

**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ  
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



**SYMULACJE UKŁADÓW NANO- I MEZO-SKOPOWYCH**

---

## **Laboratorium 1**

**Wyznaczanie stanów jednoelektronowych w kropkach kwantowych**

---

**zrealizował**  
Przemysław Ryś

Kraków, 20 Marzec 2024

## 1 Cel ćwiczenia

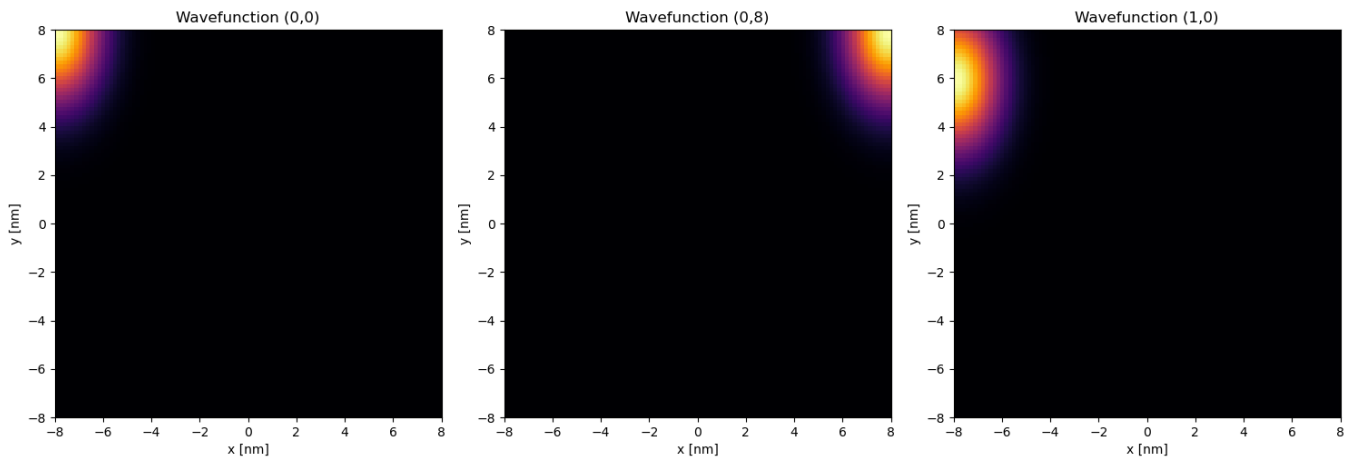
W sprawozdaniu skupię się na analizie stanów opisujących elektron w dwuwymiarowej kropce kwantowej, której potencjał uwięzienia ma profil zbliżony do oscylatora harmonicznego. Metoda Galerkina, stosowana w rozwiązaniu równania Schrödingera, umożliwia wyznaczenie energii własnych oraz funkcji falowych elektronu.

Wykorzystując metodę Galerkina, rozwijamy funkcję falową w bazie funkcji bazowych, minimalizując błąd rozwiązania. Rozwiązanie to sprowadza się do znalezienia energii własnych poprzez rozwiązanie uogólnionego problemu własnego, co umożliwia precyzyjne określenie stanów elektronu w kropce kwantowej.

Analizując potencjał dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego, wyrażamy Hamiltonian w postaci odpowiedniej dla tego zagadnienia. Dla funkcji bazowych w postaci gaussjanów, konieczne jest analityczne obliczenie elementów macierzy  $H$  i  $S$ , co umożliwia wyznaczenie stanów związanych w potencjale oscylatora harmonicznego.

## 2 Wyniki

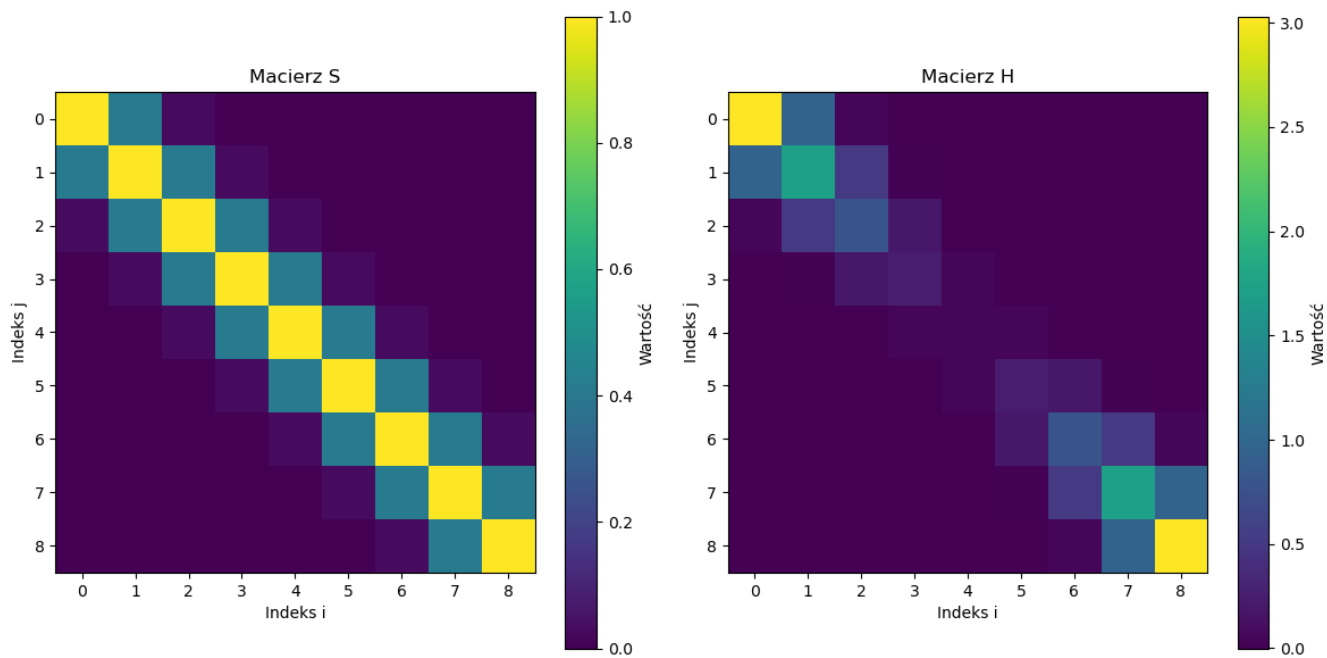
### Zadanie 1



Rys. 1: Wykresy trzech funkcji bazowych, odpowiednio dla  $k = i*n + j = 0, 8, 9$ , gdzie  $i, j = 0, 1, \dots, 8$

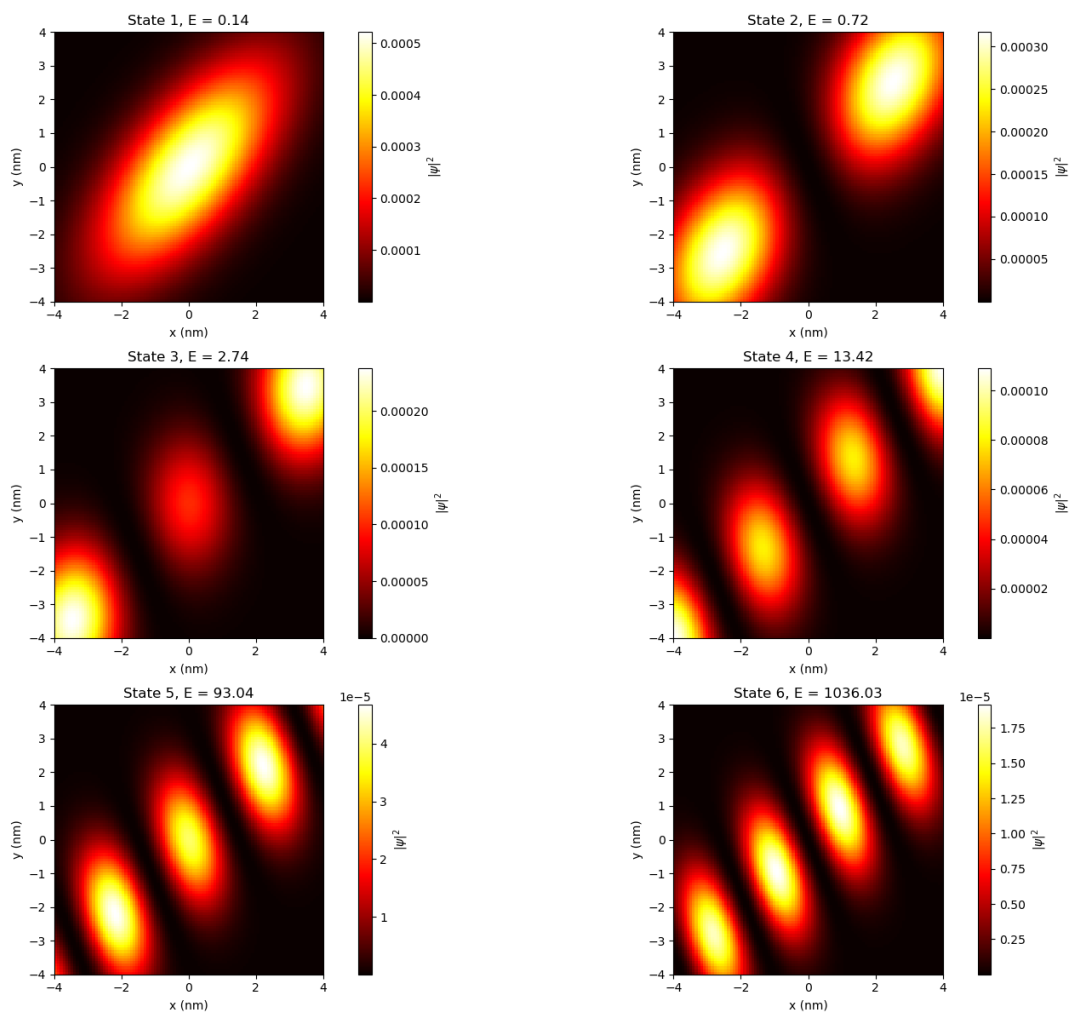
### Zadanie 2

Na rysunku 2 przedstawiono wykresy zagęszczenia tych macierzy w celu sprawdzenia poprawności ich implemetacji.



Rys. 2: Wykres zagęszczenia macierzy S oraz H

### Zadanie 3



Rys. 3: Kwadraty modułów funkcji falowej sześciu najniższych stanów