

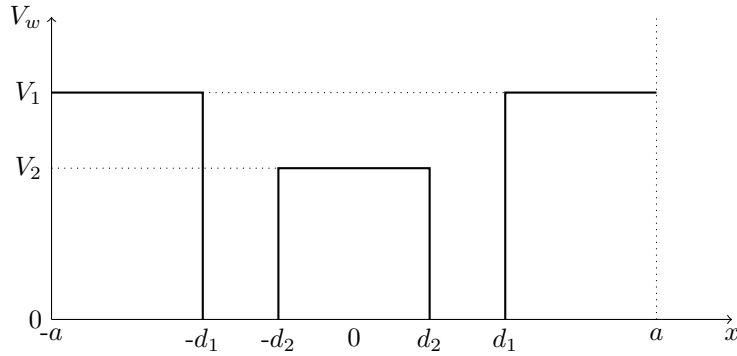
Ewolucja stanów elektronowych w podwójnej kropce kwantowej: metoda Cranka-Nicolson i Askara-Cakmaka

A. Mreńca-Kolasińska

26 czerwca 2021; ostatnia aktualizacja 10 kwietnia 2024

1 Wstęp

Zajmiemy się symulacją przejść między stanami 1-elektronowymi w podwójnej, quasi-jednowymiarowej kropce kwantowej pod wpływem oscylującego pola elektrycznego. Problem rozwiążemy przy pomocy schematu Askara-Cakmaka oraz Cranka-Nicolson (tę drugą metodę zastosujemy tylko do obliczenia pierwszego kroku czasowego). Stany elektronowe w chwili $t = 0$ uzyskamy, stosując metodę różnic skończonych zapisaną w postaci macierzowej.



Rysunek 1: Profil potencjału podwójnej kropki rozważanej w zadaniu.

Rozważamy kropkę kwantową o potencjale uwięzienia skończonej studni kwantowej w kierunku x , przedstawionej schematycznie na Rys. 1. Rozwiążemy równanie Schrödingera zależne od czasu

$$\hat{H}(t)\Psi(x, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t)$$

dla hamiltonianu (wyrażonego w jednostkach atomowych)

$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_w(x) + V_t(x, t), \quad (1)$$

gdzie $V_w(x)$ to potencjał uwięzienia, a $V_t(x, t)$ to potencjał zależny od czasu, opisujący od oscylujące pole elektryczne. Amplitudę pola elektrycznego oznaczamy przez F , a energię potencjalną tego pola¹

$$V_t(x, t) = Fx \sin(\omega t),$$

gdzie ω to częstość oscylacji. Uwaga: pole elektryczne wyraża się w kV/cm (zamiana na jednostki atomowe: $F \left[\frac{kV}{cm}\right] \rightarrow F/E_H \cdot a_0 \times 10^{-4}$, $E_H = 27.211$ eV, $a_0 = 0.0529$ nm, $\omega \left[\frac{1}{s}\right] \rightarrow \omega \cdot 2.418884 \times 10^{-17}$ s). Zakładamy, że dla $t \leq 0$, $V_t(x, t) \equiv 0$, a zależny od czasu oscylujący potencjał uruchamiamy dla $t > 0$. Do obliczenia stanu początkowego rozwiążemy niezależne od czasu równanie Schrödingera

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

metodą różnic skończonych.

¹Amplitudę pola elektrycznego oznaczamy F dla odróżnienia od energii E . Proszę zwrócić uwagę, że dla zachowania odpowiednich jednostek, energia potencjalna pola elektrycznego ma postać $V_t(x) = eFx$, jednak w jednostkach atomowych pomijamy e .

1.1 Metoda macierzowa

Obliczenia stanu początkowego wykonamy na dyskretnej siatce o n węzłach o współrzędnych $x_i = -a + (i+1) \cdot \Delta x$, $i = 0, \dots, n-1$, $\Delta x = 2a/(n+1)$. Zapiszemy pochodną przestrzenną w postaci ilorazu różnicowego

$$\hat{H}\Psi(x_i) \approx -\frac{1}{2m^*} \frac{\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i}{\Delta x^2} + V_w(x_i)\Psi_i, \quad i = 1, \dots, n-2. \quad (2)$$

Warunki brzegowe $\Psi_{-1} = \Psi_n = 0$ (poza zdefiniowaną przez nas siatką) wprowadzimy do równań poprzez pominięcie odpowiednich wyrazów na brzegach w ilorazie różnicowym, tj.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \right|_{x=x_0} &\approx -\frac{1}{2m^*} \frac{\Psi_1 - 2\Psi_0}{\Delta x^2}, \\ \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \right|_{x=x_{n-1}} &\approx -\frac{1}{2m^*} \frac{\Psi_{n-2} - 2\Psi_{n-1}}{\Delta x^2}. \end{aligned}$$

Oznaczmy $\alpha = \frac{1}{2m^* \Delta x^2}$. Rozpisane w sposób dyskretny równanie własne można wyrazić zapisem macierzowym

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi,$$

w którym macierz \mathbf{H} ma postać

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2\alpha + V_w(x_0) & -\alpha & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha & 2\alpha + V_w(x_1) & -\alpha & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\alpha & 2\alpha + V_w(x_{n-2}) & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\alpha & 2\alpha + V_w(x_{n-1}) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Rozwiązując problem własny dla macierzy $n \times n$ \mathbf{H} otrzymujemy n wartości własnych E_n i odpowiadających im funkcji falowych Ψ . Interesują nas stany o najniższych energiach (w przypadku korzystania z funkcji do numerycznego rozwiązania problemu własnego konieczne jest posortowanie otrzymanych energii i stanów własnych).

Powinniśmy otrzymać stany o niskiej energii, związane w kropkach (stan podstawowy: symetryczny oraz pierwszy stan wzbudzony: antysymetryczny). Kolejne stany wzbudzone mają znacznie wyższą energię, dlatego dla niewielkich amplitud oscylującego pola elektrycznego przejścia zachodzą tylko między dwoma najniższymi stanami.

1.2 Schemat Cranka-Nicolson

Schemat Cranka-Nicolson (C-N) zapisany w jednostkach atomowych jest następujący

$$\Psi(x, t_{m+1}) = \Psi(x, t_m) + \frac{\Delta t}{2i} \left[\hat{H}(t_m)\Psi(x, t_m) + \hat{H}(t_{m+1})\Psi(x, t_{m+1}) \right],$$

gdzie $t_m = m\Delta t$, $m = 0, 1, \dots$, $\hat{H}(t_m) = \hat{H} + V_w + V_t(x, t_m)$. Schemat jest niejawny, dlatego rozwiązania dokonamy metodą iteracyjną (k -numer iteracji). **Użyjemy tego schematu tylko dla $m = 0$:**

1. (Pierwsza iteracja, $k = 0$) Przypisujemy $\Psi^{(k=0)} = \Psi(t_{m=0}) \equiv \Psi_{\text{stan podstawowy}}$.
2. Obliczamy: $\Psi' = \hat{H}(t_m)\Psi(t_m) + \hat{H}(t_{m+1})\Psi^{(k)}$ według (4).
3. Obliczamy kolejne przybliżenie: $\Psi^{(k+1)} = \Psi(t_m) + \frac{\Delta t}{2i} \Psi'$.
4. Punkty 2, 3 powtarzamy 10 razy.

Po 10 iteracjach otrzymaliśmy $\Psi^{(k=10)} \equiv \Psi(t_1)$.

1.3 Schemat Askara-Cakmaka

Schemat A-C ma postać

$$\Psi(x, t_{m+1}) = \Psi(x, t_{m-1}) + \frac{2\Delta t}{i} \hat{H}\Psi(x, t_m).$$

Schemat jest jawny (nie ma potrzeby iteracyjnego rozwiązywania). Do obliczenia funkcji falowej w kroku t_2 konieczna jest znajomość funkcji falowej w krokach t_0 i t_1 – te wyliczone są metodą C-N.

Uwagi:

- Krok czasowy Δt dobieramy tak, by schemat A-C był stabilny.
- Mnożenie macierzowe $\mathbf{H}\Psi$ jest czasochłonne. Do przyspieszenia obliczeń można wykorzystać fakt, że większość elementów macierzy H jest równych 0. Zamiast standardowego mnożenia możemy więc obliczyć $\Psi' = H(t)\Psi$ następująco

$$\begin{aligned}\Psi'_i &= -\alpha(\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i) + V_w(x_i)\Psi_i + Fx_i \sin(\omega t)\Psi_i, \quad i = 1, \dots, n-2 \\ \Psi'_0 &= -\alpha(\Psi_1 - 2\Psi_0) + V_w(x_0)\Psi_0 + Fx_0 \sin(\omega t)\Psi_0, \\ \Psi'_{n-1} &= -\alpha(\Psi_{n-2} - 2\Psi_{n-1}) + V_w(x_{n-1})\Psi_{n-1} + Fx_{n-1} \sin(\omega t)\Psi_{n-1}.\end{aligned}\tag{4}$$

- Gdyby jednak ktoś z Państwa zdecydował się na mnożenie macierzowe, należy pamiętać, że funkcje rozwiązujące problem własny nadpisują macierz H . Proszę zachować oryginalną macierz (3) w osobnej zmiennej.

1.4 Zadania do wykonania

Obliczymy energie elektronu w 1-wymiarowej podwójnej kropce kwantowej. Przyjmujemy $n = 99$ oraz parametry materiałowe dla GaAs: $m^* = 0.067$. Proszę przyjąć $a = 25$ nm, $d_1 = 12$ nm, $d_2 = 4$ nm, $V_2 = 0.2$ eV, $V_1 = 0.25$ eV.

1. Stworzymy siatkę n równoodległych węzłów o położeniach w przedziale $x \in (-a, a)$. Odległości między węzłami $\Delta x = \frac{2a}{n+1}$. Tutaj przyjmujemy potencjał dany przez $V_w(x) + Fx$ (bez zależności od czasu). Proszę wykonać wykres energii w funkcji pola elektrycznego w zakresie $F \in [-2, 2]$ kV/cm na dwóch wykresach: dla (a) czterech najniższych stanów, (b) dla tylko dwóch najniższych stanów. Różnica energii dwóch najniższych stanów dla $F = 0$ wynosi $\Delta E = 0.6256$ meV; wyższe stany mają energie o ok. 0.01 eV wyższą.
2. Proszę wykonać wykres funkcji falowych dwóch najniższych stanów w kropce kwantowej dla $F = 0$. Proszę zachować w tablicach **unormowane** funkcje falowe $|0\rangle = \Psi_0(x_i, t = 0)$, $|1\rangle = \Psi_1(x_i, t = 0)$, gdzie 0 i 1 indeksują stany. Funkcja $|0\rangle = \Psi_0(x_i, t = 0)$ opisuje stan wiążący, a $|1\rangle = \Psi_1(x_i, t = 0)$ – antywiązący, będziemy obserwować przejścia między nimi w obecności pola elektrycznego o częstotliwości rezonansowej.
3. Przechodzimy do obliczeń zależnych od czasu. Wracamy do potencjału $V_w(x) + V_t(x, t) = V_w(x) + Fx \sin(\omega t)$. Przyjmujemy $F = 0.08$ kV/cm, $\Delta t = 1$ j.a. i wykonujemy 3×10^6 kroków czasowych. Proszę zaimplementować schematy Cranka-Nicolson i Askara-Cakmaka do obliczeń funkcji falowej $\Psi(t)$. Jako stan początkowy przyjmujemy stan podstawowy $\Psi(t = 0) = |0\rangle$. Co 10000 kroków proszę obliczyć kwadrat modułu rzutu $\Psi(t_n)$ na stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$ oraz ich sumę. Na dyskretnej siatce wielkości te obliczamy

$$\begin{aligned}|\langle \Psi(t_n) | 0 \rangle|^2 &= \left| \sum_i \Psi^*(x_i, t = t_n) \Psi_0(x_i, t = 0) \Delta x \right|^2, \\ |\langle \Psi(t_n) | 1 \rangle|^2 &= \left| \sum_i \Psi^*(x_i, t = t_n) \Psi_1(x_i, t = 0) \Delta x \right|^2.\end{aligned}$$

Proszę wykonać wykresy $|\langle \Psi(t) | 0 \rangle|^2$, $|\langle \Psi(t) | 1 \rangle|^2$ i ich sumy dla rezonansowej częstotliwości oscylacji pola elektrycznego $\omega = \Delta E / \hbar = 95 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ (w j.at. $95 \times 10^{-7} * 2.418884$).

4. **Zadanie dodatkowe** Obliczenia z poprzedniego punktu powtórzyć dla amplitudy pola elektrycznego w zakresie $F \in [0, 0.2]$ kV/cm, po czym wykonać dwuwymiarowy wykres prawdopodobieństwa znalezienia układu w stanie wbudowanym $|\langle \Psi(t_n) | 1 \rangle|^2$ w funkcji t i F . Brak tej części nie powoduje konsekwencji, ale wynik jest ładny i warto go uzyskać.