

AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



SYMULACJE UKŁADÓW NANO- I MEZO-SKOPOWYCH

Laboratorium 2

Wyznaczanie stanów dwuelektronowych metodą czasu urojonego i Hartree-Focka

zrealizował
Przemysław Ryś

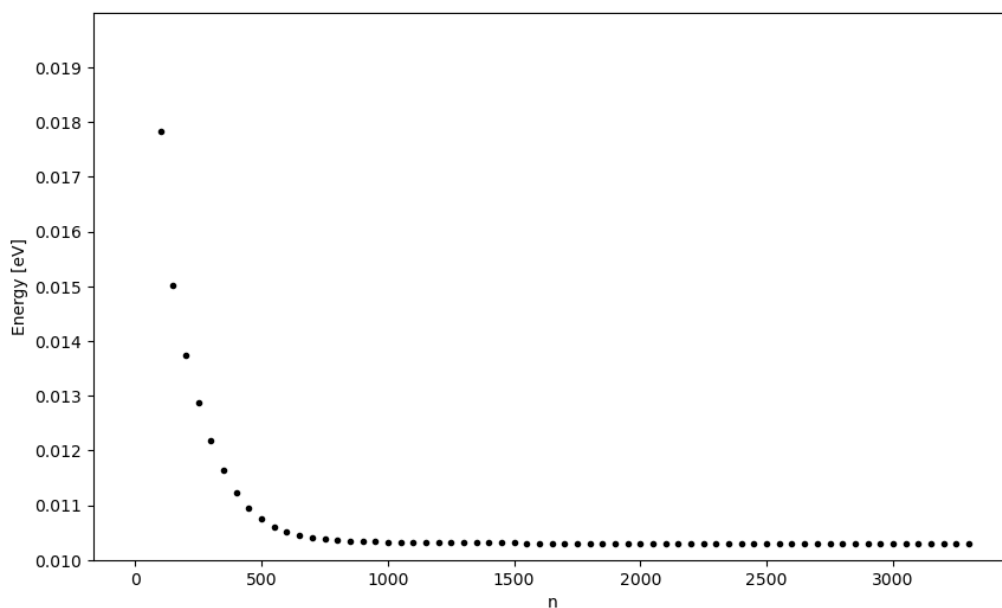
Kraków, 10 Kwietnia 2024

1 Cel ćwiczenia

W sprawozdaniu skupię się na obliczaniu stanów opisujących dwa elektrony uwięzione w quasi-jednowymiarowej kropce kwantowej. Problem rozwiązywany jest metodą czasu urojonego, uwzględniając oddziaływanie w sposób dokładny, a także metodą Hartree-Focka (HF), w której oddziaływanie jest przybliżone przez uśrednione pole od pozostałych elektronów. W celu realizacji zadania wykorzystuję język python wykorzystując odpowiednie pakiety obliczeniowe.

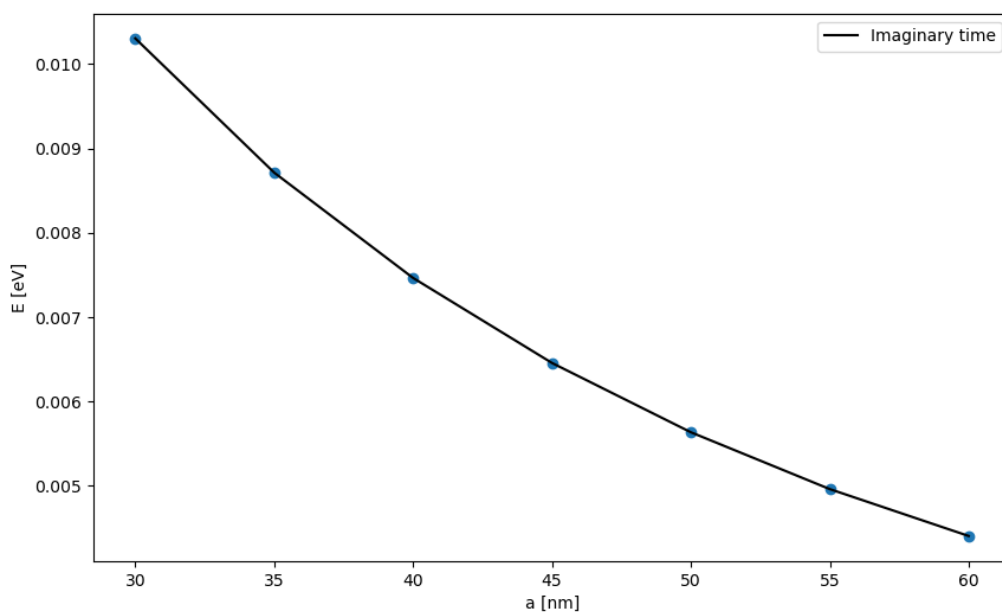
2 Wyniki

Zadanie 1



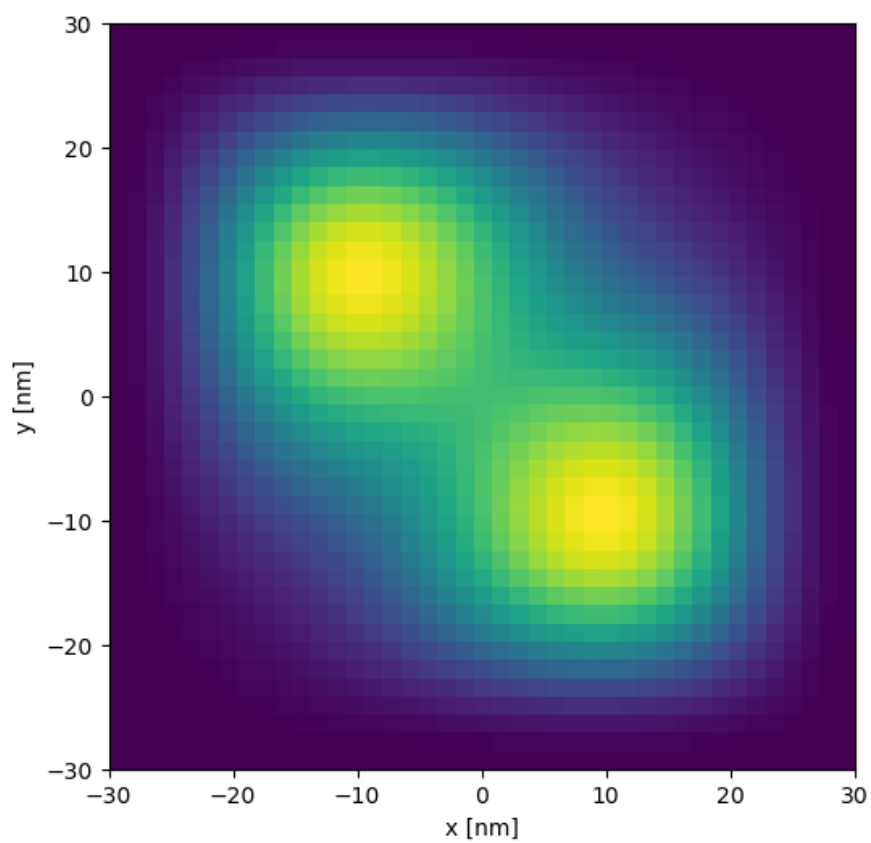
Rys. 1: Wykres energii metodą czasu urojonego od numeru iteracji (co setny punkt)

Zadanie 2

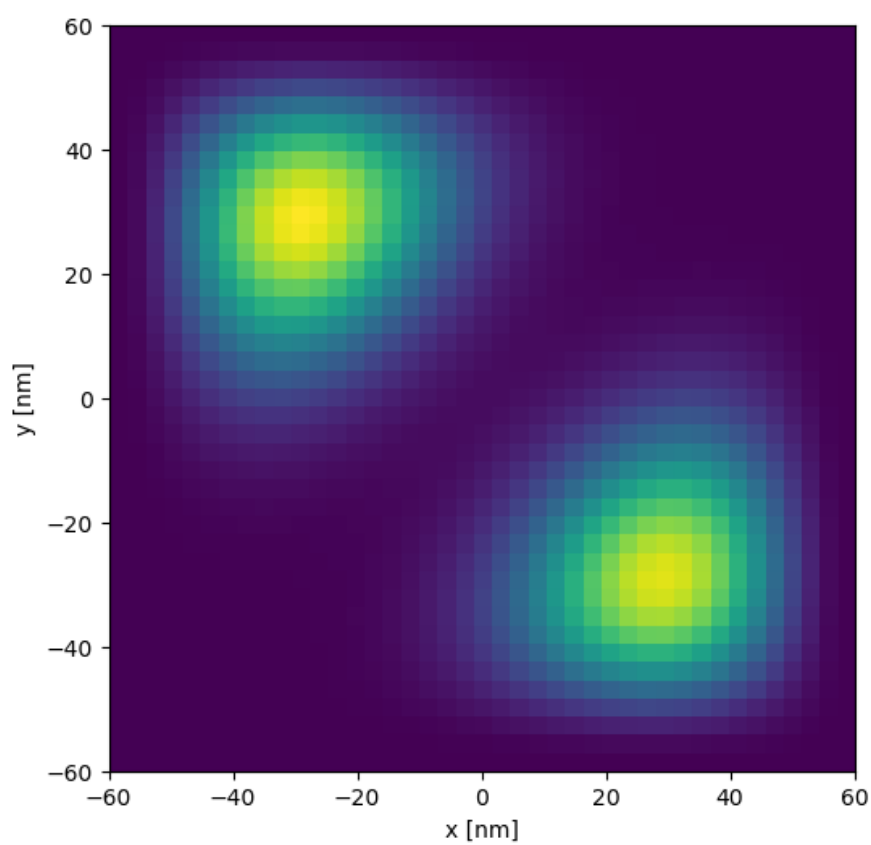


Rys. 2: Wykres energii metodą czasu urojonego w zależności od a w zakresie od 30 nm do 60 nm

Zadanie 3

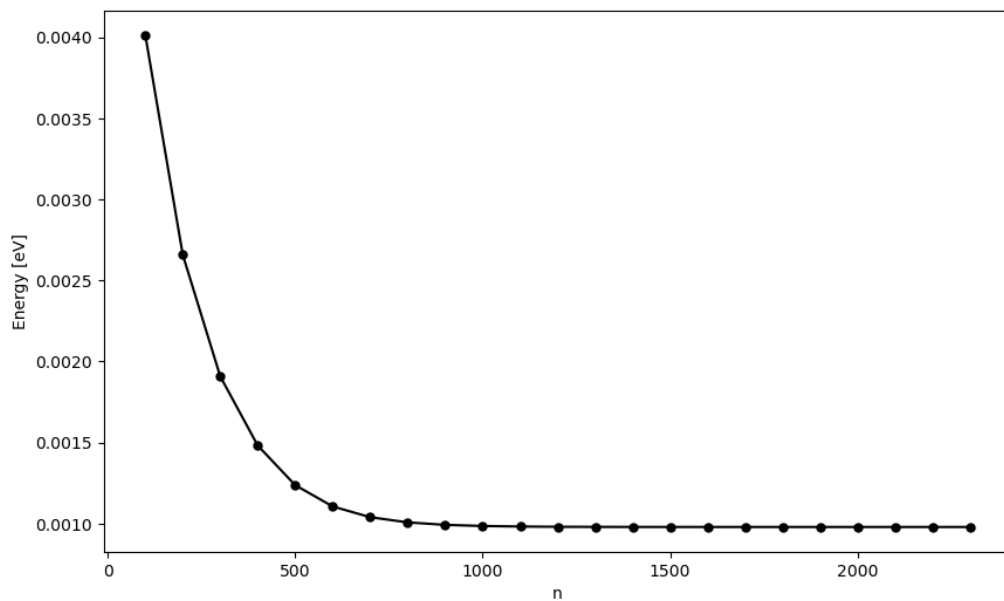


Rys. 3: Mapa kwadratu funkcji falowej uzyskana metodą zaczu urojonego dla $a = 30$ nm

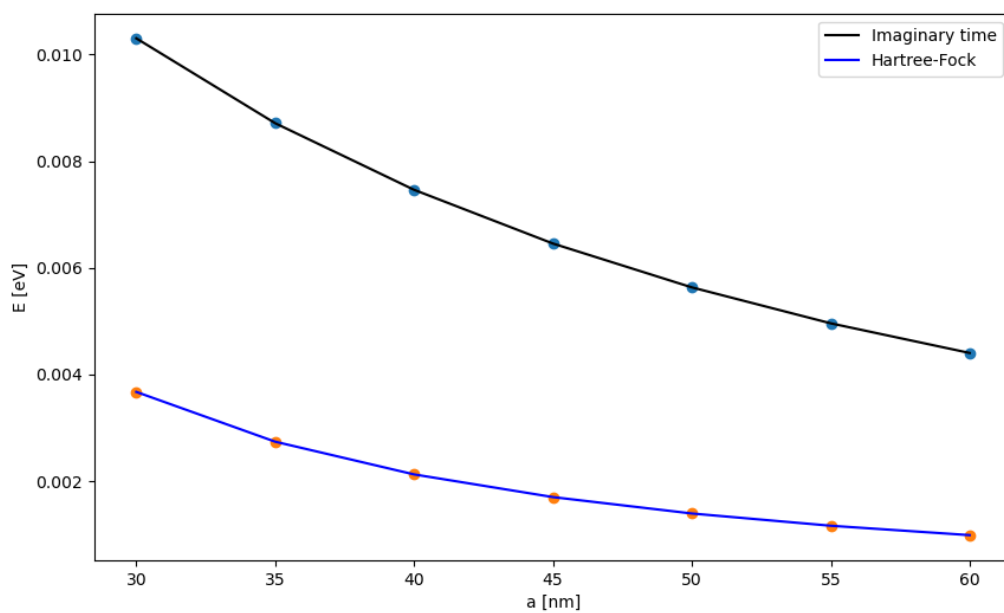


Rys. 4: Mapa kwadratu funkcji falowej uzyskana metodą zaczu urojonego dla $a = 60$ nm

Zadanie 4



Rys. 5: Wykres energii metodą Hartree-Focka od numeru iteracji (co setny punkt)



Rys. 6: Wykres energii metodą czasu urojonego oraz Hartree-Focka w zależności od a w zakresie od 30 nm do 60 nm