Wyznaczanie stanów jednoelektronowych w kropkach kwantowych

A. Mreńca-Kolasińska

5 czerwca 2021; ostatnia aktualizacja 20 marca 2024

1 Wstęp

Tematem zadania jest obliczenie stanów opisujących elektron uwięziony w kropce kwantowej. W zadaniu rozpatrujemy 2-wymiarową kropkę kwantową o potencjale uwięzienia o profilu kwantowego oscylatora harmonicznego, który dobrze sprawdza się w opisie półprzewodnikowych kropek kwantowych (ze względu na wysokie energie wzbudzenia w kierunku z, efektywnie stany znajdują się w stanie podstawowym w z).

Problem sprowadza się do rozwiązania równania Schrödingera

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{1}$$

i znalezienia energii własnych E i funkcji własnych Ψ.

1.1 Metoda Galerkina

Metoda Galerkina polega na rozwinięciu funkcji falowej w bazie

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N} c_i \varphi_i(\vec{r}), \tag{2}$$

gdzie $\varphi_i(\vec{r})$ są funkcjami bazowymi, a c_i współczynnikami rozwinięcia liniowego. Żądamy, aby błąd rozwiązania oszacowany jako

$$\varepsilon = \hat{H}\Psi(\vec{r}) - E\Psi(\vec{r}) \tag{3}$$

był jak najmniejszy. Równanie sprowadzamy do słabej formy poprzez wykonanie iloczynów skalarnych z funkcjami bazowymi; błąd jest ortogonalny do każdej funkcji bazowej. Otrzymujemy równanie

$$\sum_{i=1}^{N} \langle \varphi_j | \hat{H} | \varphi_i \rangle c_i = E \sum_{i=1}^{N} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle c_i, \tag{4}$$

które w postaci macierzowej można zapisać

$$\mathbf{Hc} = E\mathbf{Sc}, \tag{5}$$

co stanowi uogólniony problem własny.

1.2 Obliczenia dla potencjału dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego

Hamiltonian w dwóch wymiarach, wyrażony w jednostkach atomowych ma postać

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x,y), \tag{6}$$

gdzie dla oscylatora harmonicznego $V(x,y) = \frac{1}{2}m^*(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2)$, a m^* jest masą efektywną elektronu w półprzewodniku.

W tym zadaniu skorzystamy z bazy gaussjanów

$$\varphi_i = \frac{1}{(\alpha_x \pi)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-x_i)^2}{2\alpha_x}\right) \frac{1}{(\alpha_y \pi)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(y-y_i)^2}{2\alpha_y}\right), \tag{7}$$

gdzie $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ jest położeniem środka gaussjanu, α_x, α_y opisują jego szerokość.

Do wyznaczenia stanów związanych w potencjale oscylatora harmonicznego niezbędne jest obliczenie elementów macierzy **H** i **S**. Dla funkcji bazowych w postaci gaussjanów wygodnie jest obliczyć je analitycznie. W 2D są one dane wzorami

$$S_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x,y)\varphi_j(x,y)dxdy = \exp(-\tfrac{(x_i-x_j)^2}{4\alpha_x} - \tfrac{(y_i-y_j)^2}{4\alpha_y}), \tag{8}$$

$$H_{ij} = K_{ij} + V_{ij}, \tag{9}$$

$$K_{ij} = -\frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x,y)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi_j(x,y)dxdy = -\frac{1}{2m}\left[\frac{(x_i-x_j)^2-2\alpha_x}{4\alpha_x^2}+\frac{(y_i-y_j)^2-2\alpha_y}{4\alpha_y^2}\right]S_{ij}, \tag{10}$$

$$V_{ij} = \frac{1}{2}m\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(x,y)\left(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2\right)\varphi_j(x,y)dxdy = \frac{1}{2}m\left[\omega_x^2\frac{(x_i+x_j)^2+2\alpha_x}{4}+\omega_y^2\frac{(y_i+y_j)^2+2\alpha_y}{4}\right]S_{ij}. \tag{11}$$

1.3 Zadania do wykonania

Stworzymy siatkę równoodległych $n \times n$ węzłów o położeniach w przedziale $x \in [-a,a]$, $y \in [-a,a]$. Odległości między węzłami Δx. W każdym węźle scentrowana jest jedna funkcja Gaussa (7); łącznie jest $N = n^2$ węzłów. Przyjmujemy $n = 9$ oraz $\hbar\omega_x = 80$ meV, $\hbar\omega_y = 200$ meV (w jednostkach atomowych energia wyrażona jest w $E_h = 27.211$ eV i $\hbar = 1$, zatem w programie nadajemy wartość $\omega_x = 0.08/E_h$ itd.). Przyjmiemy wartość parametrów $\alpha_{x(y)} = \frac{\hbar}{m\omega_{x(y)}}$ oraz masę efektywną $m^* = 0.24$[1].

1. Tworzymy tablice położeń $x_k, y_k, k = 0,\ldots,N-1$ węzłów. Siatka węzłów jest dwuwymiarowa o indeksach (i,j) stosujemy więc mapowanie indeksów $(i,j) \to k$, np. $k = i\cdot n + j$, $i,j = 0,\ldots,n-1$. Przeliczanie k na i,j : $i = k/n$ (dzielenie liczb całkowitych – w Pythonie `k // n`), $j = k\%n$.

$$x_k = x_{i(k)} = -a + \Delta x \cdot i,\ i = 0,\ldots,n-1,$$

$$y_k = y_{j(k)} = -a + \Delta x \cdot j,\ j = 0,\ldots,n-1.$$

   Proszę zaprogramować funkcje (7) zwracające wartość gaussjana w zależności od (x,y), scentrowane na punkcie x_k, y_k. Dla testu narysujemy mapy kilku funkcji bazowych z $\Delta x = 2$ nm i $n = 9$. Siatka będzie symetryczna, tzn. $a = \Delta x \cdot (n-1)/2$. Proszę stworzyć wykresy trzech funkcji bazowych, np. $k = 0, 8, 9$.

2. Proszę zaimplementować wypełnianie tablic elementów macierzy całek przekrywania **S** oraz hamiltonianu **H** według wzorów (8-11), dla dowolnych parametrów ω_x, itd. Proszę rozwiązywać uogólniony problem własny numerycznie z wykorzystaniem funkcji dowolnej biblioteki (w Pythonie można skorzystać z scipy.linalg.eigh, w przypadku języka C np. z gsl_eigen_gensymmv biblioteki GSL).

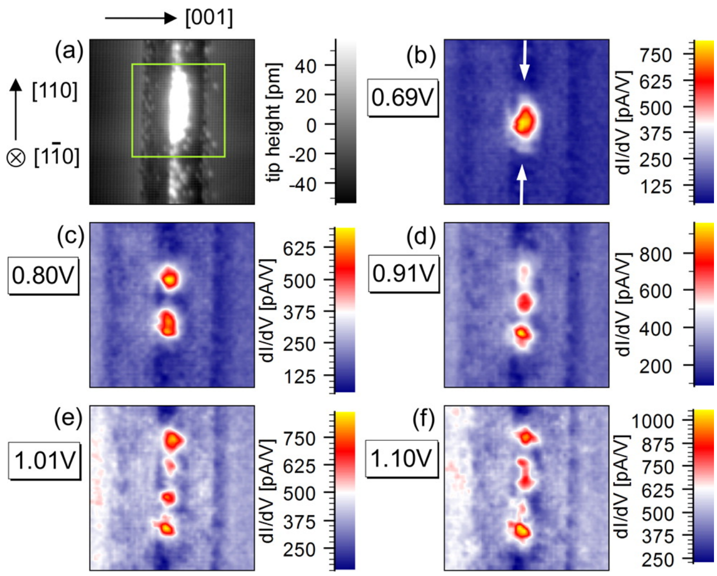
3. Dla wybranego np. $\Delta x = 1$ nm wyliczyć kwadraty modułów funkcji falowej sześciu najniższych stanów i narysować ich mapy (korzystając z zaprogramowanych wcześniej funkcji (7) oraz współczynników rozwinięcia c_i otrzymanych jako wektory własne z rozwiązania problemu własnego).

4. Proszę wyliczyć energie 10 najniższych stanów w funkcji $\hbar\omega_x \in [0,500]$ meV i $\omega_y = 200$ meV i wykonać wykres $E(\omega_x)$. Linią przerywaną proszę narysować wykres energii analitycznej dla kilku najniższych stanów.

5. Porównać wyniki z pracą eksperymentalną [2]; wyniki pomiaru STM stanów w kropce pokazane są na Rys. 1. Proszę spróbować dobrać inne ω_y tak by najniższe 5 stanów było wzbudzonych tylko w x i ponownie wyliczyć funkcje falowe (zadanie 3).

[1] Jest to masa efektywna zmierzona w pracy opublikowanej w Nano Letters dla kropek kwantowych utworzonych w InAs osadzonych w AlAs.

[2] Karen Teichmann *et al*, *Harmonic oscillator wave functions of a self-assembled InAs quantum dot measured by scanning tunneling microscopy*, Nano Lett. 13, 8 (2013)



Rysunek 1: Mapy STM dla różnych napięć na bramce zmierzone w pracy w Nano Letters.