

# FDTD løsning af Schrödingerligningen

Projektet handler om at løse Schrödingerligningen i tidsdomænet med Finite-Difference-Time-Domain (FDTD) metoden for en kvantebrønd i 1D der belyses med en kort elektromagnetisk bølgepakke (Fig. 1).

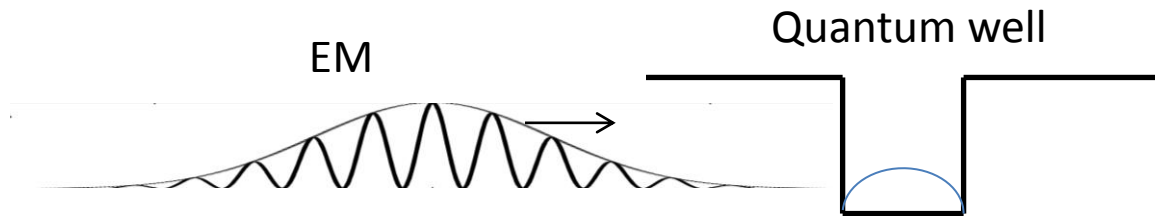


Fig. 1: Illustration af en kvantebrønd der belyses med en kort elektromagnetisk bølgepakke

Ved FDTD metoden omskrives differentialligninger, i dette tilfælde Schrödingerligningen, til en differensligning, der herefter kan løses i tidsdomænet ved at steppe sig frem i tid et skridt af gangen. Den elektromagnetiske bølge kommer til at indgå i problemet ved at potentialet i Schrödinger-ligningen får et ekstra tidsafhængigt led.

Herved kan studeres i tidsdomænet hvordan den elektroniske grundtilstand modificeres pga. vekselvirkningen med den elektromagnetiske bølge, inkl. excitation af højere ordens bundne elektroniske tilstande og kobling ud af kvantebrønden. Sandsynligheder for excitation af højere ordens elektroniske tilstande og ionisering kan efterfølgende findes ved at Fourier-transformere fra tidsdomænet til frekvensdomænet. Det vil være interessant at se på hvordan excitation afhænger af frekvens og amplitude af den elektromagnetiske bølge og tilhørende resonanser i excitationen.

Især excitation til meget store energier er af interesse i projektet QUSCOPE til at konvertere EM bølger med lange bølgelængder til EM bølger med ultra-korte bølgelængder. Her påtænkes desuden at bruge optiske antenner / resonatorer til at generere kraftige lokale elektromagnetiske felter, så det er også af interesse i nærværende studenterprojekt at se på effekten af kraftige påtrykte felter.

Litteratur til en start:

[1] U. S. Inan og R. A. Marshall, *Numerical Electromagnetics – The FDTD Method*, Cambridge University Press 2011.

[2] Kvantemekanikbøgerne.

## Forslagsstillere:

Thomas Søndergaard og Thomas Garm Pedersen