

Elettronica dello Stato Solido

Esercitazione di Laboratorio 1:

Soluzione numerica dell'equazione di Schrödinger 1D



Daniele Ielmini

DEI – Politecnico di Milano

ielmini@elet.polimi.it

Contenuti del Laboratorio

- Costruzione di un *metodo numerico* per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger 1D tempo indipendente (t.i.)
- Studio delle soluzioni numeriche per configurazioni unidimensionali di potenziale
 - Buca quadrata
 - Oscillatore armonico
 - Buca triangolare
 - Buche accoppiate

Equazione di Schrödinger 1D

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E\Psi(x)} \quad (\text{t.i.})$$

- È un'equazione alle derivate parziali lineare del secondo ordine (problema parabolico, simile all'eq. del calore)
- La presenza dell'unità immaginaria comporta l'insorgere di funzioni a valori complessi.

Soluzione del problema 1D

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Metodi analitici:

- Separazione delle variabili
- Fourier
- ...

Soluzione del problema 1D

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

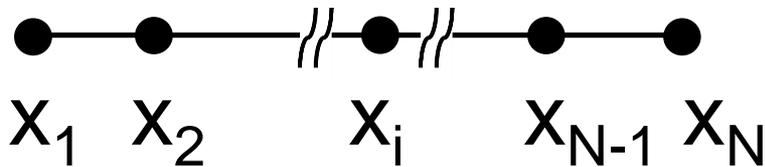
Metodi numerici

- Si cerca una soluzione approssimata (*i.e.* non ottenibile analiticamente)

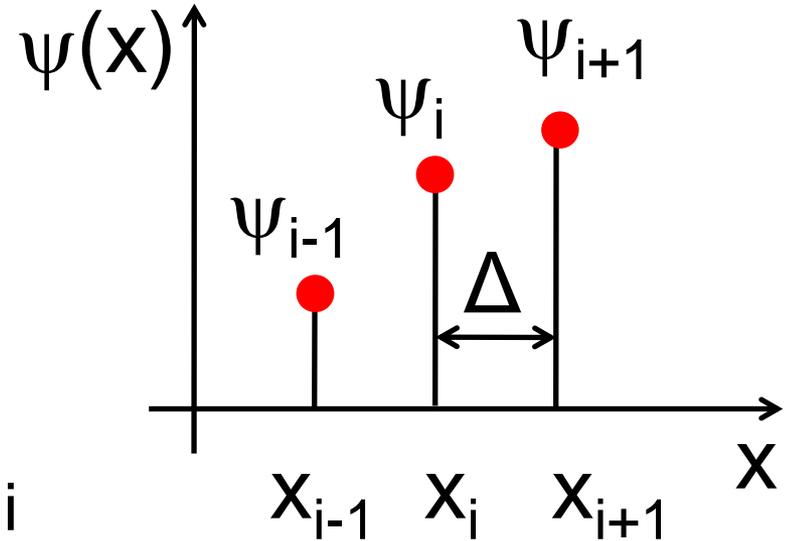
Derivate \rightarrow differenze finite

Differenze finite

Discretizzazione del dominio:



N: numero di nodi



- $$\frac{d\Psi}{dx} \approx \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta}$$
- $$\frac{d^2\Psi}{dx^2} \approx \frac{\frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{\Delta} - \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{\Delta}}{\Delta} = \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{\Delta^2}$$

Differenze finite

- Sostituendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi_{i+1} - 2\Psi_i + \Psi_{i-1}}{\Delta^2} + V_i \Psi_i = E \Psi_i$$

e quindi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} \Psi_{i-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + (V_i - E) \right) \Psi_i - \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} \Psi_{i+1} = 0$$

$i = 2, 3, \dots, N-2, N-1$ ($N =$ numero di nodi)

Condizioni al contorno

Condizioni al contorno di Dirichlet:

Agli estremi del dominio si impone l'annullamento della funzione d'onda (simula buca a pareti infinite che racchiude tutto il sistema)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \begin{cases} \psi_1 = 0 \\ \psi_N = 0 \end{cases}$$

Riscrivendo si arriva a ricondurre il problema alla risoluzione di un sistema algebrico lineare, le cui incognite sono i valori assunti dalla funzione nei nodi della griglia

Equazione in forma matriciale

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + (V_2 - E) & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 0 & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + (V_3 - E) & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & \dots & 0 & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{\hbar^2}{m\Delta^2} + (V_{N-1} - E) & -\frac{\hbar^2}{2m\Delta^2} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \psi_1 \\
 \psi_2 \\
 \psi_3 \\
 \dots \\
 \psi_{N-2} \\
 \psi_{N-1} \\
 \psi_N
 \end{bmatrix}
 = \underline{0}$$

$$(H - E_n I) \underline{\Psi}_n = \underline{0}$$

H = matrice con termini di energia cinetica/potenziale,

E_n = n-esima autosoluzione/autovalore

$\underline{\Psi}_n$ = n-esima autofunzione/autovettore

Funzione *es.m*

- La funzione *es.m* risolve l'equazione di Schrödinger per potenziali monodimensionali continui con condizioni al contorno nulle

- Sintassi:

$$[E, psi] = es(x, V, Neig);$$

- Input:

- x = vettore spaziale equispaziato (N,1)
- V = vettore potenziale (N,1)
- Neig = numero autovalori richiesti (scalare)

- Output:

- E = vettore autovalori (Neig,1)
- psi = matrice autofunzioni (Neig,N)

Contenuti dell'esercitazione

- Costruzione di un metodo numerico per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger 1D tempo indipendente (t.i.)
- Studio delle soluzioni numeriche per configurazioni unidimensionali di potenziale
 - Buca quadrata
 - Oscillatore armonico
 - Buca triangolare
 - Buche accoppiate

Esercizio 1 – Buca quadrata

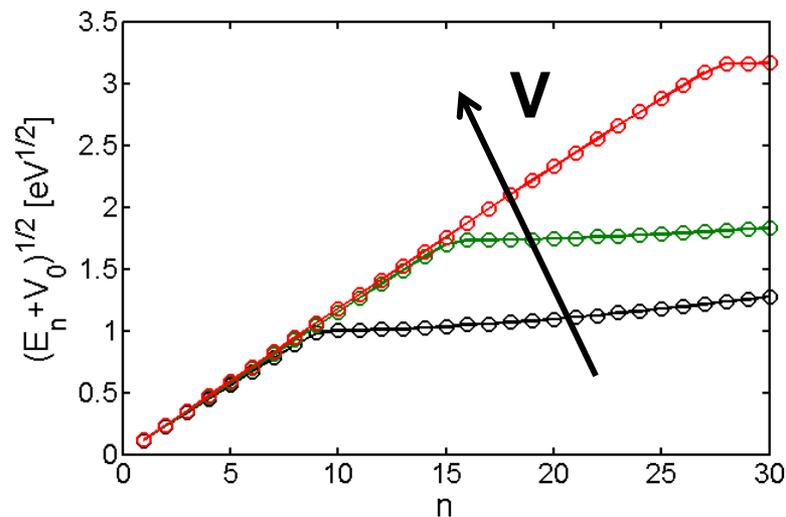
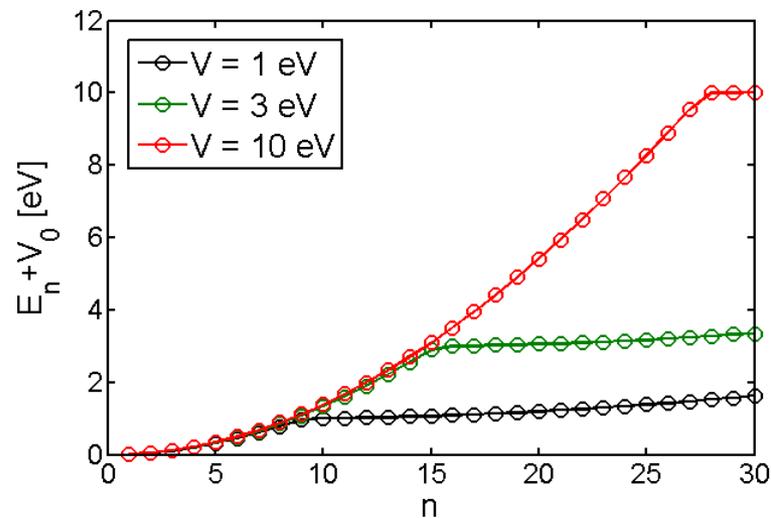
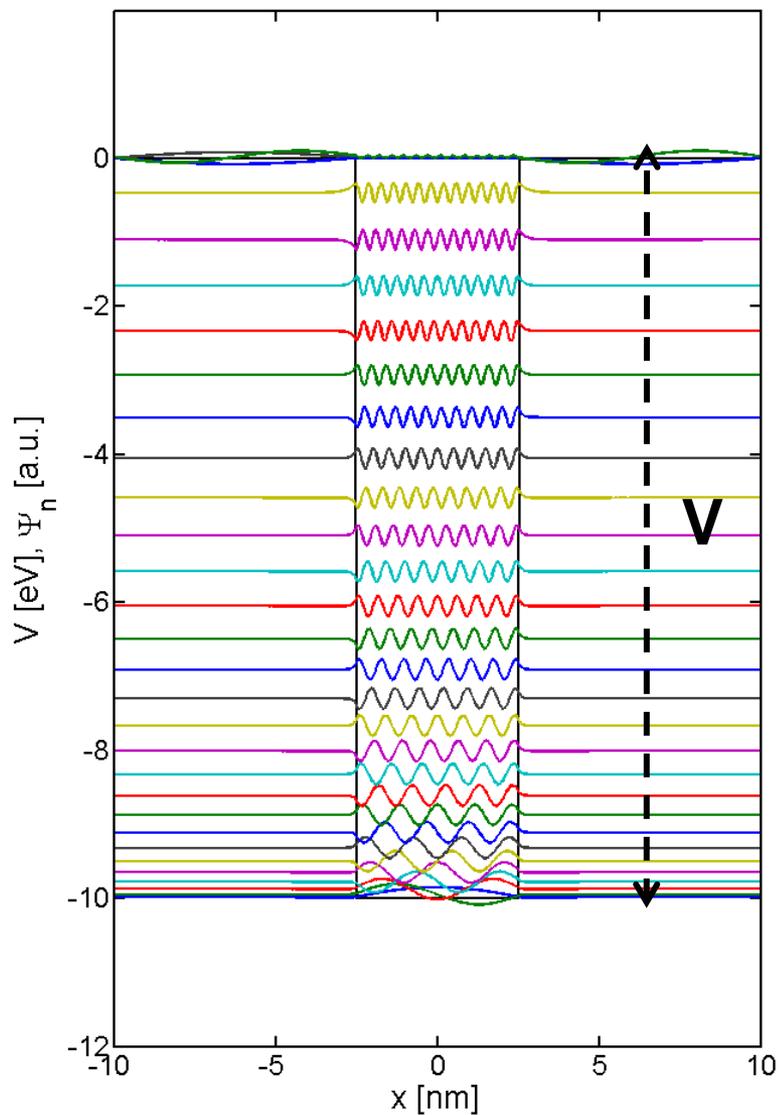
Calcolare autovalori ed autovettori in buche rettangolari a potenziale finito, usando lo script *well_1.m*

1. Confrontare la sequenza di autovalori per una buca di larghezza 5 nm, per differenti ampiezze V di barriera pari a 1, 3 e 10 eV;
2. Confrontare la sequenza degli autovalori al variare della larghezza a di buca (5, 6, 10 nm) posto $V = 5$ eV;
- 3.* Calcolare il residuo della soluzione numerica ottenuta come:

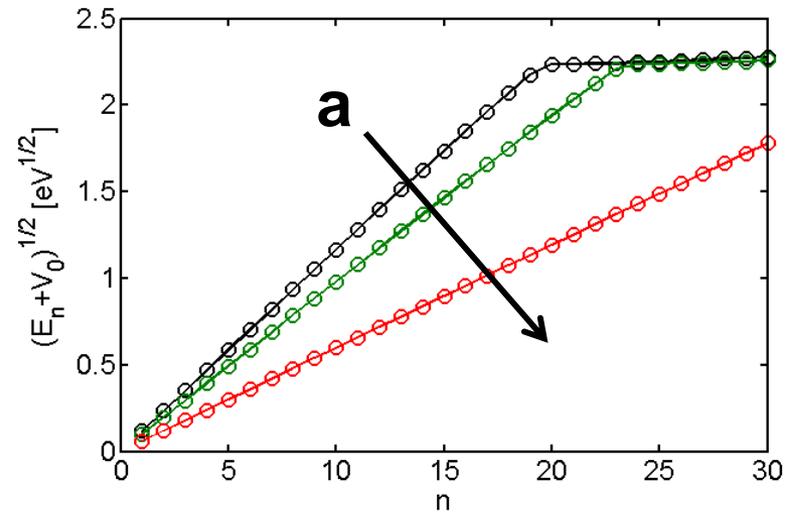
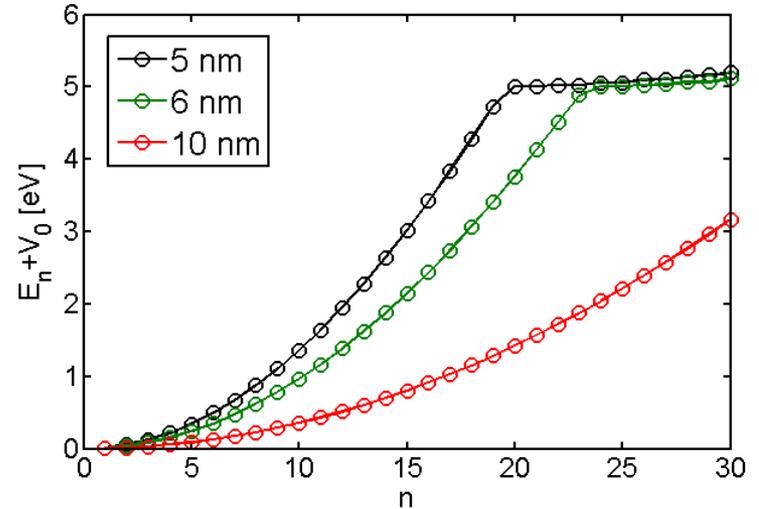
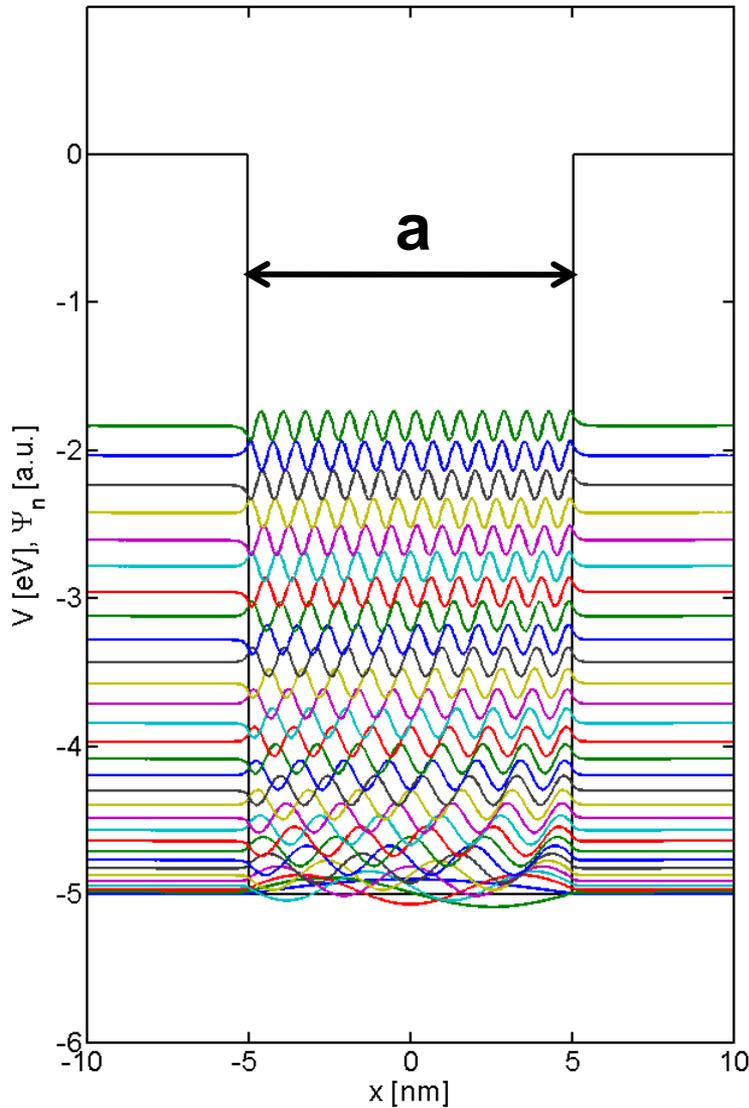
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta^2} + (V_i - E)\psi_i$$

- 4.* Confrontare la soluzione numerica con quella analitica (buca a pareti infinite), al variare del passo di discretizzazione spaziale Δx .

Risultato #1.1



Risultato #1.2



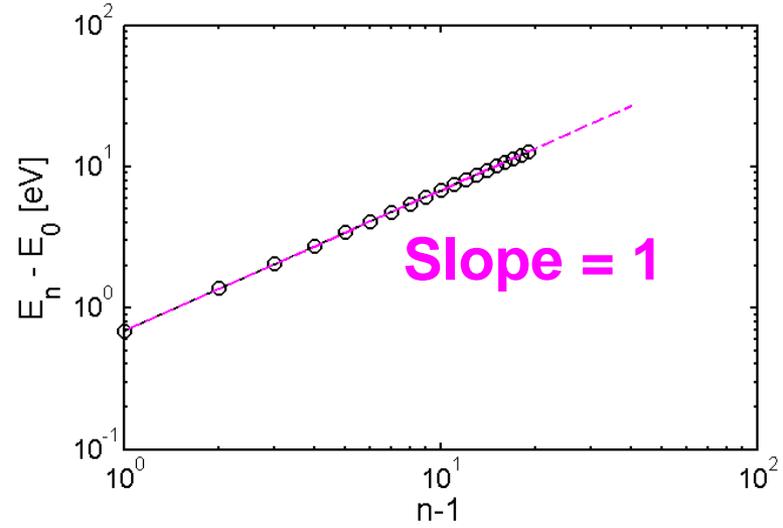
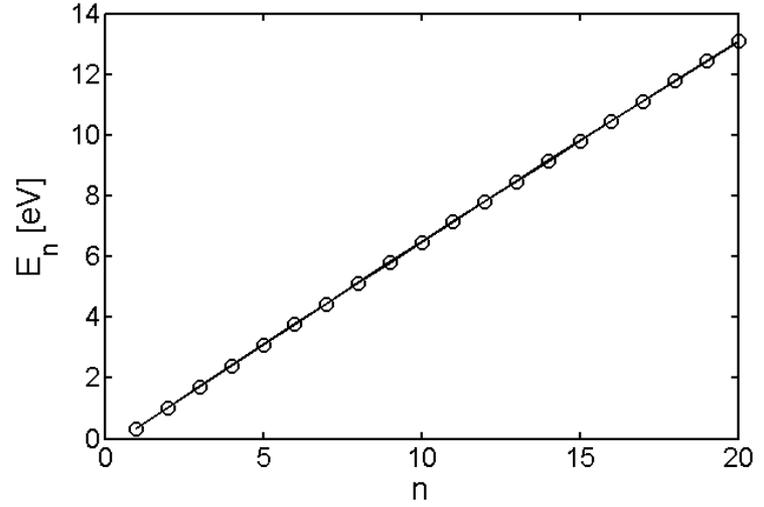
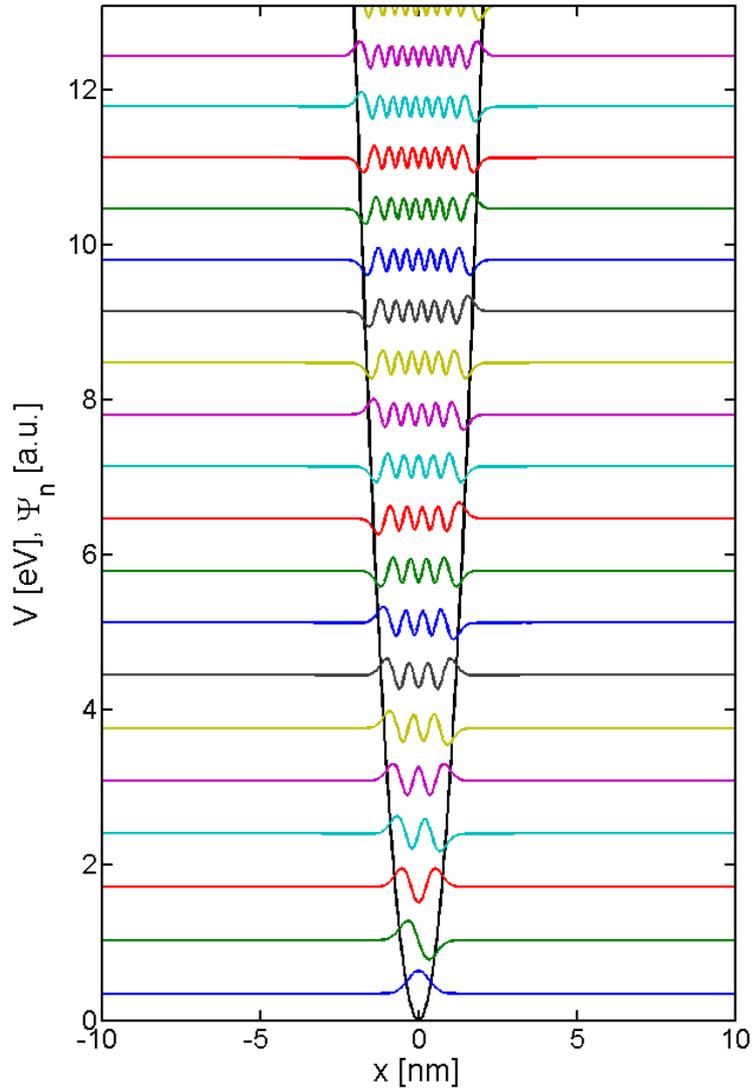
Esercizio 2 – Oscillatore armonico

Calcolare autovalori ed autovettori in buca parabolica usando *well_4.m*

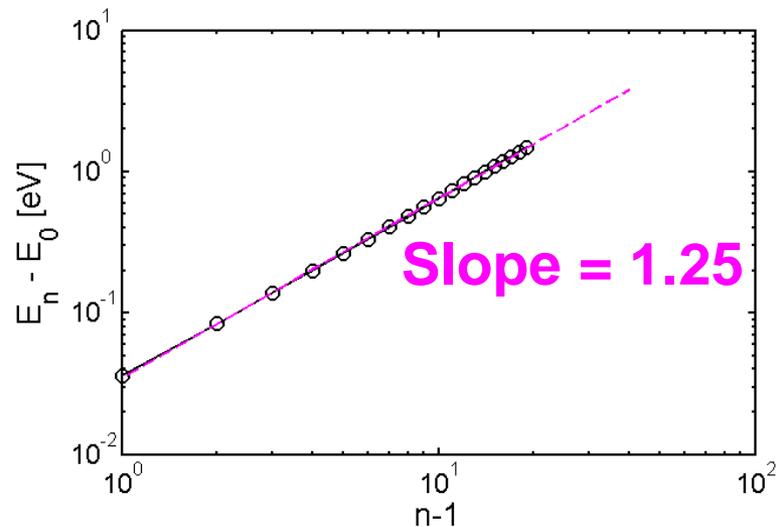
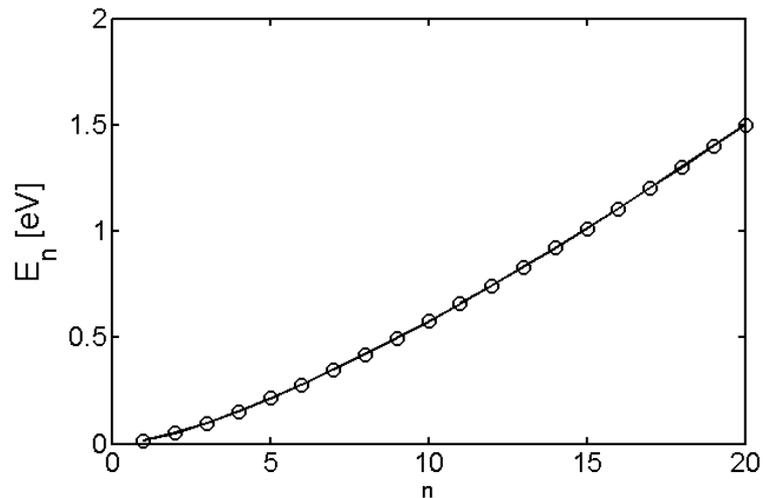
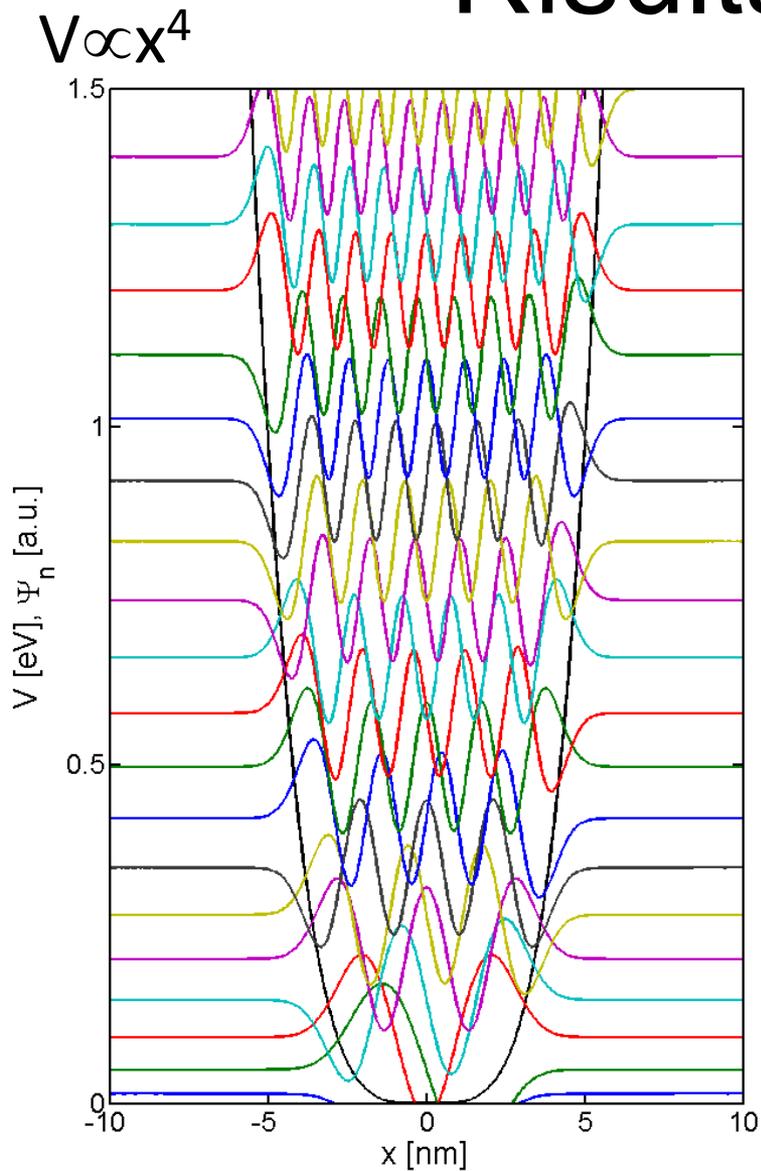
1. Verificare linearità degli autovalori nell'oscillatore armonico $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$
2. Potenziale anarmonico ($V \propto x^4$)

Risultato #2.1

$$V \propto x^2$$



Risultato #2.2

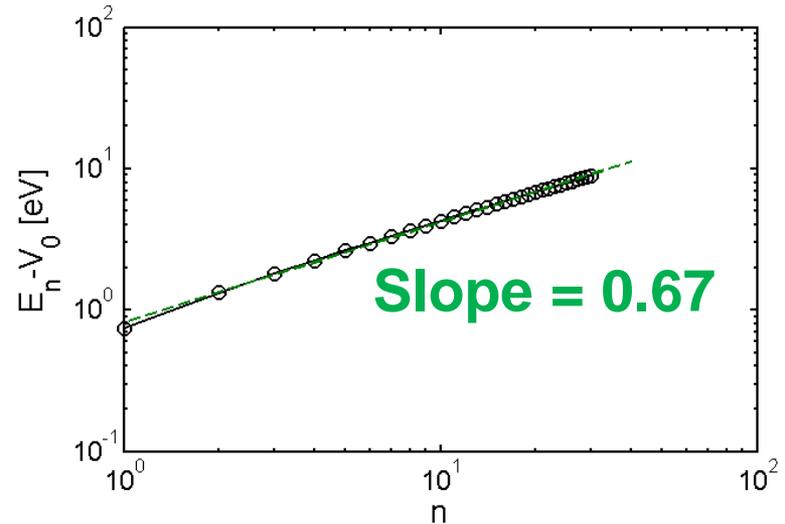
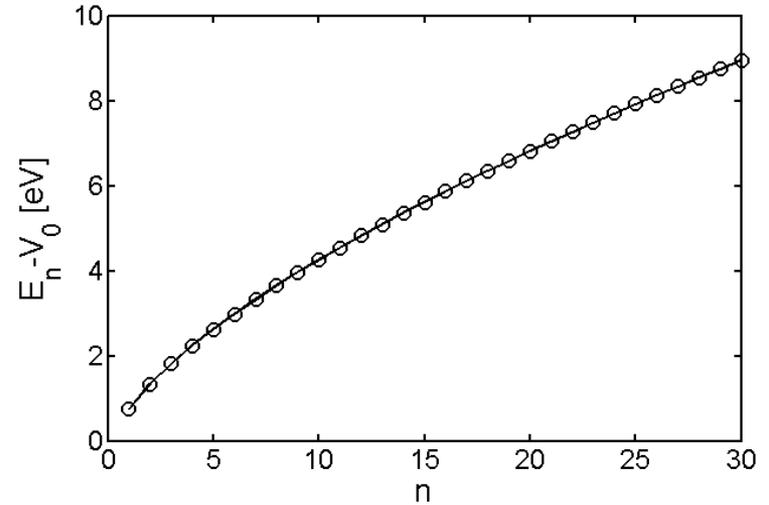
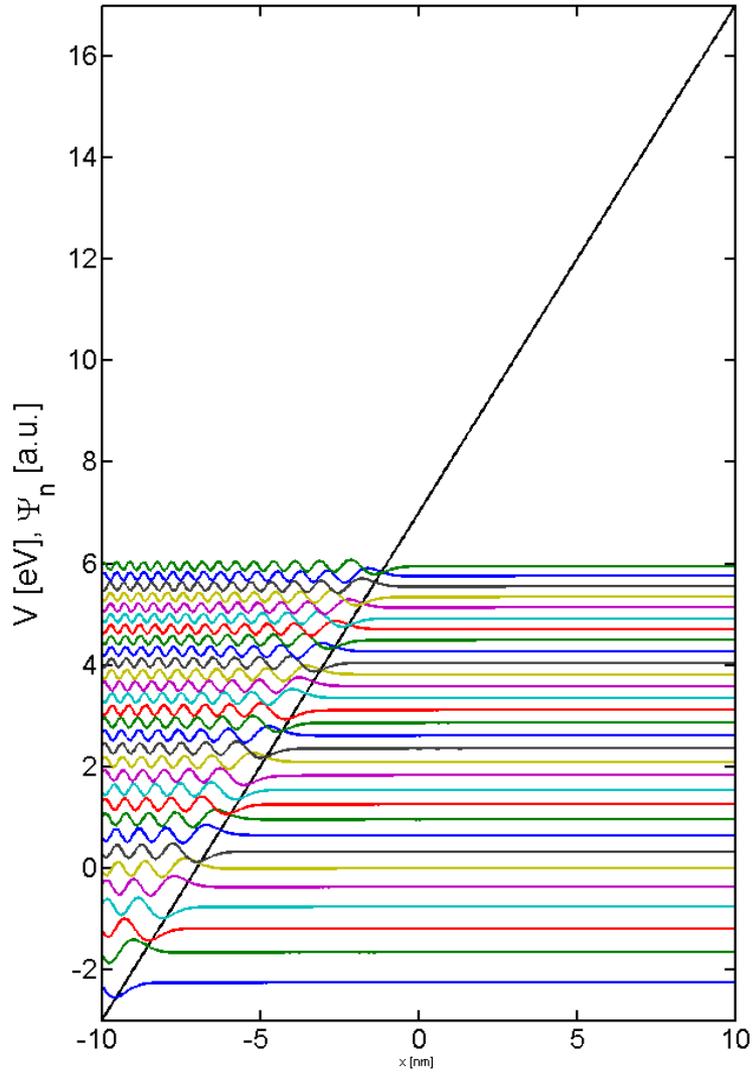


Esercizio 3 – Buca triangolare

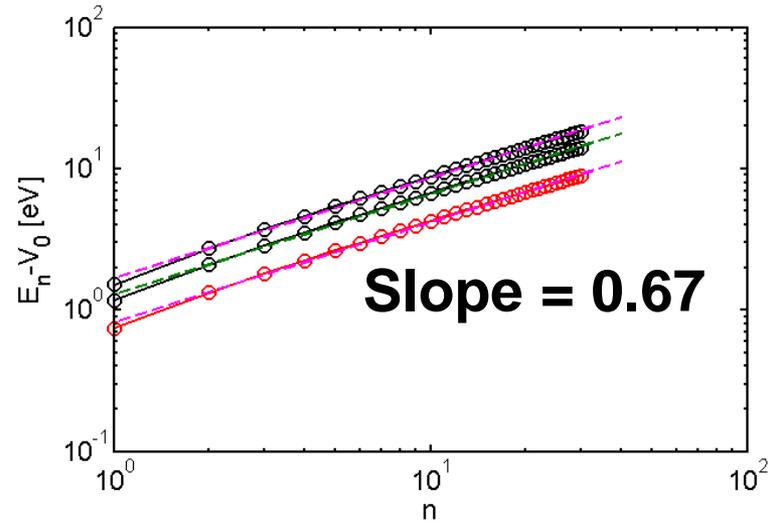
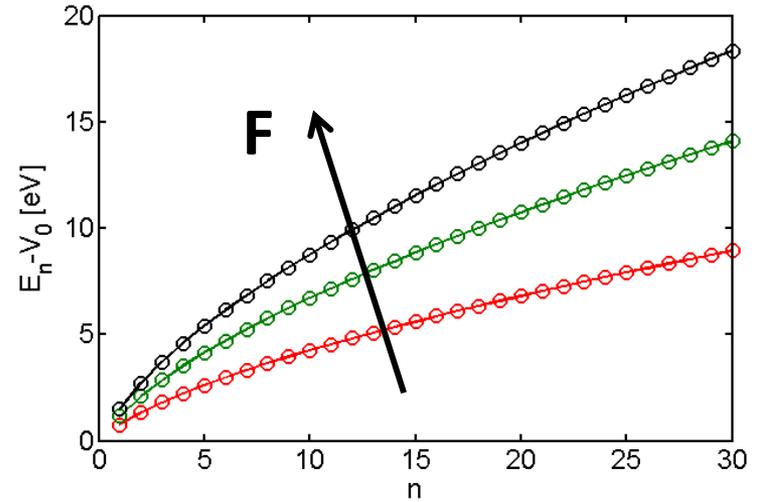
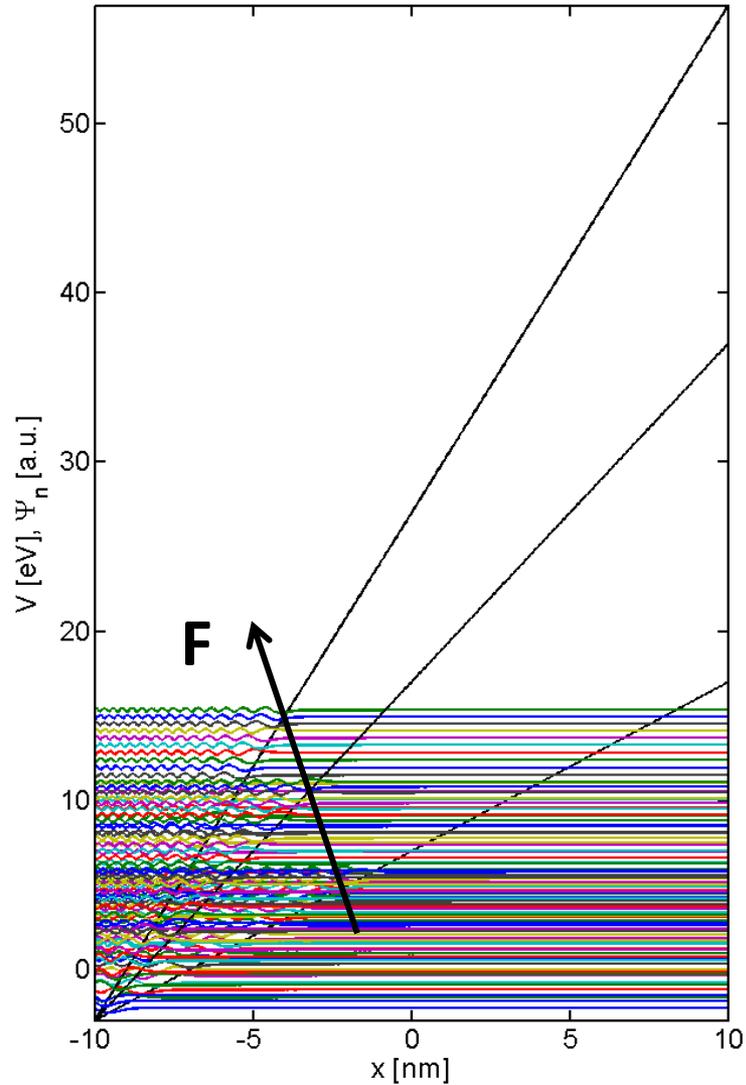
Calcolare *autovalori* ed *autovettori* in buca triangolare usando ***well_5.m***

1. Studio della 'lunghezza d'onda' dell'autofunzione
2. Dipendenza dal campo elettrico F (1, 2, 3 MV/cm)

Risultato #3.1



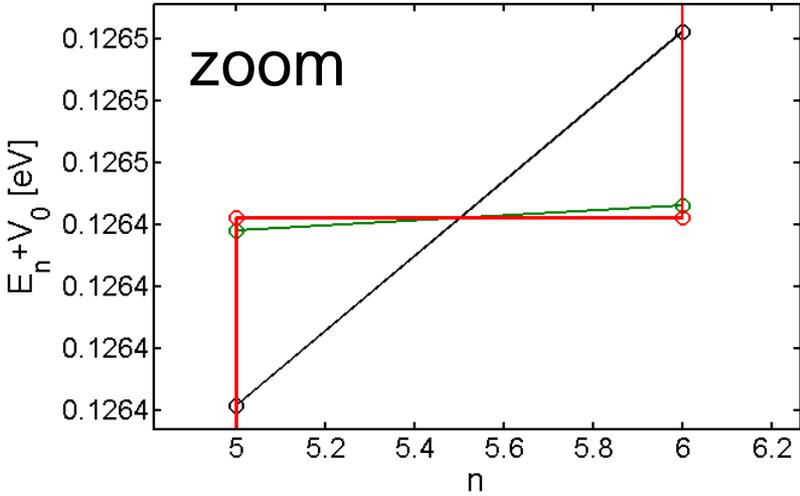
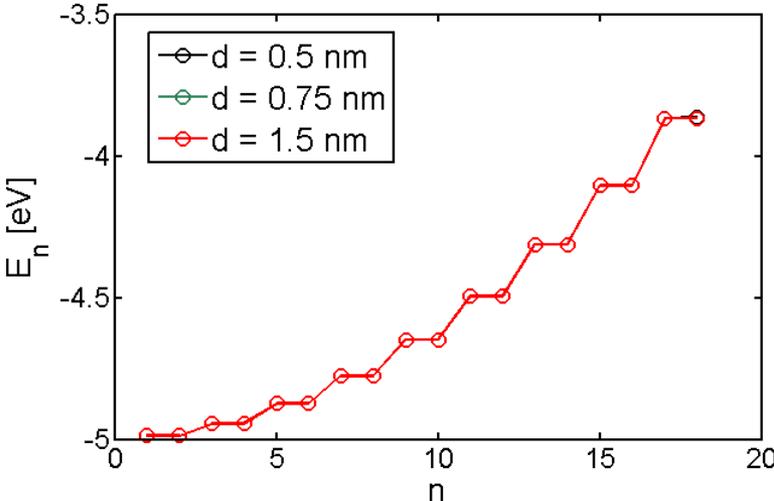
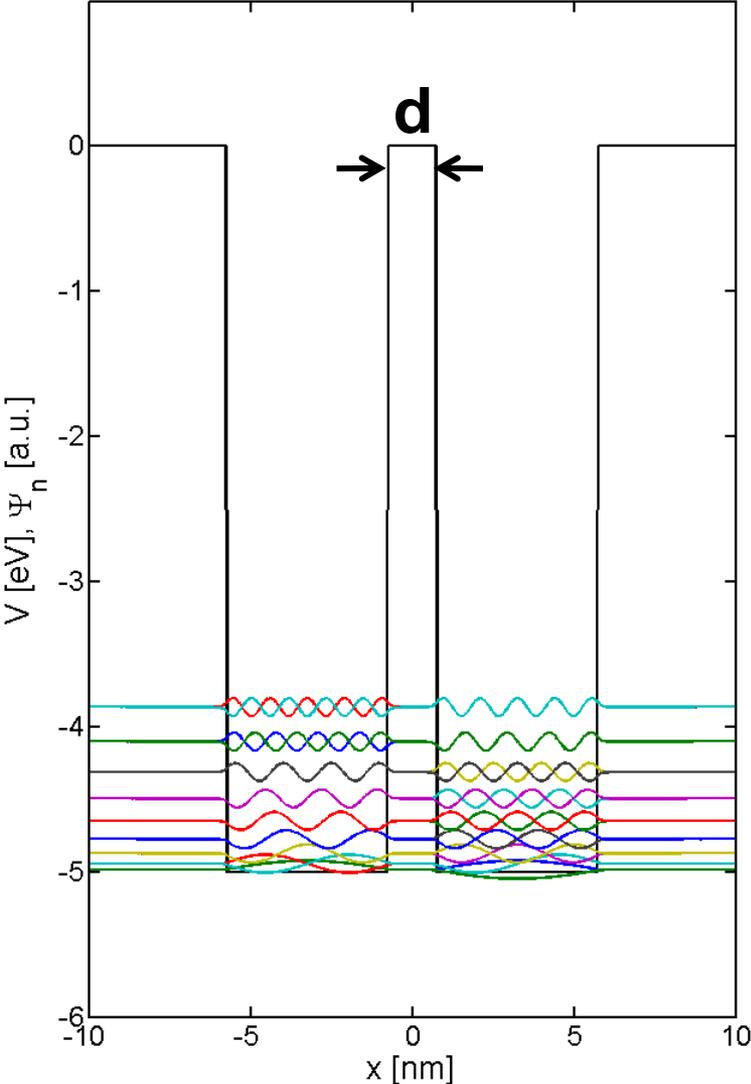
Risultato #3.2



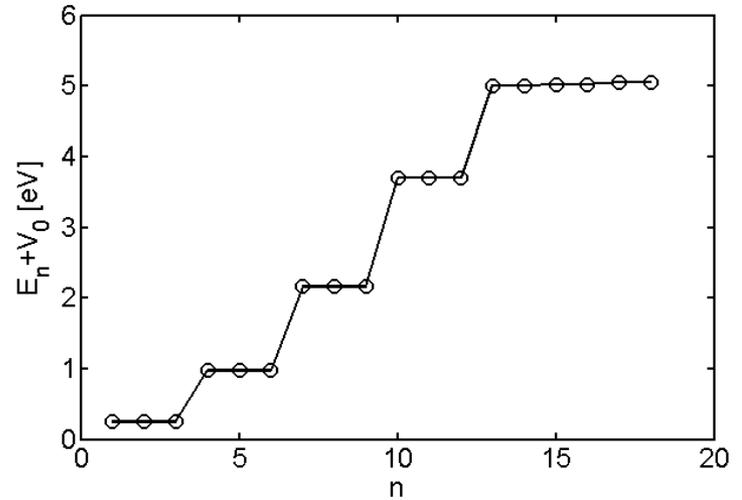
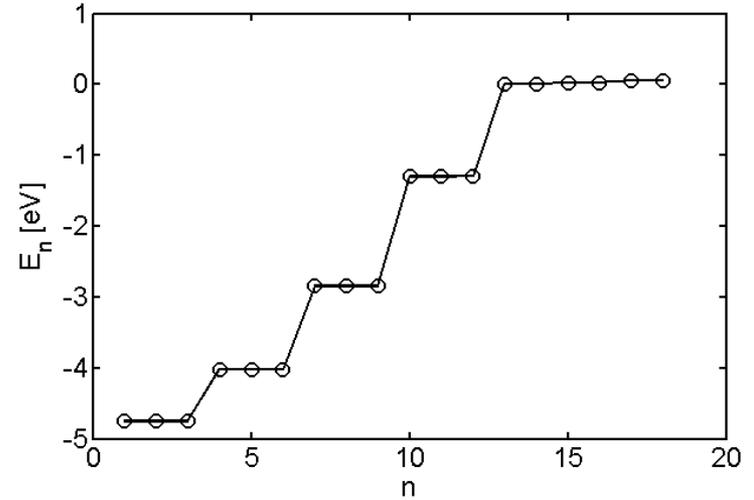
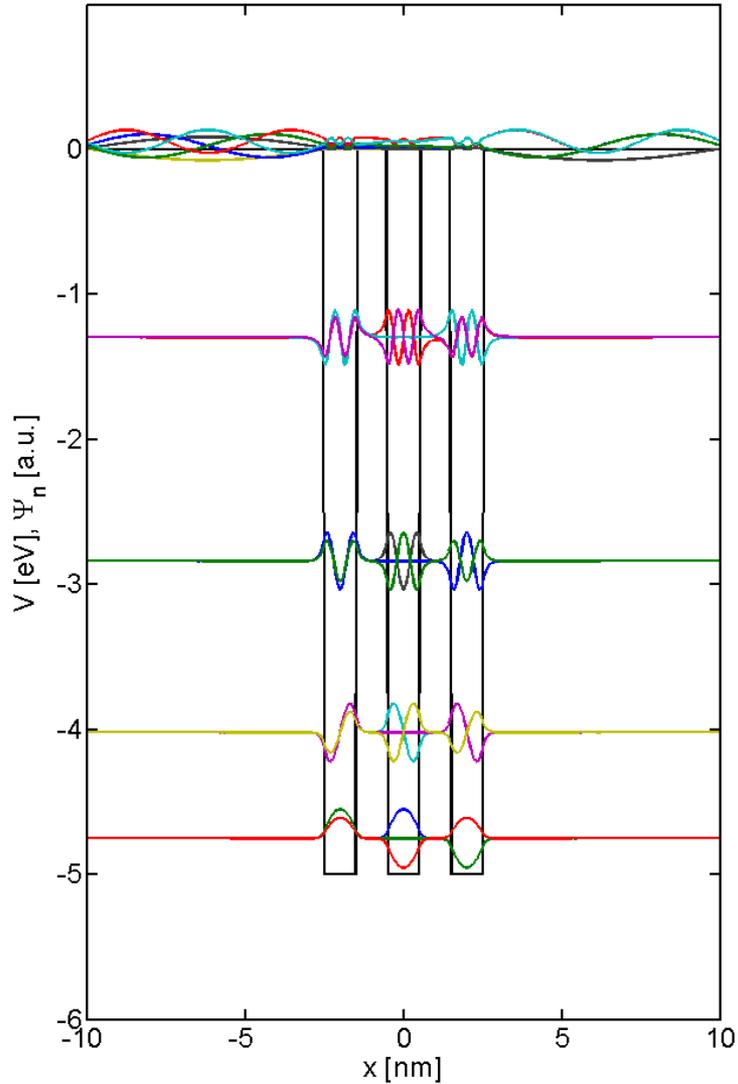
Esercizio 4 – Buche accoppiate

1. Calcolare autovalori ed autovettori per un profilo di potenziale costituito da due buche accoppiate ($a = 5$ nm, $V = 5$ eV)
 - a) Usando lo script ***well_2.m***, studiare la dipendenza dalla distanza interbuca d (0.5, 0.75, 1.5 nm).
Commentare il legame con trasparenza di tunneling
2. Calcolare autovalori ed autovettori per gruppo di tre buche accoppiate ($a = 1$ nm, $V = 5$ eV) con ***well_3.m***
 - a) Studiare la simmetria delle autofunzioni
 - b) Confronto buca doppia/tripla

Risultato #4.1



Risultato #4.2



Risultato #4.3

