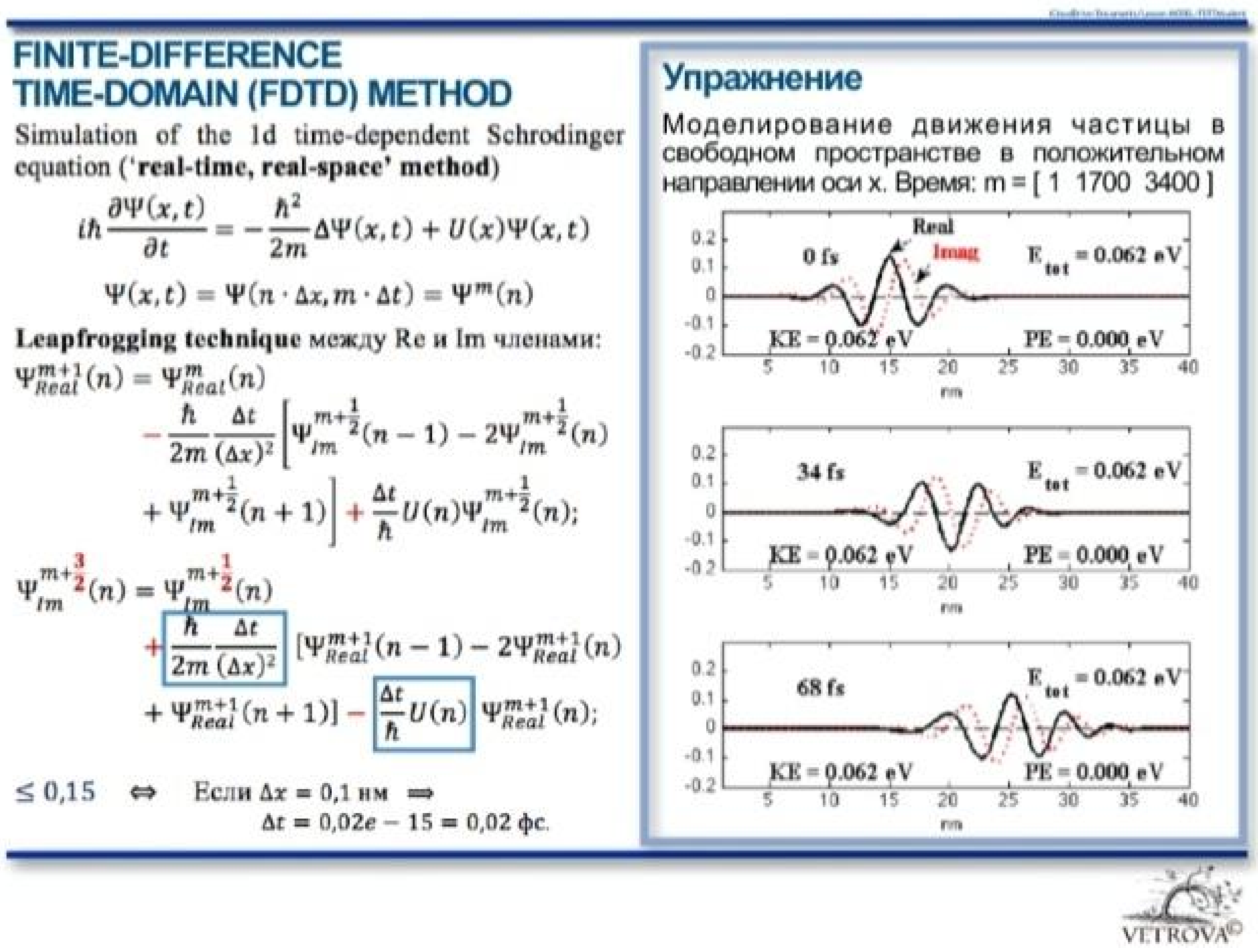
Филимонов Степан РЛ6-31

Лабараторная номер 6

Задача:

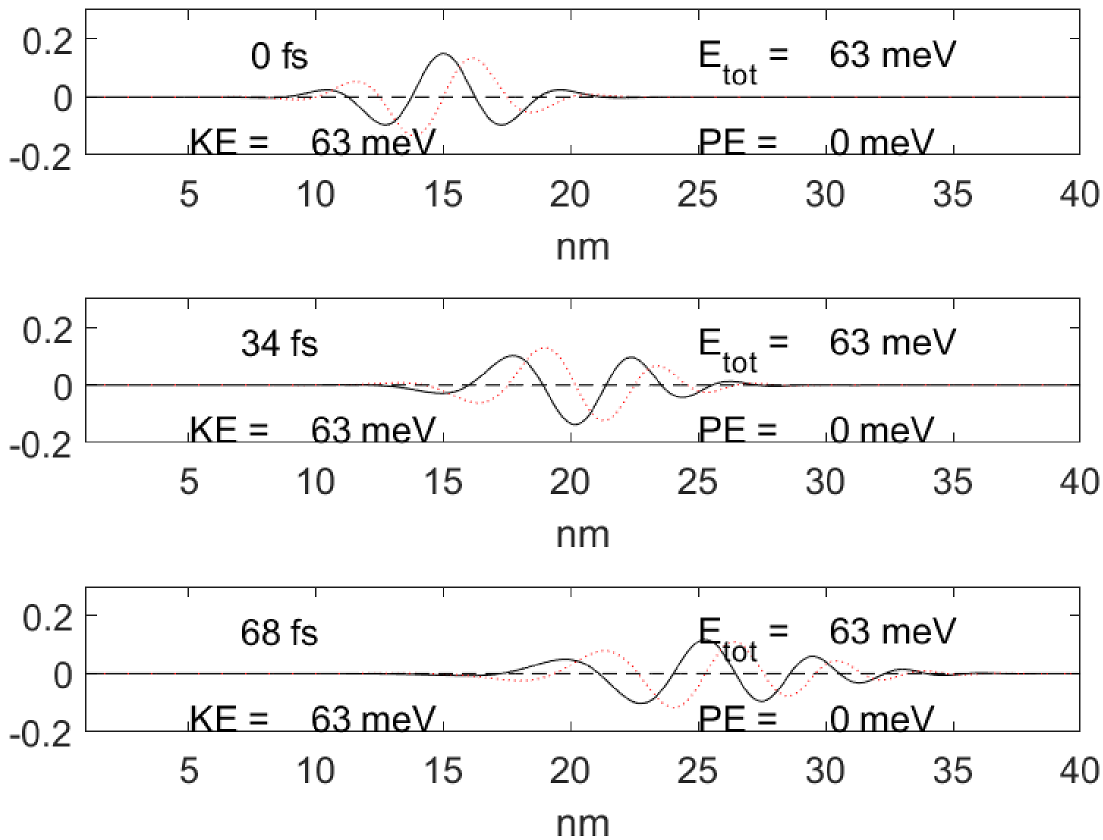
Моделирование движение частицы в свободном пространстве в положительноч направлении оси х.

Фото задания:

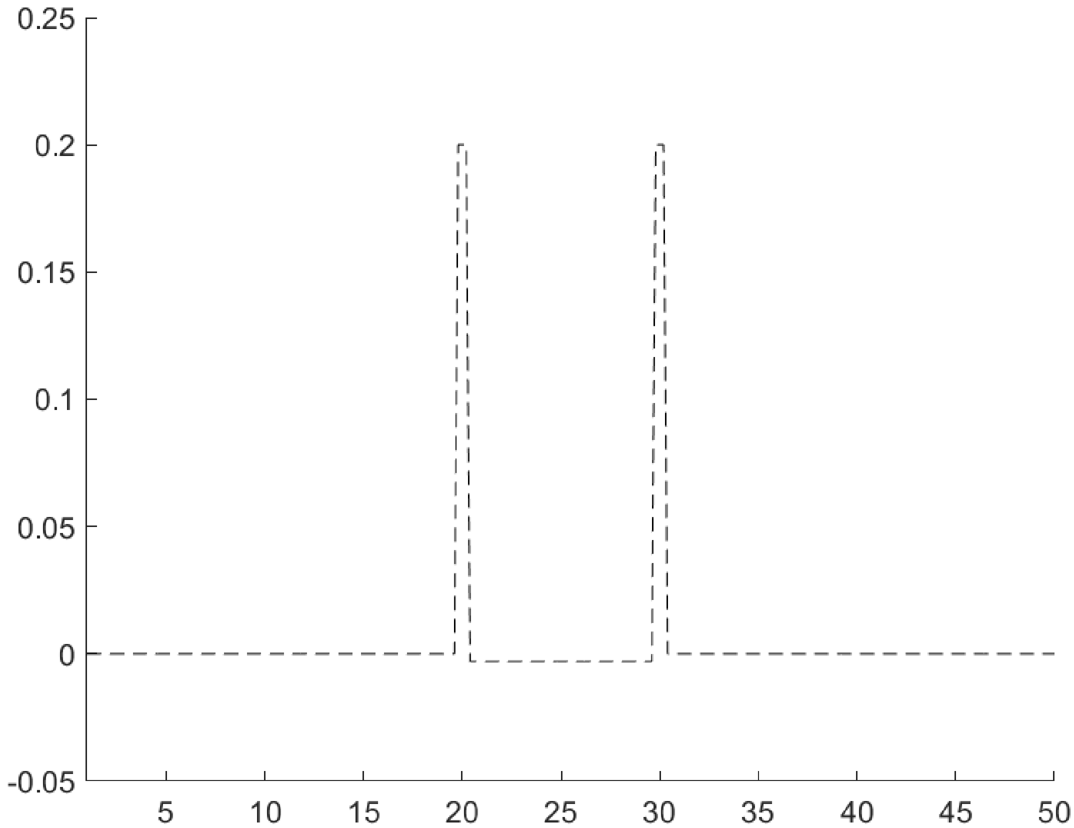


Решение:

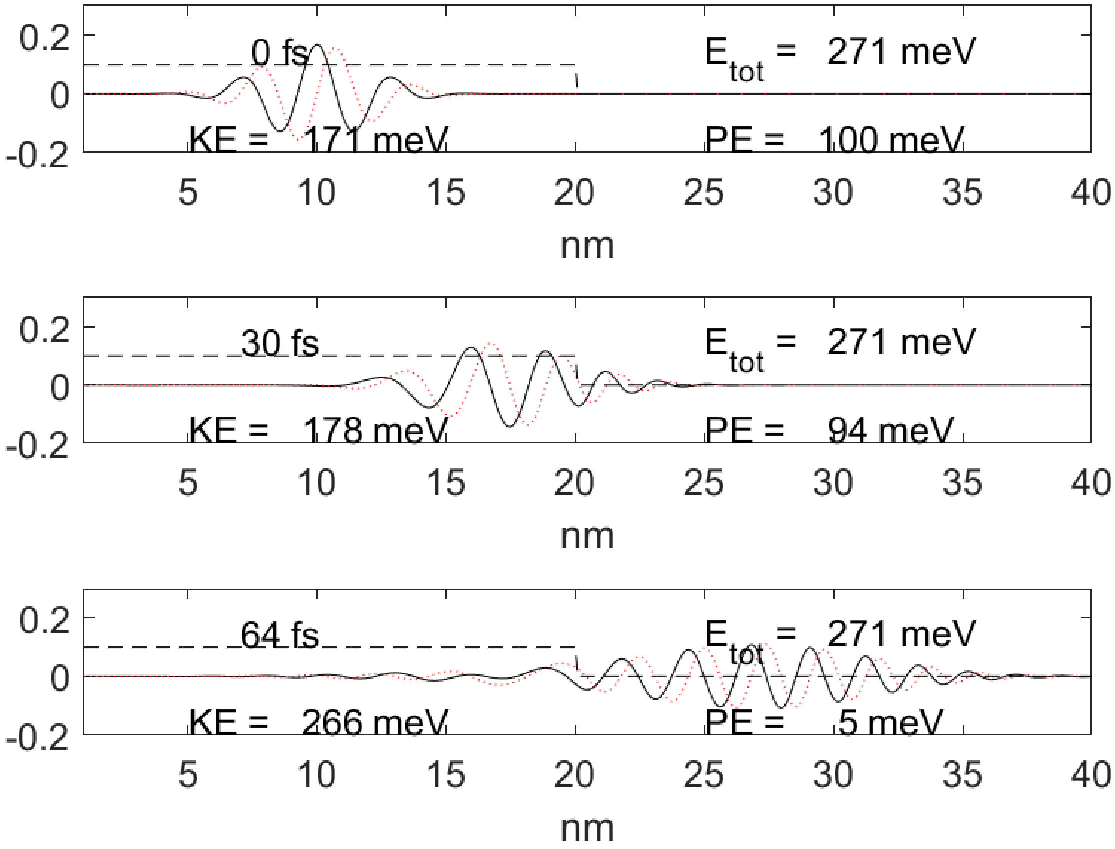
Задание 1:


0 fs
E_{tot} = 63 meV
KE = 63 meV
PE = 0 meV
34 fs
E_{tot} = 63 meV
KE = 63 meV
PE = 0 meV
68 fs
E_{tot} = 63 meV
KE = 63 meV
PE = 0 meV
nm

Задание 2:



Тестовое задание:



Код Matlab:

```
cla reset;
hold on;
load("constans.mat");
```

- **Константы и значения**

```
i = sqrt(-1);
%Np = 400;  % Количество точек в проблемном пространстве Np = 400;
Np = 250;
T = 0;
Nstep=1;
time = [1 1699 1700]; % 1 1699 1700
meff = 1;  % эффективная масс: Si is 1.08, Ge is 0.067, GaAs is 0.55
m = meff * m0;  % Масса электрона
% dx = 0.1e-9; % Размер ячейки dx = 0.1e-9;
dx = 0.2e-9;
% dt = 2e-17; % Временные шаги dt = 0.2e-17;
dt = 1e-16;
```

$$\mathrm{ra} = \frac{\hbar}{2m} * \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$$

```
ra = (hbar / (2 * m)) * (dt /(dx)^2)  % Коэфицент номер 1, должен быть меньше < 0.15
```

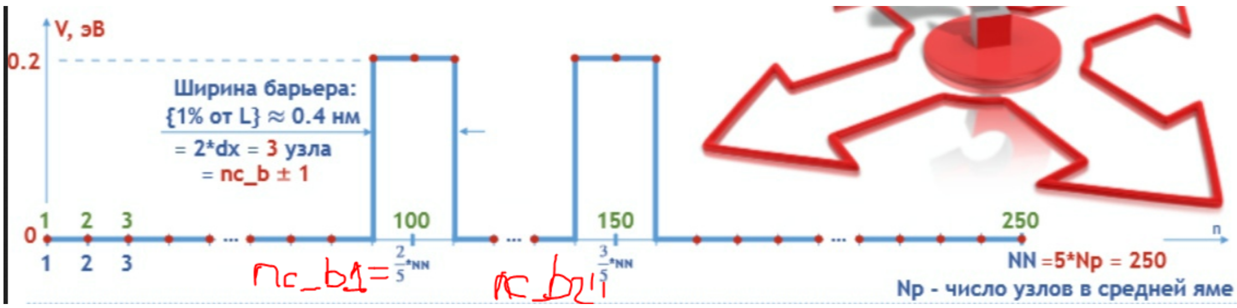
```
ra = 0.1447
```

ra < 0.15 -> возможна связь

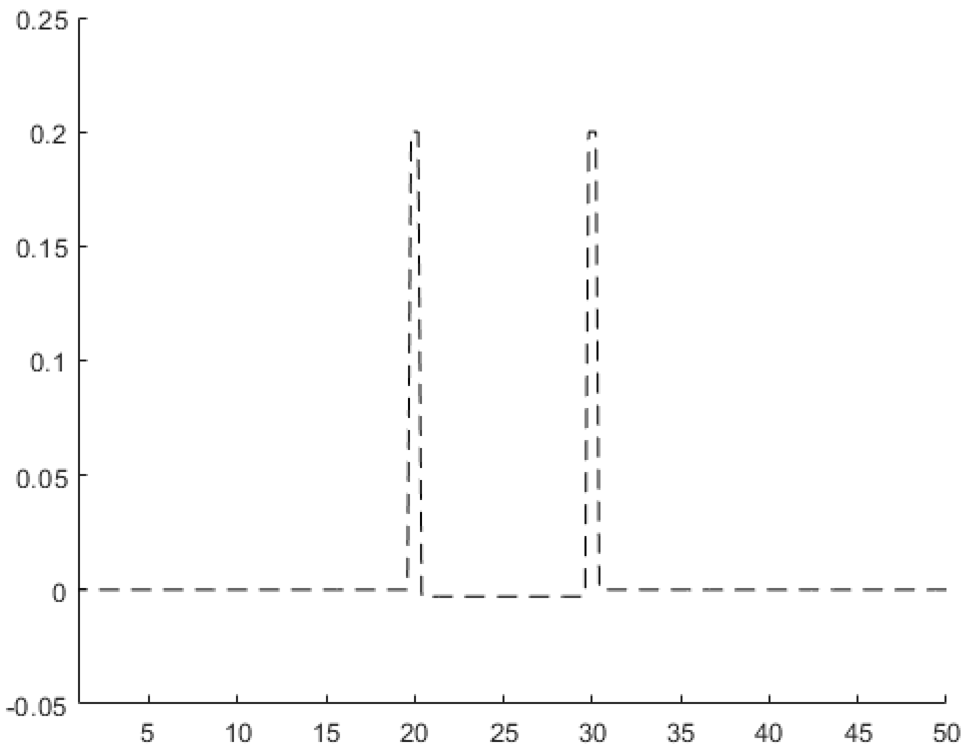
```
DX = dx * 1e9;  % Целое колличество нм
XX = (1:Np) * DX; % Длина в нм для построения графика
Dsquared = (diag(ones(1,Np-1),1) - 2 * diag(ones(1,Np)) + diag(ones(1,Np-1),-1));  % диагональ
```

- **Потенциал**

```
V = zeros(1,Np)'; % 0..- => ' => 0|.. вертикальной сделает
```




```
nc_b1 = 2/5*Np;
nc_b2 = 3/5*Np;
% создание барьеров высотой 0.2эВ
V(nc_b1-1:nc_b1+1)=0.2*eV2J;
V(nc_b2-1:nc_b2+1)=0.2*eV2J;
% имитация напряжение на затворе
V(nc_b1+2:nc_b2-2)=-0.003*eV2J;
V(0.4*Np-1:0.4*Np+1)=0.2*eV2J;
V(0.6*Np-1:0.6*Np+1)=0.2*eV2J;
V(0.4*Np+2:0.4*Np-2)=-0.003*eV2J;
axis([ 1 DX*Np -0.05 0.25 ])
plot(XX,J2eV*V,'--k')
```




```
% saveas(gcf,'MOSFET.png')
```

ВСЕ ЧТО НИЖЕ ДЛЯ ЭТОЙ ЗАДАЧИ ИЗЛИШНЕ.

- **Инициализируем синусоидальную волну в гауссовой огибающей**

```
lambda = 30;  % Длина волны импульса % для того чтобы была как в из усл. 50
% lamda_test = lambda * dx * 1e9
sigma = 20;  % Ширина импульса % для того чтобы была как в из усл. 25
nc = 100;  % для того чтобы была как в из усл. 150
n=(1:Np)';
```

$$P = e^{-\frac{(n - \text{исходное положение})^2}{2 * \text{ширина импульса}^2}} * \left(\cos\left(2\pi \frac{n - \text{исходное положение}}{\text{длина волны}}\right) + i * \sin\left(2\pi \frac{n - \text{исходное положение}}{\text{длина волны}}\right)\right)$$

```
Pulse = exp(-0.5*((n-nc)/sigma).^2).*(cos(2*pi*(n-nc)/lambda) + i*sin(2*pi*(n-nc)/lambda));
PulseReal = real(Pulse); % Реальня часть импульса
PulseImag = imag(Pulse); % Мнимая часть импульса
PulseZ = PulseReal + i*PulseImag; % И мнимая и реальная часть импульса
```

- **Нормируем её и проверяем**

$$N = \frac{\vec{n}}{\left|\vec{n}\right|}$$

```
PulseNormal = sqrt(sum(PulseZ.*conj(PulseZ)));  % Константа нормализации
PulseReal = PulseReal / PulseNormal;
PulseImag = PulseImag / PulseNormal;
PulseZ = PulseReal + i*PulseImag;
control = sqrt(sum(PulseZ.*conj(PulseZ)));
PulseNormal = sqrt(sum(PulseZ.*conj(PulseZ)))  % Константа нормализации
```

```
PulseNormal = 1
```

- **PDTD**

```
for n_step = 1:3
```

- **Главные вычисления**

```
    for mm=1:time(n_step)
        T = T + 1;
```

$$\Psi_{\text{Real}}(n) = \Psi^{m}_{\text{Real}}(n) - \frac{\hbar}{2m} * \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} * \Psi_{\text{Imag}}[(n-1) - 2*(n) + (n+1)] \; + \; \frac{\Delta t}{\hbar} U(n) \Psi_{\text{Imag}}$$

```
        PulseReal = PulseReal - ra*Dsquared*PulseImag + (dt/hbar)*V.*PulseImag;
```

$$\Psi_{\text{Imag}}(n) = \Psi^{m}_{\text{Imag}}(n) + \; \frac{\hbar}{2m} * \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} * \Psi_{\text{Real}}[(n-1) - 2*(n) + (n+1)] - \; \frac{\Delta t}{\hbar} U(n) \Psi_{\text{Real}}$$

```
        PulseImag = PulseImag + ra*Dsquared*PulseReal - (dt/hbar)*V.*PulseReal;
    end
    subplot(3,1,Nstep)
    plot(XX,PulseReal,'k',"Color","black")
    hold on
    plot(XX,PulseImag,':k',"Color","red")
    plot(XX,J2eV*V,'--k') % потенциальная энерги
    hold off
    axis( [ 1 DX*Np -0.2 0.3 ])
    xlabel('nm')
    set(gca,'fontsize',12)
    Nstep=Nstep+1;
```

- **Подписываем график**

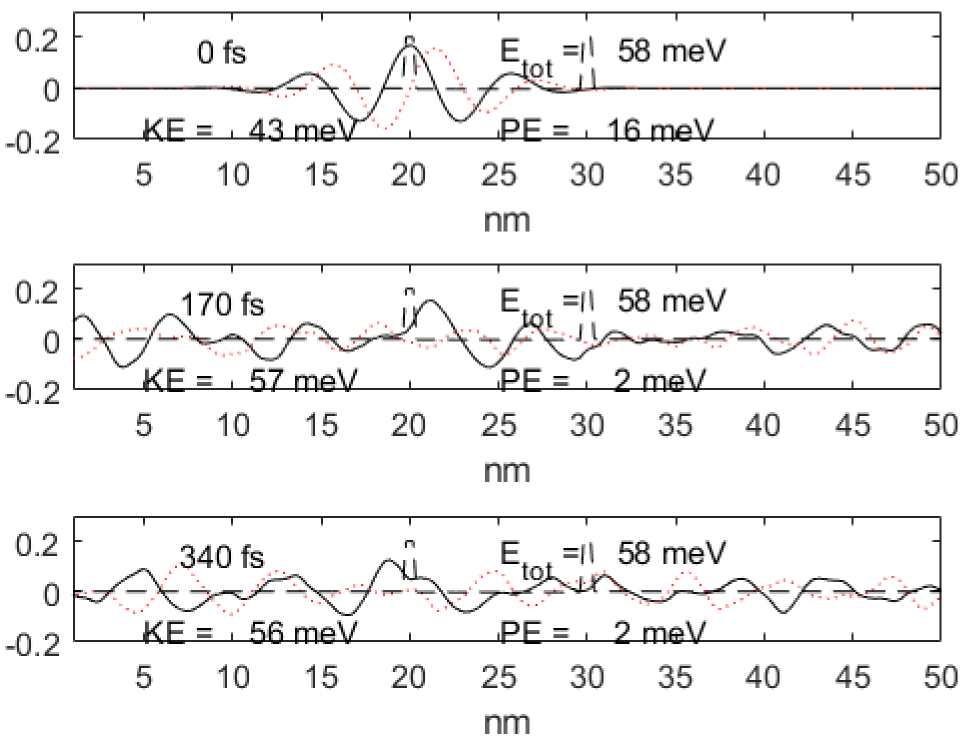
```
    % ------- Проверяем нормализацию -----------------
    PulseZ = PulseReal+i*PulseImag;
    PulseZ'*PulseZ
    PulseNormal = sqrt(sum(PulseZ.*conj(PulseZ)));
    % ------- Вычислите ожидаемые значения ------------
    KE = J2eV * real(-(hbar/dx)^2/(2*m)*PulseZ'*(Dsquared*PulseZ))*1e3; % Кинетическая энергия
    PE = J2eV * PulseZ' * (V.*PulseZ)*1e3; % Потенциальная энергия
    TT = text(5,.15,sprintf('%7.0f fs',T*dt*1e15));
    set(TT,'fontsize',12)
    TT = text(5,-.15,sprintf('KE = %5.0f meV',KE));
```

```
    set(TT,'fontsize',12)
    TT = text(25,-.15,sprintf('PE = %5.0f meV',PE));
    set(TT,'fontsize',12)
    TT = text(25,.13,sprintf('E_t_o_t = %5.0f meV',KE+PE));
    set(TT,'fontsize',12)
```

- **Сохраняем график**

```
    % saveas(gcf,'first_task.png')      % This saves the picture to a file
end
```

```
ans = 1.0001
ans = 1.0004
ans = 1.0007
```



- **Время:**

```
datetime('now')
```

```
ans = datetime
   16-Dec-2021 19:57:56
```