

Stany własne hamiltonianu w 1D, metoda strzałów

B. Szafran, lab. MOFiT 2023/2024

4 października 2023

Poniżej podane są zadania, ze wskazaniem wyniku do uzyskania. Pod koniec zajęć proszę spakować źródła oraz rysunki / tabele i wysłać przez UPEL. Proszę nie wysyłać dużych plików z danymi, tylko kod generujący wszystkie wyniki oraz skrypt generujący wykresy. Proszę także załączyć pdf z uporządkowanymi wynikami i odpowiedziami na pytania.

Mamy nieskończoną studnię potencjału o długości L dla $x \in (0, L)$. W jej środku będzie obecny dodatkowy potencjał $V(x)$. Równanie $H\Psi = E\Psi$ dla

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (1)$$

rozwiążemy metodą różnic skończonych na siatce $N + 1$ równoodległych punktów $x_i = i\Delta x$, gdzie $\Delta x = L/N$, $i = 0, 1, \dots, N$.

Oznaczamy $\Psi_i = \Psi(x_i)$ oraz $V_i = V(x_i)$. Zdyskretyzowane równanie Schroedingera z ilorazem różnicowym, który zastępuje drugą pochodną można przekształcić do formy pozwalającej wyliczać wartości funkcji falowej w kierunku rosnącego indeksu:

$$\Psi_{i+1} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i) \Delta x^2 \Psi_i - \Psi_{i-1} + 2\Psi_i, \quad (2)$$

Równanie (2) pozwala wyliczyć rozwiązanie w całym pudle jeśli znamy wartości w dwóch kolejnych punktach. Przyjmujemy $\Psi_0 = 0$ (funkcja falowa znika w punkcie $x = 0$, gdzie wstawiona jest nieskończona bariera), oraz $\Psi_1 = 1$ (możemy tak zrobić, ze względu na to, że funkcje własne są określone co do stałej multiplikatywnej). Zakładając wartość E wyliczymy Ψ dla dowolnego x . Akceptowalne fizycznie są tylko te energie, dla których $\Psi_N = \Psi(L) = 0$ znika (nieskończona bariera).

Do rachunków przyjmujemy $L = 100$ nm. Przeliczenie długości na jednostki atomowe: $L[nm] = L[\frac{nm}{a_b}][a_b] = \frac{L}{0.05292}[a_b]$, gdzie $[a_b]$ to atomowa jednostka długości (promień Bohra). W programie wstawiamy $L = 100/0.05292$.

Przyjmiemy masę efektywną elektronu w GaAs $m = 0.067m_0$, m_0 – masa elektronu w próżni jest jednostką masy w układzie atomowym, tak że w programie wstawiamy $m = 0.067$. \hbar jest jednostką działania w jednostkach atomowych, tak że w jej miejsce wpisujemy 1 w programie.

Wstawiając potencjał V_i wyrażony w meV przeliczamy go na jednostki atomowe dzieląc wartość przez 27211.6. Program będzie liczył energie w jednostkach atomowych. Należy je przemnożyć przez 27211.6 przed wydrukiem aby pokazać wyniki w meV.

1

Przyjąć $N = 100$ oraz $V = 0$. Narysować $\Psi_N(E)$ dla $E \in (0, 35\text{meV})$. **(10pkt)**

Następny wykres: Proszę wybrać jedno z miejsc zerowych: narysować funkcję falową dla E blisko miejsca zerowego, oraz dla wartości zwiększonych i zmniejszonych o 5%. Funkcję falową przed narysowaniem normalizujemy (należy policzyć całkę C z kwadratu funkcji falowej po całej długości pudła, a następnie wydzielić funkcję falową przez \sqrt{C}). **(10 pkt)**.

C liczymy tak:

$$C = \int_0^L dx |\Psi(x)|^2 \simeq \Delta x \sum_{i=0}^N \Psi_i^2 \quad (3)$$

Przed narysowaniem funkcji falowej wykonujemy operacje normowania funkcji falowej tak:

$$\Psi_i \equiv \frac{\Psi_i}{\sqrt{C}} \quad (4)$$

dla $i = 0, 1, \dots N$.

2

Napisać program, który znajduje dokładne miejsca zerowe $\Psi_N(E)$ metodą bisekcji. Znaleźć wartości własne z dokładnością do 0.000001 meV. Porównać wyniki z dokładnymi: $E_i = \frac{i^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ **(30pkt)**.

Zwiększyć N do 300, porównać i sprawdzić, na ile poprawia się dokładność. **(10 pkt)**.

3

Zostawiamy $N = 300$. Wprowadzamy barierę potencjału do środka układu: $V_i = 0$ poza $i = N/2$ gdzie wstawiamy potencjał $V_{N/2} = -W$. Narysować 7 najniższych miejsc zerowych w funkcji W od 0 do 1 eV. **(10 pkt)**. (Uwaga, energia stanu podstawowego będzie ujemna – proszę to uwzględnić przy poszukiwaniu stanu podstawowego). Narysować funkcje falowe 4 najniższych stanów dla $W = 0.5$ eV Gdzie zlokalizowany jest stan podstawowy? Wyjaśnić do jakich energii zbiegają wyniki dla wysokiego W **(10 pkt)**. Zilustrować jak zmieniają się funkcje falowe w zależności od W dla 2 najniższych stanów energetycznych **(10 pkt)**. Dlaczego energie stanów o parzystym i słabo zależą od W ? (odpowiedzi udokumentować) **(10 pkt)**.