

# Wyznaczanie stanów w jednoelektronowych kropkach kwantowych

Marta Wleklińska

16 lipca 2025

## 1 Wstęp

W poniższym ćwiczeniu rozpatrywana była kropka kwantowa, w której funkcję falową elektronu  $\psi(\mathbf{r})$  chcieliśmy przedstawić w postaci kombinacji liniowej o współczynnikach  $c_i$  funkcji bazowych  $\varphi_i(\mathbf{r})$  (gaussowska)

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Układ był rozpatrywany w dwóch wymiarach, wobec tego funkcje bazowe przyjmowały postać

$$\varphi_k(x, y) = A_x A_y \exp \left[ -B_x (x - x_k)^2 - B_y (y - y_k)^2 \right], \quad (2)$$

przy czym  $A_x, A_y, B_x, B_y$  są stałymi charakteryzującymi szerokość gaussianów.

Problem sprowadza się do rozwiązania równania Schrödingera

$$\hat{\mathbf{H}}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

gdzie hamiltonian składa się z operatora kinetycznego i potencjalnego. Użycie funkcji gaussowskich jako bazy umożliwia obliczenia analityczne dla macierzy Hamiltonianu  $\mathbf{H}$  oraz macierzy przekrywania  $\mathbf{S}$ :

$$S_{ij} = \int_{\mathbb{R}} \varphi_i(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4)$$

## 2 Cel ćwiczenia

Celem ćwiczenia było zapoznanie się z metodą Galerkina. Symulowana była jednoelektronowa kropka kwantowa oraz jej charakterystyka.

## 3 Wyniki

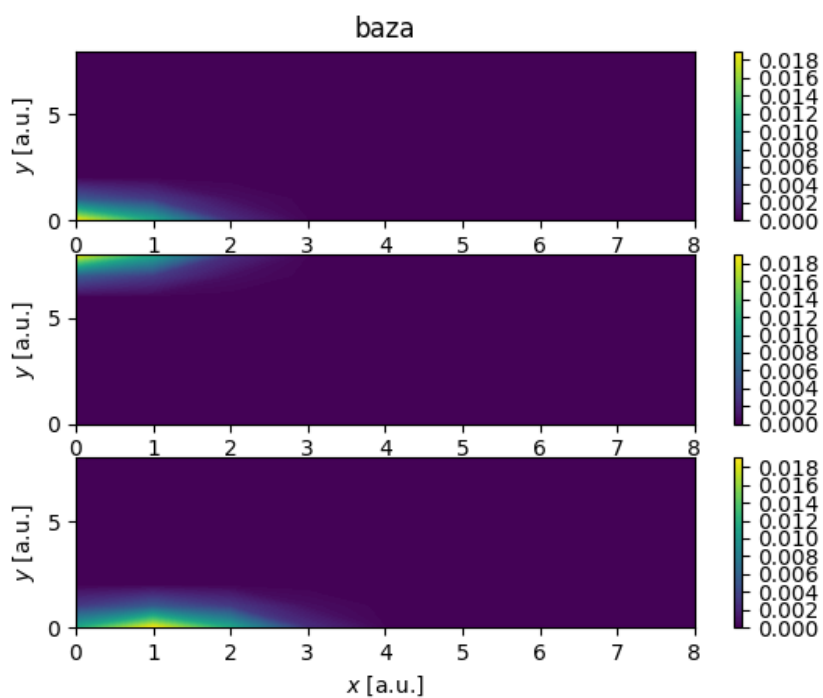
### 3.1 Część 1: Definicja systemu i funkcji bazowych

W tej części zdefiniowano system i funkcje bazowe. W celu weryfikacji graficznie przedstawiono funkcje bazowe w stanach podstawowym, 8 i 9 wzbudzonym, co pokazuje rysunek 1.

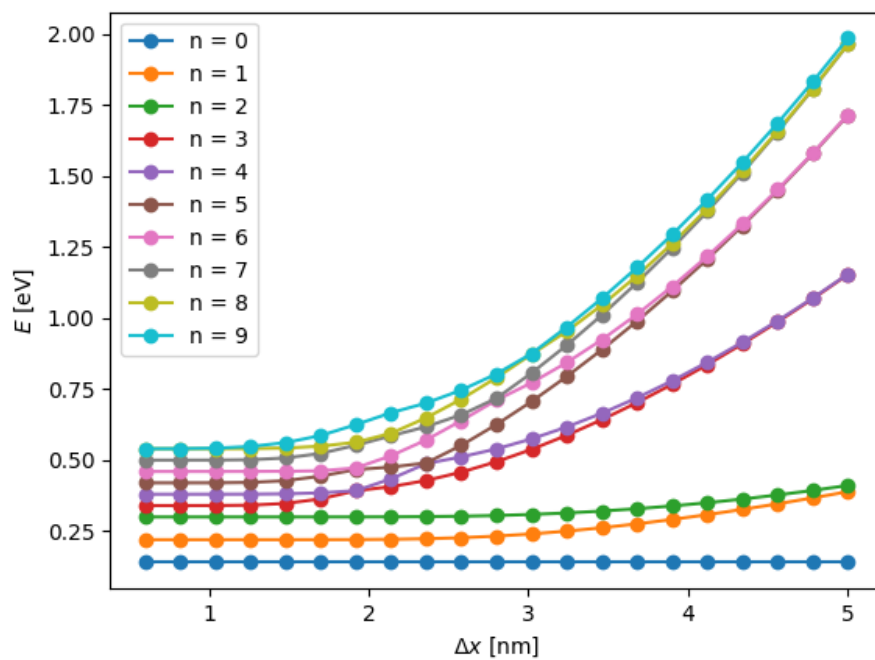
### 3.2 Część 2: Rowiązywanie problemu własnego

Hamiltonian został wyznaczony analitycznie za pomocą wzorów na całki przekrywania. Problem własny rozwiązano numerycznie za pomocą biblioteki `scipy`. Parametry `omega_x`, `omega_y`, które charakteryzują potencjał kroki kwantowej w dwóch wymiarach na ten moment był dowolnie. Wyniki przedstawiono na rysunku 2.

Wyraźnie widać tu, że energia dla kolejnych stanów wzbudzonych jest wyższa od poprzedniego. Zwiększanie `dx` powodowało, że różnice między energiami kolejnych stanów była coraz większa.



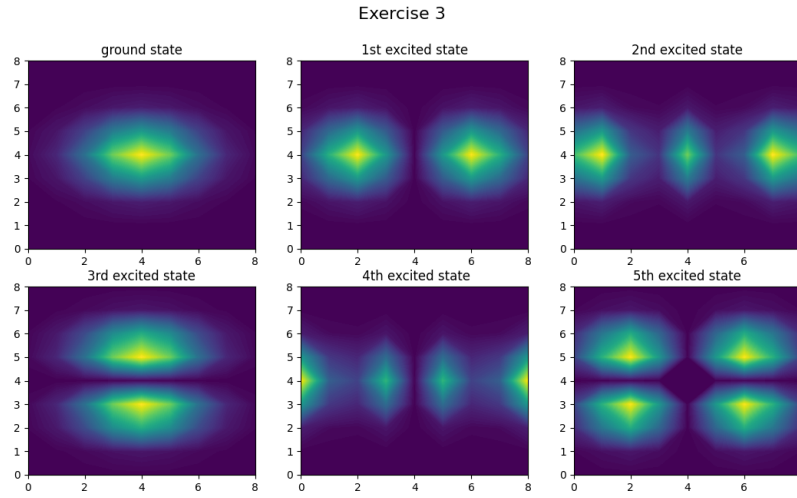
**Rysunek 1:** Funkcje bazowe dla  $k = 0, 8, 9$



**Rysunek 2:** Zależność energii kolejnych stanów wzbudzonych dla różnych wartości  $\Delta x$

### 3.3 Część 3: Rozkłady prawdopodobieństwa

Kolejna część obejmowała przedstawienie rozkładu prawdopodobieństwa dla wyznaczonej funkcji falowej najniższych stanów. Przy stałych wartościach  $\omega_x = 0.08$  / Energy\_hartree,  $\omega_y = 0.2$  / Energy\_hartree wypłotowane zostały mapy ukazane na rysunku 2. Zauważmy, że pierwsze trzy stany są wzbudzone oraz piąty tylko w kierunku



**Rysunek 3:** Kolejne stany własne kropki w bazie gaussowskiej przy stałych wartościach  $\omega_x$ ,  $\omega_y$

$x$ , a 4 i 6 - wykazują również w kierunku  $y$ .

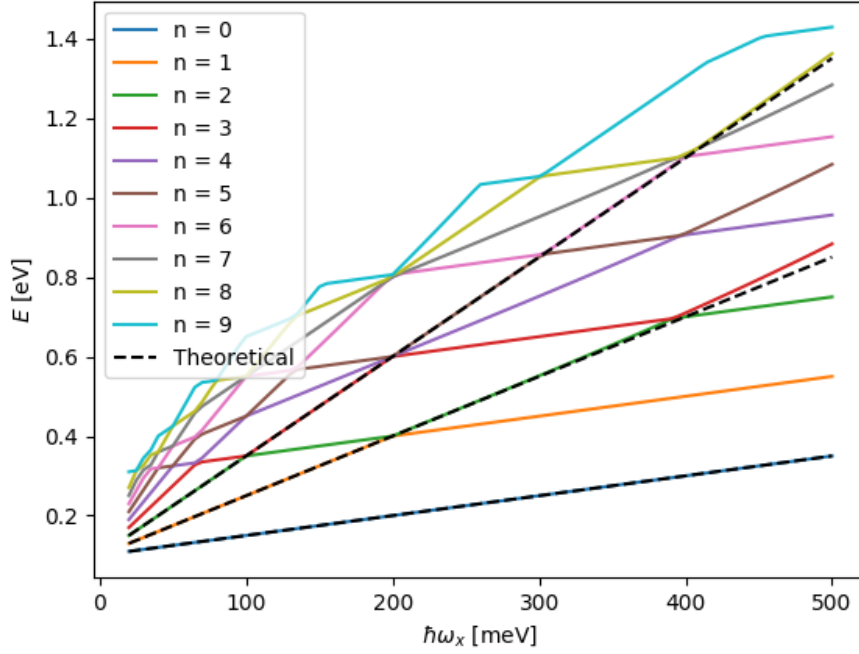
### 3.4 Część 4: Energia

Kolejnym punktem było wyznaczenie zależności energii od  $\hbar \omega_x$  przy stałej wartości  $\omega_y = 200$ . Dodatkowo, wyniki dla kolejnych stanów można było porównać z teoretycznymi wynikami wynikającymi z energii własnych uzyskanych z równania Schrödingera dla potencjału oscylatora harmonicznego

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega. \quad (5)$$

Wyniki oraz porównanie zostało przedstawione na rysunku 4. Dla oscylatora harmonicznego oczekujemy liniowej zależności energii od  $\omega$ . Wyniki numeryczne pokazują, że dla niższych stanów taka zależność jest zachowana, ale dla wyższych stanów pojawiają się odchylenia, co może wynikać z efektów numerycznych lub przybliżenia bazowego.

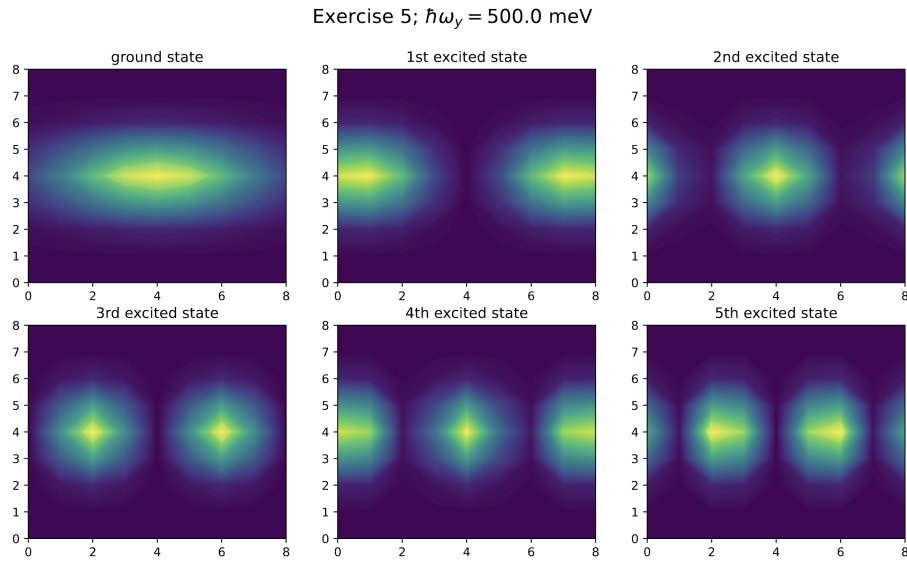
## Exercise 4



**Rysunek 4:** Porównanie zależności energii  $E$  od  $\hbar\omega_x$  przy stałej wartości  $\omega_y$ . Porównanie dotyczy kolejnych stanów wzbudzonych uzyskanych numerycznie oraz wartości teoretycznej podanej wzorem (5)

### 3.5 Część 5: Porównanie z eksperymentem

Ostatnia część polegała na odpowiednim dobraniu parametru  $\omega_y$  tak, aby zgadzały się z wynikami eksperymentalnymi [1]. Głównym kryterium było dobranie go tak, aby wzbudzenia występowały jedynie w  $x$ . Przyjęto wartość  $\omega_y = 0.5 / \text{Energy\_hartree}$ , a rozkłady zostały przedstawione na rysunku 5. Jak wspomniano, wzbudzenia występują dla



**Rysunek 5:** Kolejne stany kropki kwantowej przy  $\omega_y = (0.5 / \text{Energy\_hartree})$  dobranym tak, aby wzbudzenia występowały tylko dla osi  $x$ . Wartość  $\omega_x = (0.08 / \text{Energy\_hartree})$  jest stała

tych parametrów jedynie w kierunku  $x$ .

## 4 Podsumowanie

Ćwiczenie polegało na symulacji jednoelektronowej kropki kwantowej w dwóch wymiarach za pomocą metody Galerkina. Analizowane były charakterystyki systemu, w tym funkcje bazowe metody, rozkłady prawdopodobieństwa kolejnych stanów, wzbudzenia w kierunkach  $x$  i  $y$  oraz zależność energii od  $\omega_x$  - parametru charakteryzującego potencjał kropki w odpowiednim kierunku.

## Literatura

- [1] K. Teichmann, M. Wenderoth, H. Prüser, K. Pierz, Hans W. Schumacher, and R. G. Ulbrich. Harmonic oscillator wave functions of a self-assembled inas quantum dot measured by scanning tunneling microscopy. *Nano Letters*, 13(8):3571–3575, 2013.