

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

Marta Wleklińska

8 kwietnia 2025

1 Wstęp

Ćwiczenie polegało na symulacji układu w podwójnej kropce kwantowej: czyli układu skończonej studni potencjału V_1 na długości $x \in (-\infty, -d_1) \cup (d_1, \infty)$, w której znajduje się bariera o wysokości V_2 przy $x \in (-d_2, d_2)$ ($d_1 > d_2$).

Problem będzie rozpatrywany w czasie, wobec tego hamiltonian zależny od czasu przyjmie postać

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

przy czym potencjał uwięzienia $V_w(x)$ będzie opisywał uwięzienie w danej studni, a zależny od czasu czynnik $V_t(x, t)$ opisuje wpływ pola elektrycznego dany wzorem

$$V_t(x, t) = Fx \sin(\omega t). \quad (2)$$

1.1 Schemat Cranka–Nicolson

Procedura znajdowania funkcji falowej będzie podzielona na dwie części:

1. *Primowana* funkcja falowa Ψ'_i będzie zdefiniowana jako

$$\Psi'_i = -\alpha (\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} - 2\Psi_i) + V_w(x_i)\Psi_i + Fx_i \sin(\omega t)\Psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n-2, \quad (3)$$

przy odpowiednich funkcjach Ψ_0, Ψ_{n-1} .

2. Przybliżenie funkcji Ψ

$$\Psi^{(k+1)} = \Psi(t_i) + \frac{\Delta t}{2i} \Psi^{(k)}. \quad (4)$$

Powyższą procedurę powtarzamy dziesięciokrotnie, uzyskując $\Psi^{(k=10)} \equiv \Psi(t_1)$.

1.2 Schemat Askara–Cakmaka

Do opisu systemu poprzez schemat Askara–Cakmaka, użyjemy wyniku początkowego ze schematu Cranka–Nicolson. Funkcja falowa w kolejnych krokach czasowych będzie przyjmowała postać

$$\Psi(x, t_{m+1}) = \Psi(x, t_{m-1}) - 2\Delta t i \hat{\mathbf{H}} \Psi(x, t_m). \quad (5)$$

W symulacji w jednostkach atomowych przyjęliśmy wartość kroku czasowego $\Delta t = 1$.

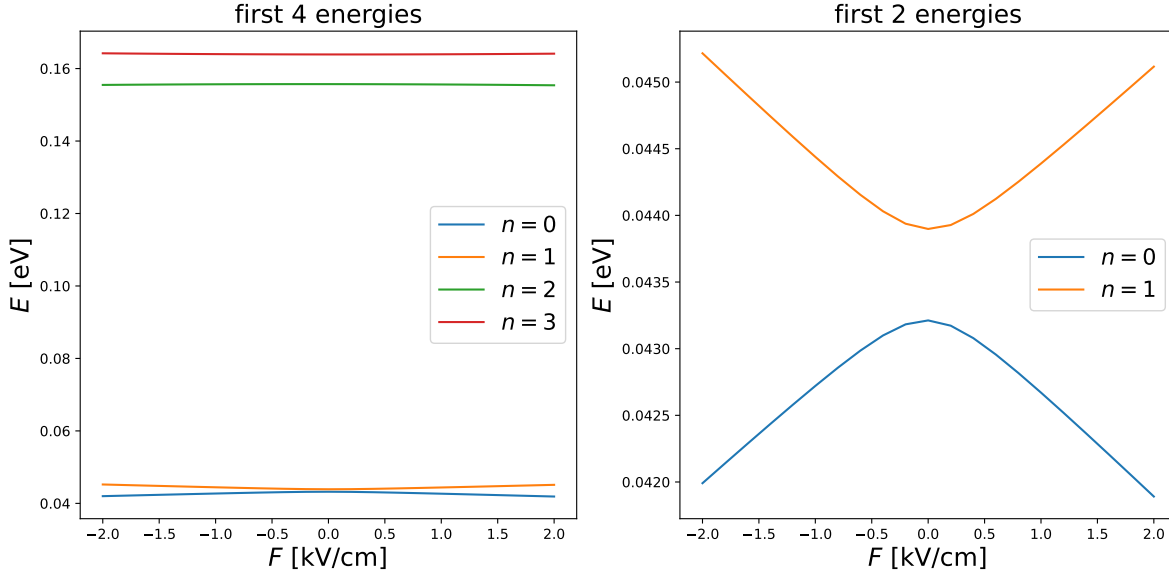
2 Wyniki

2.1 Energia układu w funkcji amplitudy pola elektrycznego

Pierwsza część ćwiczenia polegała na zdefiniowaniu systemu podwójnej studni potencjału i zbadanie układu przy hamiltonianie niezależnym od czasu

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_w(x) + Fx. \quad (6)$$

Zbudowany został zatem hamiltonian i rozwiązany problem własny, w którym mogliśmy znaleźć odpowiednie energie własne. Pierwsze cztery energie zostały przedstawione na rysunku 1. Dodatkowo, pierwsze dwa stany zostały przedstawione



Rysunek 1: Zależność energii od amplitudy pola elektrycznego F

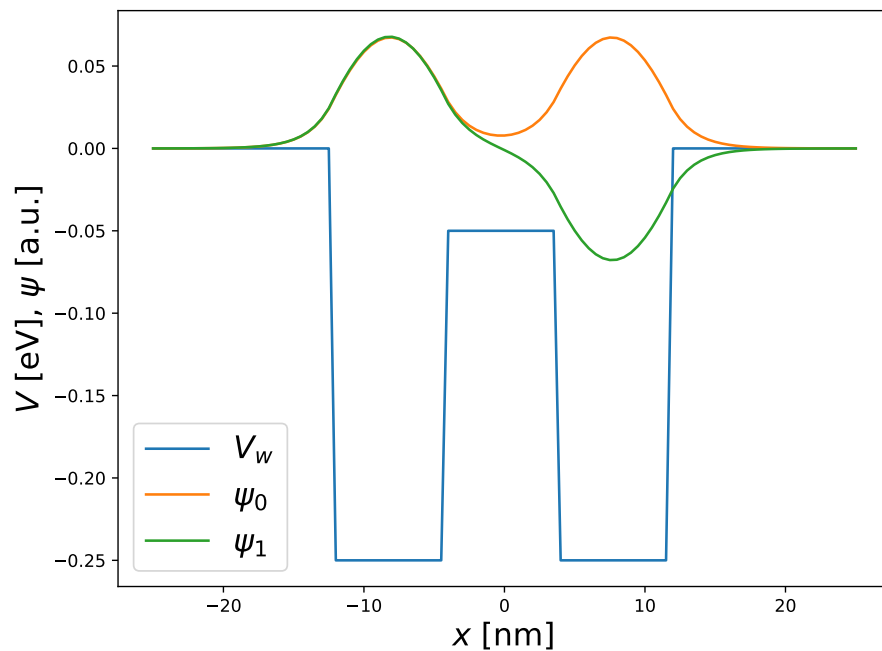
w przybliżeniu. Na pierwszej zależności od razy możemy zauważyć, że pierwsze dwie energie oraz trzecia z czwartą są zgrupowane blisko siebie. Przybliżając jednak każde z nich możemy zauważyć, że dla stanu $n = 0$ i $n = 1$ energie monotonicznie zbliżają się do siebie przy $F \in [-2; 0^-)$ oraz monotonicznie oddalają się od siebie przy $F \in (0^+; 2]$. Energie trzecia oraz czwarta są stałe w funkcji amplitudy F . Porównując wyniki dwóch pierwszych energii z pozycją [1], otrzymujemy delikatnie różniące się wyniki względem zachowania się pierwszego stanu, jako że ten przy $F \in (0^+; 2]$ - maleje, a nie rośnie, jak w naszych wynikach. Wynika to z serii przybliżeń (1D, 1 elektron), które zostały zaimplementowane w symulacji.

2.2 Układ bez pola elektrycznego

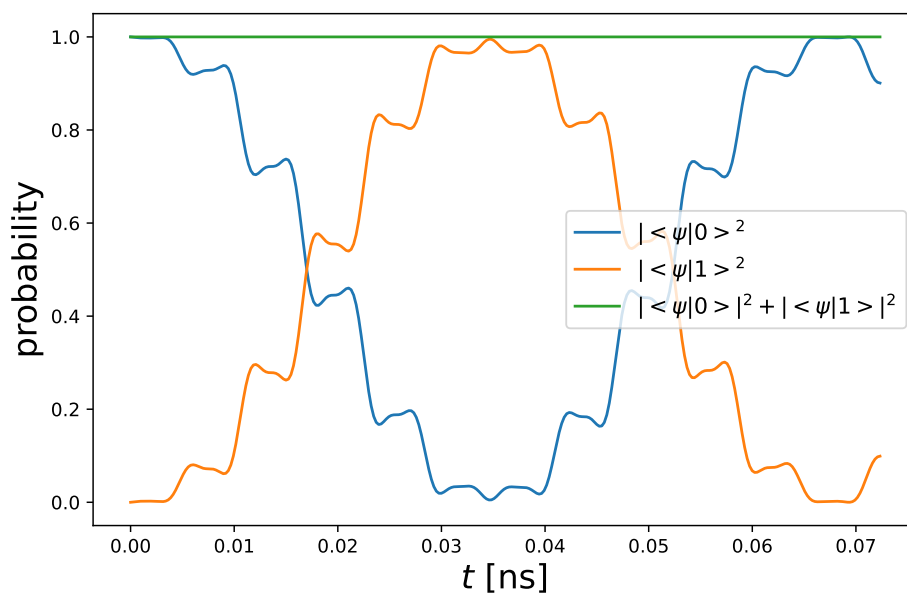
Kolejne ćwiczenie polegało na znalezieniu funkcji falowych przyjmując wartość $F = 0$. Ponownie, procedura obejmowała zbudowanie hamiltonianu i rozwiązanie problemu własnego, otrzymując odpowiednie wektory własne, które zostały następnie unormowane. Wyniki kolejnych $n = 0, 1$ funkcji falowych wraz z potencjałem studni zostały przedstawione na rysunku 2. Przy $n = 0$ funkcja falowa przyjmuje niezerowe wartości dla całej dziedziny układu, podczas gdy pierwszy stan ma kształt antysymetryczny, w którym funkcja falowa w pierwszej studni przyjmuje wartości nieujemne - a w drugiej niedodatnie.

2.3 Badanie zależności czasowej z pola elektrycznego

Trzecia część obejmuje zbadanie układu z hamiltonianem (1) przy potencjale pola elektrycznego (2). Przyjmujemy amplitudę $F = 0.08$, krok czasowy $dt = 1.0$, $\omega = 104.22e-7 * 2.418884$ (wartość odpowiadająca różnicy energii między stanami) i przeprowadzamy symulację dla $3e6$ kroków czasowych. Aby przedstawić wyniki symulacji graficznie, wyznaczyliśmy kwadrat modułu rzutu funkcji falowej $\Psi(t_n)$ na stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$. Na rysunku 3 pokazano prawdopodobieństwa znalezienia układu w tych stanach. Wyraźnie widać sinusoidalny charakter każdej z krzywych. Jest on jednak



Rysunek 2: Funkcje falowe w układzie podwójnej studni



Rysunek 3: Prawdopodobieństwa znalezienia układu w stanie $|0\rangle$ i $|1\rangle$

zaburzony w czasie — okresowo występują niewielkie spadki prawdopodobieństwa w fazie globalnego wzrostu oraz okresowe, słabe wzrosty w fazie globalnego spadku.

Zbadano również sumę prawdopodobieństw dla obu stanów. Wynik to stała wartość równa 1, co oznacza, że prawdopodobieństwa sumują się do całości w każdym kroku czasowym.

3 Podsumowanie

Ćwiczenie polegało na symulacji jednowymiarowej podwójnej kropki kwantowej. Do opisu dynamiki układu wykorzystano metody Cranka–Nicolsona oraz Askara–Cakmaka. Badano także wpływ pola elektrycznego — zarówno stałego, jak i zmiennego w czasie — który był uwzględniany w kolejnych wersjach hamiltonianu układu.

Literatura

- [1] D. Kim, D. R. Ward, C. B. Simmons, J. K. Gamble, R. Blume-Kohout, R. Nielsen, D. E. Savage, M. G. Lagally, M. Friesen, S. N. Coppersmith, and M. A. Eriksson. Microwave-driven coherent operation of a semiconductor quantum dot charge qubit. *Nature Nanotechnology*, 10(3):243–247, 2015.