisk oscillator funksjoner

Matriseelementene i to dimensjoner

Herifra og ut vil vi

- fokusere på den relative delen
- bruke harmonisk oscillator egenfunksjoner som basis

Definisjon

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ defineres utifra den totale Hamilton operatoren for systemet uten vekselvirkningen.

$$H_0|NMnm\rangle = E|NMnm\rangle$$

Egenfunksjonene $|NMnm\rangle$ vil da være en kombinasjon av relativ og massesenter harmonisk oscillator funksjoner

Matriseelementene i to dimensjoner

Den relative delen er diagonal i massesenterbasisen. Og visa versa. I tillegg er begge delene diagonale i M og m . La oss dele opp den relative Hamiltonfunksjonen i en uperturbert og perturbert del.

Definisjoner

$$\begin{aligned}H_r &= H_{r_0} + H_{r_1}, \\H_{r_0} &= \frac{(\vec{p} + \vec{A}_r)^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_r^2 r^2, \\H_{r_1} &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon r}\end{aligned}$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Den relative delen er diagonal i massesenterbasisen. Og visa versa. I tillegg er begge delene diagonale i M og m . La oss dele opp den relative Hamiltonfunksjonen i en uperturbert og perturbert del.

Definisjoner

$$\begin{aligned}H_r &= H_{r_0} + H_{r_1}, \\H_{r_0} &= \frac{(\vec{p} + \vec{A}_r)^2}{2m^*} + \frac{1}{2}m^*\omega_r^2 r^2, \\H_{r_1} &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon r}\end{aligned}$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Den uperturberte H_{r_0} vil gi harmonisk oscillator løsninger. For å finne de relative egenverdiene ønsker vi å diagonalisere matrisen bygget opp av matriseelementene

Definisjon

$$M_{n'n}^{2D} = (2n + |m| + 1) \hbar \omega \delta_{n'n} + 2 \langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle$$

Definisjon

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_B^2$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Den uperturberte H_{r_0} vil gi harmonisk oscillator løsninger. For å finne de relative egenverdiene ønsker vi å diagonalisere matrisen bygget opp av matriseelementene

Definisjon

$$M_{n'n}^{2D} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega\delta_{n'n} + 2\langle n'm|H_{r_1}|nm\rangle$$

Definisjon

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_B^2$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Den uperturberte H_{r_0} vil gi harmonisk oscillator løsninger. For å finne de relative egenverdiene ønsker vi å diagonalisere matrisen bygget opp av matriseelementene

Definisjon

$$M_{n'n}^{2D} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega\delta_{n'n} + 2\langle n'm|H_{r_1}|nm\rangle$$

Definisjon

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_B^2$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Matriseelementene $\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle$ defineres som følger

Definisjon

$$\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle = \frac{l_B}{4a_0^*} l_{n'n}^{2D} \hbar \omega$$

Definisjon

$$l_{n'n}^{2D} = 2 \sqrt{\frac{n'! n!}{(n' + |m|)! (n + |m|)!}} \int_0^\infty x^{|m|-1/2} e^{-x} L_{n'}^{|m|}(x) L_n^{|m|}(x) dx$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Matriseelementene $\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle$ defineres som følger

Definisjon

$$\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle = \frac{l_B}{4a_0^*} l_{n'n}^{2D} \hbar \omega$$

Definisjon

$$l_{n'n}^{2D} = 2 \sqrt{\frac{n'! n!}{(n' + |m|)! (n + |m|)!}} \int_0^\infty x^{|m|-1/2} e^{-x} L_{n'}^{|m|}(x) L_n^{|m|}(x) dx$$

Matriseelementene i to dimensjoner

Matriseelementene $\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle$ defineres som følger

Definisjon

$$\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle = \frac{l_B}{4a_0^*} l_{n'n}^{2D} \hbar \omega$$

Definisjon

$$l_{n'n}^{2D} = 2 \sqrt{\frac{n'! n!}{(n' + |m|)! (n + |m|)!}} \int_0^\infty x^{|m|-1/2} e^{-x} L_{n'}^{|m|}(x) L_n^{|m|}(x) dx$$

Matriseelementene i tre dimensjoner

Tilsvarende definerer vi tre dimensjoner

Definisjon

$$M_{n'n}^{3D} = (2n + 1 + 3/2)\hbar\omega\delta_{n'n} + 2\langle n'l | H_{r_1} | nl \rangle$$

Definisjon

$$\langle n'l | H_{r_1} | nl \rangle = \frac{I_B}{4a_0^*} I_{n'n}^{3D} \hbar\omega$$

Matriseelementene i tre dimensjoner

Tilsvarende definerer vi tre dimensjoner

Definisjon

$$M_{n'n}^{3D} = (2n + 1 + 3/2)\hbar\omega\delta_{n'n} + 2\langle n'l|H_{r_1}|nl\rangle$$

Definisjon

$$\langle n'l|H_{r_1}|nl\rangle = \frac{I_B}{4a_0^*} I_{n'n}^{3D} \hbar\omega$$

Matriseelementene i tre dimensjoner

Tilsvarende definerer vi tre dimensjoner

Definisjon

$$M_{n'n}^{3D} = (2n + 1 + 3/2)\hbar\omega\delta_{n'n} + 2\langle n'l|H_{r_1}|nl\rangle$$

Definisjon

$$\langle n'l|H_{r_1}|nl\rangle = \frac{I_B}{4a_0^*} I_{n'n}^{3D} \hbar\omega$$

Matriseelementene i tre dimensjoner

Definisjon

$$\beta_{n'n}^D = C_{n'n} \int_0^\infty x^l e^{-x} L_{n'}^{l+1/2}(x) L_n^{l+1/2}(x) dx,$$

$$C_{n'n} = 2 \sqrt{\frac{n'! n!}{(n' + l + 1/2)! (n + l + 1/2)!}}$$

Oversikt

- 1 Introduksjon
 - Intensjonen
 - Definisjon
 - Motivasjon
 - Enpartikkel quantum dot
 - Topartikkel quantum dot
- 2 **Diagonalisering av topartikkelproblemet**
 - Definisjoner
 - **Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt**
 - Perturbasjonsteori et alternativ?
 - Resultater av diagonaliseringen
- 3 Diagonalisering av mangepartikkelproblemet
- 4 Et blikk framover

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapez metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapez metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapez metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapes metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapes metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

Vi ønsker å beregne integralet

Definisjon

$$I = \int_i^e f(x) dx$$

Det finnes flere metoder, blant annet

- Trapes metode
- Gauss-Laguerre kvadratur
- Gauss-Legendre kvadratur

Numerisk integrasjon

For å teste disse metodene generer vi et polynom som har sterke analogier til Laguerre polynomene vi får i matriseelementene, men som kan løses analytisk

Definisjon

$$f(x) = x^\alpha e^{-x^2} (1 - x^2 + x^4 + \dots + (-1)^p x^{2p})$$

Definisjon

$$|\epsilon| = \left| \frac{\text{analytisk integrasjon} - \text{numerisk integrasjon}}{\text{analytisk integrasjon}} \right|$$

Numerisk integrasjon

For å teste disse metodene generer vi et polynom som har sterke analogier til Laguerre polynomene vi får i matriseelementene, men som kan løses analytisk

Definisjon

$$f(x) = x^\alpha e^{-x^2} (1 - x^2 + x^4 + \dots + (-1)^p x^{2p})$$

Definisjon

$$|\epsilon| = \left| \frac{\text{analytisk integrasjon} - \text{numerisk integrasjon}}{\text{analytisk integrasjon}} \right|$$

Numerisk integrasjon

For å teste disse metodene generer vi et polynom som har sterke analogier til Laguerre polynomene vi får i matriseelementene, men som kan løses analytisk

Definisjon

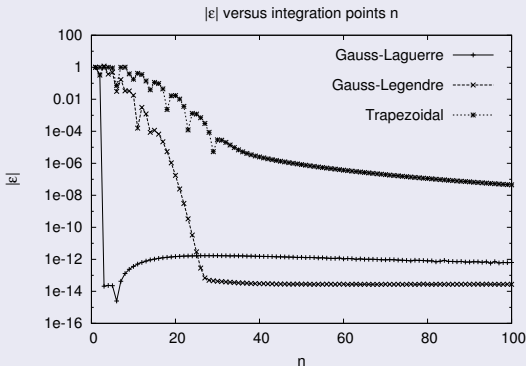
$$f(x) = x^\alpha e^{-x^2} (1 - x^2 + x^4 + \dots + (-1)^p x^{2p})$$

Definisjon

$$|\epsilon| = \left| \frac{\text{analytisk integrasjon} - \text{numerisk integrasjon}}{\text{analytisk integrasjon}} \right|$$

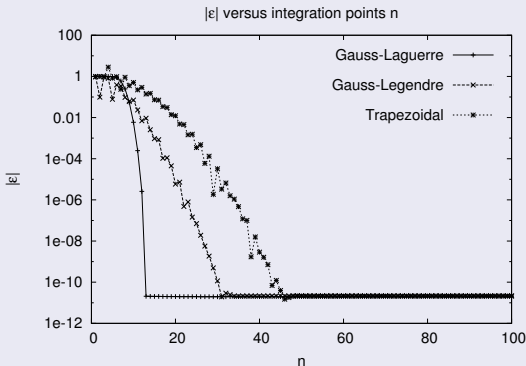
Numerisk integrasjon

$|\epsilon|$ som funksjon av n for $p=5$



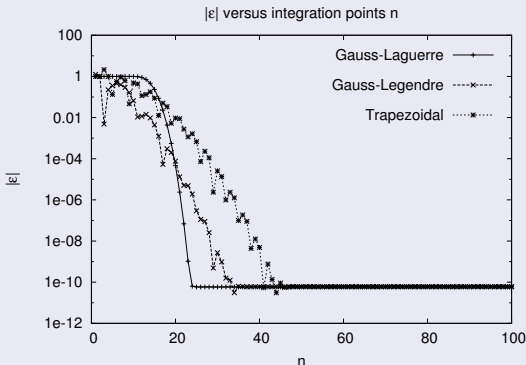
Numerisk integrasjon

$|\epsilon|$ som funksjon av n for $p=25$



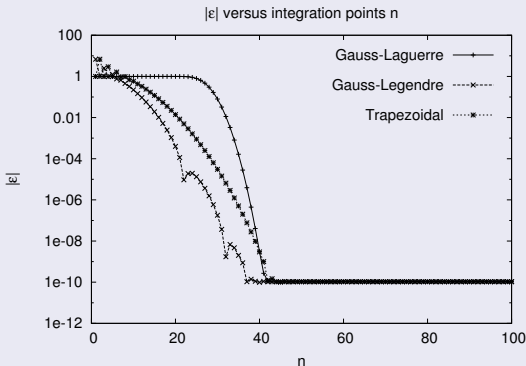
Numerisk integrasjon

$|\epsilon|$ som funksjon av n for $p=50$



Numerisk integrasjon

$|\epsilon|$ som funksjon av n for $p=100$



Numerisk integrasjon

Konklusjon

Gauss-Laguerre kvadratur foretrekkes så lenge $p < 100$

Matrise kutt

- Vi er nødt til å legge en begrensning på de maksimale verdiene for n og n' for matriselementene $\langle n' m | H_{r_1} | n m \rangle$ og $\langle n' l | H_{r_1} | n l \rangle$
- Denne begrensningen må ikke gå utover de laveste egenverdiene

Matrise kutt

En begrensning i n vil også gjelde for n' ettersom matrisen er symmetrisk. For å undersøke hvordan en begrensning i n går ut over de laveste egenverdiene definerer vi

Definisjon

$$|\epsilon| = |E_n^{n_{maks}} - E_n^{n'_{maks}}|$$

Matrise kutt

En begrensning i n vil også gjelde for n' ettersom matrisen er symmetrisk. For å undersøke hvordan en begrensning i n går ut over de laveste egenverdiene definerer vi

Definisjon

$$|\epsilon| = |E_n^{n_{maks}} - E_n^{n'_{maks}}|$$

Matrise kutt

Fremgangsmåten blir da som følger

- 1 velg n_{maks}
- 2 diagonaliser $n_{maks} \times n_{maks}$ matrise
- 3 sjekk differansen for de laveste egenverdiene mot forrige diagonalisering med n'_{maks}

Man skal da observere en konvergens når n_{maks} øker ettersom elementene lengst fra diagonalen bidrar mindre og mindre til de lavere tilstandene

Matrise kutt

Fremgangsmåten blir da som følger

- 1 velg n_{maks}
- 2 diagonaliser $n_{maks} \times n_{maks}$ matrise
- 3 sjekk differansen for de laveste egenverdiene mot forrige diagonalisering med n'_{maks}

Man skal da observere en konvergens når n_{maks} øker ettersom elementene lengst fra diagonalen bidrar mindre og mindre til de lavere tilstandene

Matrise kutt

Fremgangsmåten blir da som følger

- 1 velg n_{maks}
- 2 diagonaliser $n_{maks} \times n_{maks}$ matrise
- 3 sjekk differansen for de laveste egenverdiene mot forrige diagonalisering med n'_{maks}

Man skal da observere en konvergens når n_{maks} øker ettersom elementene lengst fra diagonalen bidrar mindre og mindre til de lavere tilstandene

Matrise kutt

Fremgangsmåten blir da som følger

- 1 velg n_{maks}
- 2 diagonaliser $n_{maks} \times n_{maks}$ matrise
- 3 sjekk differansen for de laveste egenverdiene mot forrige diagonalisering med n'_{maks}

Man skal da observere en konvergens når n_{maks} øker ettersom elementene lengst fra diagonalen bidrar mindre og mindre til de lavere tilstandene

Matrise kutt

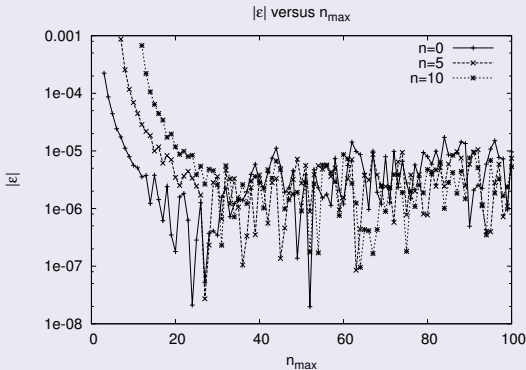
Fremgangsmåten blir da som følger

- 1 velg n_{maks}
- 2 diagonaliser $n_{maks} \times n_{maks}$ matrise
- 3 sjekk differansen for de laveste egenverdiene mot forrige diagonalisering med n'_{maks}

Man skal da observere en konvergens når n_{maks} øker ettersom elementene lengst fra diagonalen bidrar mindre og mindre til de lavere tilstandene

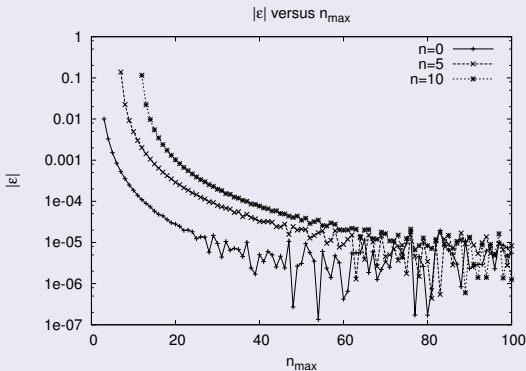
Matrise kutt

Tre dimensjoner, $l = 0$, $l_B/a_0^* = 0.1$



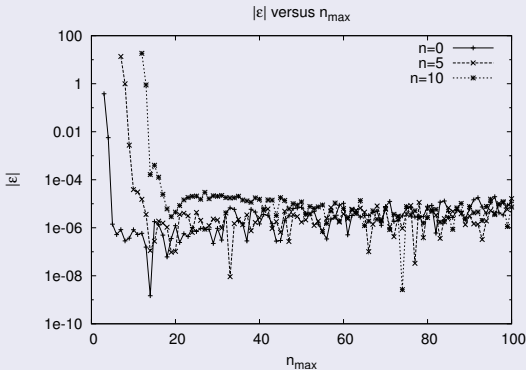
Matrise kutt

Tre dimensjoner, $l = 0$, $l_B/a_0^* = 1$



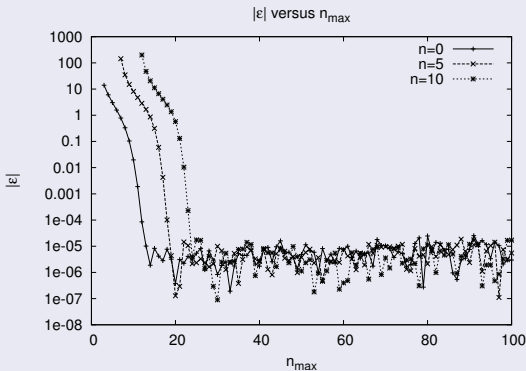
Matrise kutt

Tre dimensjoner, $l = 0$, $l_B/a_0^* = 10$



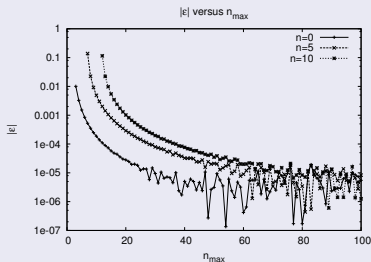
Matrise kutt

Tre dimensjoner, $l = 0$, $I_B/a_0^* = 100$

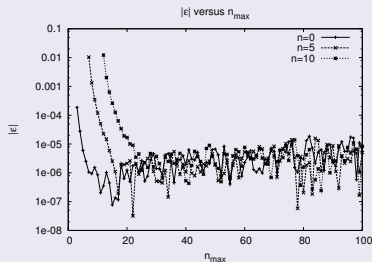


Matrise kutt

Tre dimensjoner, $l = 0, 5$, $l_B/a_0^* = 1$



(a) $l = 0$



(b) $l = 5$

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Matrise kutt

Vi observerer at

- $n_{maks} \approx 80$ gir konvergens for de ti laveste egenverdiene
- større n verdier krever større n_{maks} for å konvergere
- større l (m i to dimensjoner) gir raskere konvergens
- for $l_B/a_0^* = 1$ er det en relativt treig konvergens, dette er også tilfellet for to dimensjoner
- større l_B/a_0^* verdier gir raskere konvergens

Oversikt

- 1 Introduksjon
 - Intensjonen
 - Definisjon
 - Motivasjon
 - Enpartikkel quantum dot
 - Topartikkel quantum dot
- 2 **Diagonalisering av topartikkelproblemet**
 - Definisjoner
 - Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
 - **Perturbasjonsteori et alternativ?**
 - Resultater av diagonaliseringen
- 3 Diagonalisering av mangepartikkelproblemet
- 4 Et blikk framover

Definisjoner

Ettersom vekselvirkningen går som $1/r$ vil den være liten for store r . Kan perturbasjonsteori være et alternativ til eksakt diagonalisering?

Definisjon

Andre ordens ikke-degenerert perturbasjonsteori defineres ofte

$$E_n = E_n^0 + \langle n^0 | H_{r_1} | n^0 \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | H_{r_1} | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

Hvor $|n^0\rangle$ er den normaliserte egenvektoren til den uperturberte Hamilton operatoren H_{r_0} med egenverdi E_n^0 .

Definisjoner

Ettersom vekselvirkningen går som $1/r$ vil den være liten for store r . Kan perturbasjonsteori være et alternativ til eksakt diagonalisering?

Definisjon

Andre ordens ikke-degenerert perturbasjonsteori defineres ofte

$$E_n = E_n^0 + \langle n^0 | H_{r_1} | n^0 \rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n' | H_{r_1} | n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0}$$

Hvor $|n^0\rangle$ er den normaliserte egenvektoren til den uperturberte Hamilton operatoren H_0 med egenverdi E_n^0 .

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

For å sammenlikne perturbasjonsteorien med den eksakte diagonaliseringen definerer vi den relative feilen

Definisjon

$$|\epsilon| = \left| \frac{\text{eksakt diagonalisering} - \text{perturbasjonsteori}}{\text{eksakt diagonalisering}} \right|$$

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

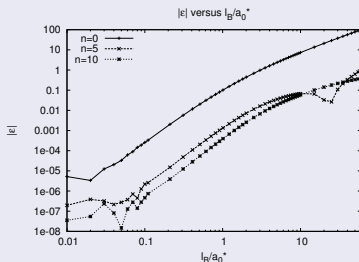
For å sammenlikne perturbasjonsteorien med den eksakte diagonaliseringen definerer vi den relative feilen

Definisjon

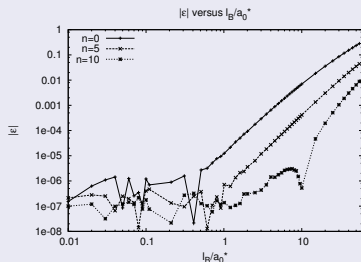
$$|\epsilon| = \left| \frac{\text{eksakt diagonalisering} - \text{perturbasjonsteori}}{\text{eksakt diagonalisering}} \right|$$

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

To dimensjoner



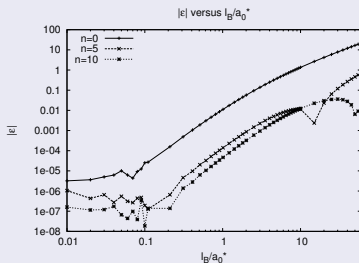
(a) $m = 0$



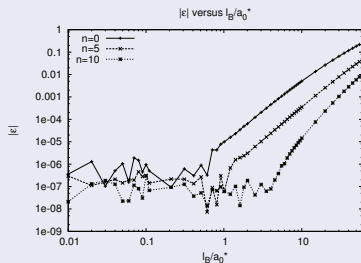
(b) $m = 5$

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

Tre dimensjoner



(a) $l = 0$



(b) $l = 5$

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Sammenlikninger mellom perturbasjonsteori og eksakt diagonalisering

I sammenlikningen ligger det mye data, men vi kan summere hovedresultatene

- Perturbasjonsteori kan ikke brukes for alle verdier av I_B/a_0^*
- Perturbasjonsteori fungerer bedre på høyere liggende tilstander
 - Større prinsippal kvantetall gir flere nodepunkter, hvilket medfører svakere vekselvirkning
 - Større orbitalt kvantetall åpner frihetsgraden ytterligere og gir svakere vekselvirkning
- Perturbasjonsteori fungerer bedre i tre enn i to dimensjoner
 - Frihetsgraden til elektronene blir vesentlig mindre i to dimensjoner, hvilket gir sterkere vekselvirkning

Oversikt

- 1 Introduksjon
 - Intensjonen
 - Definisjon
 - Motivasjon
 - Enpartikkel quantum dot
 - Topartikkel quantum dot
- 2 **Diagonalisering av topartikkelproblemet**
 - Definisjoner
 - Valg av integrasjonsteknikk og matrisekutt
 - Perturbasjonsteori et alternativ?
 - **Resultater av diagonaliseringen**
- 3 Diagonalisering av mangepartikkelproblemet
- 4 Et blikk framover

Matriseelementene

