

# Wyznaczanie stanów jednoelektronowych w kropkach kwantowych

A. Mreńca-Kolasińska

5 czerwca 2021; ostatnia aktualizacja 2 kwietnia 2025

## 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

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

i znalezienia energii własnych  $E$  i funkcji własnych  $\Psi$ .

### 1.1 Metoda Galerkina

Metoda Galerkina polega na rozwinięciu funkcji falowej w bazie

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

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

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

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

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

które w postaci macierzowej można zapisać

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}, \quad (5)$$

co stanowi uogólniony problem własny.

### 1.2 Obliczenia dla potencjału dwuwymiarowego oscylatora harmonicznego

Hamiltonian w dwóch wymiarach, wyrażony w jednostkach atomowych ma postać

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

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

$$\varphi_k(x, y) = \frac{1}{(\alpha_x \pi)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x - x_k)^2}{2\alpha_x}\right) \frac{1}{(\alpha_y \pi)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(y - y_k)^2}{2\alpha_y}\right), \quad (7)$$

gdzie  $\mathbf{r}_k = (x_k, y_k)$  jest położeniem środka gaussjanu,  $\alpha_x, \alpha_y$  opisują jego szerokość.

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

$$S_{kl} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x, y) \varphi_l(x, y) dx dy = \exp\left(-\frac{(x_k - x_l)^2}{4\alpha_x} - \frac{(y_k - y_l)^2}{4\alpha_y}\right), \quad (8)$$

$$H_{kl} = K_{kl} + V_{kl}, \quad (9)$$

$$K_{kl} = -\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x, y) \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi_l(x, y) dx dy = -\frac{1}{2m} \left[ \frac{(x_k - x_l)^2 - 2\alpha_x}{4\alpha_x^2} + \frac{(y_k - y_l)^2 - 2\alpha_y}{4\alpha_y^2} \right] S_{kl}, \quad (10)$$

$$V_{kl} = \frac{1}{2}m \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k(x, y) (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \varphi_l(x, y) dx dy = \frac{1}{2}m \left[ \omega_x^2 \frac{(x_k + x_l)^2 + 2\alpha_x}{4} + \omega_y^2 \frac{(y_k + y_l)^2 + 2\alpha_y}{4} \right] S_{kl}. \quad (11)$$

### 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  $\Delta x$ . 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., a jednostka położenia to promień Bohra  $a_0 = 0.0529$  nm). Przyjmiemy wartość parametrów  $\alpha_{x(y)} = \frac{\hbar}{m^* \omega_{x(y)}}$  oraz masę efektywną  $m^* = 0.24^1$ .

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

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

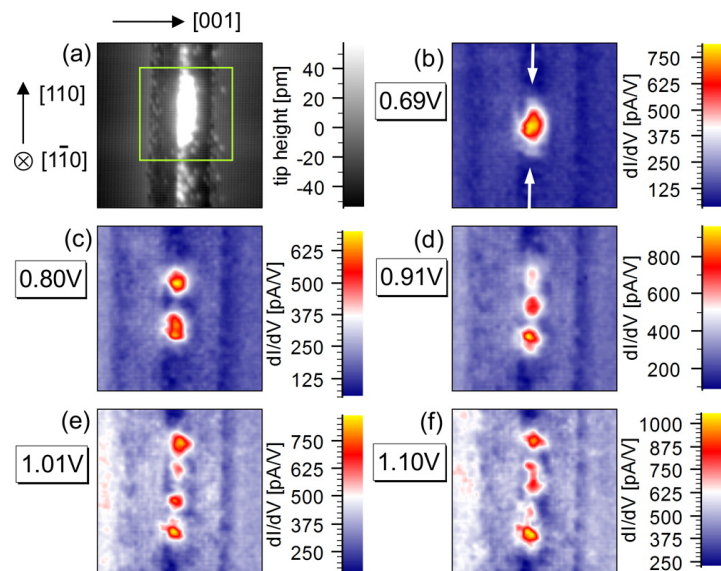
$$y_k = y_{j(k)} = -a + \Delta x \cdot j, j = 0, \dots, n - 1.$$

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  $\mathbf{S}$  oraz hamiltonianu  $\mathbf{H}$  według wzorów (8-11), dla dowolnych (np. przekazanych jako parametr funkcji)  $\omega_x, \omega_y$ , 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, w C++ dodatkowo np. `GeneralizedSelfAdjointEigenSolver` z biblioteki Eigen).
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<sup>2</sup>; wyniki pomiaru STM stanów w kropce pokazane są na Rys. 1. Proszę spróbować dobrać inne  $\omega_y$  tak by najniższe 5 stanów było wzbudzonych tylko w  $x$  i ponownie wyliczyć funkcje falowe (zadanie 3).

<sup>1</sup>Jest to masa efektywna zmierzona w pracy opublikowanej w Nano Letters dla kropek kwantowych utworzonych w InAs osadzonych w AlAs.

<sup>2</sup>K. 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.