

УДК 621.315 + 539.1

DOI 10.33251/2522-1477-2019-5-415-421

СОСНИЦЬКА Наталя Леонідівна,

доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри «Вища математика і фізика», Таврійський державний агротехнологічний університет

МОРОЗОВ Микола Вікторович,

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри «Вища математика і фізика», Таврійський державний агротехнологічний університет

ОНИЩЕНКО Галина Олександрівна,

асистент кафедри «Вища математика і фізика», Таврійський державний агротехнологічний університет

ХАЛАНЧУК Лариса Вікторівна,

асистент кафедри «Вища математика і фізика», Таврійський державний агротехнологічний університет

МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОРОЗМІРНИХ ГЕТЕРОСИСТЕМ ТА МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ КУРСУ «ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ»

В роботі розглянуто математичне, комп'ютерне моделювання циліндричних квантових точок (ЦКТ), для яких досліджені види хвильових функцій електрона, щільність ймовірності, власні значення хвильових чисел і енергії та їх залежність від параметрів квантової точки (D – діаметра, H – висоти). На базі результатів досліджень розроблена відповідна лабораторна робота для магістрантів спеціальності «Комп'ютерні науки» з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій», в якій використовується математичний пакет MathCad та Scilab.

Ключові слова: квантова точка, стан електрона, власна енергія, інформаційні технології, математичне моделювання, комп'ютерне моделювання.

Постановка проблеми. Різноманітні квантові точки (сферичні, циліндричні, конусні) знаходять все більш широке застосування в елементній базі сучасних інформаційних приладів, наприклад, монітори на квантових точках (QLED-технології), інжекційні лазери для волоконно-оптичного зв'язку, сонячні батареї, сенсори на квантових точках тощо [4; 8]. Тому розробка відповідних математичних моделей квантових точок (КТ) та їх застосування в лабораторному практикумі курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» для магістрантів спеціальності «Комп'ютерні науки» є актуальним завданням [6; 11]. Перспективним є розробка наближених, спрощених моделей для розгляду фінітного руху електронів у КТ, які дозволяють визначити щільність ймовірності та власні значення знаходження енергії носіїв заряду і можуть бути використані для розробки імітаційних лабораторних робіт.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Спектри власних значень енергії електрона визначаються в першу чергу геометричною формою, розмірами, речовиною гетероструктури напівпровідників КТ та параметрами обмежуючого потенціалу. У роботах [1; 2] розглянуто вплив параметрів модифікованого потенціалу Пешля-Теллера на стан електрона та власні значення енергії у циліндричній КТ. Знаходження власної енергії основного стану квантової частинки, наприклад, електрона у квантовій нитці (циліндрична КТ, в якій висота набагато більша радіуса) з точковим дефектом представлено у [10]. Аналітичні дослідження стану електронів у пірамідальних та конічних КТ із застосуванням представлення рівняння Шредінгера у модифікованій циліндричній системі координат розглядаються в роботі [9]. У статті [3] розглянуто стан електрона та власні значення енергії в циліндричній КТ з оболонкою. У роботі [14] для розгляду стану електрона в наноструктурах та визначення власних значень енергії використані, крім аналітичного метода розв'язання рівняння Шредінгера, інші наближені числові

методи (ВКБ - метод, метод кінцевих різниць, метод кінцевих елементів, метод Арнольда), які можуть бути застосовані для розгляду різноманітних КТ. Конічні квантові точки розглядаються в роботі [15] та інших.

Мета статті та завдання. Розглянути найпростіші моделі циліндричної квантової точки (ЦКТ) з непроникними стінками у випадку, коли діаметр та висота мають приблизно однакові значення (рис. 1а). Дослідити стан електрона (хвильова функція, розподіл щільності ймовірності (рис. 2), власні значення енергії) від параметрів ЦКТ шляхом рішення рівняння Шредінгера та застосування умови Бора-Зоммерфельда квантування орбіт (нульове наближення метода Вентцеля-Крамєра-Брилюєна). Розробити імітаційні лабораторні роботи на основі математичного та комп'ютерного моделювання з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» для підготовки магістрів зі спеціальності 122 «Комп'ютерні науки».

Виклад основного матеріалу. При розробці лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» нами використано математичне, комп'ютерне моделювання низькорозмірних структур, яке дозволяє дослідити стан електрона в різноманітних КТ, визначити хвильову функцію, щільність ймовірності, власні значення хвильового числа та енергії, а також розглянути залежність цих характеристик від параметрів КТ. Безперечною перевагою КТ, які є елементною базою приладів, можливо вважати граничні мінімальні розміри, максимально високі значення ККД та можливість керування параметрами КТ.

Розглянемо стан електронів у ЦКТ (рис. 1а) у випадку непрозорих стінок – це найбільш спрощена модель. Потенціальна енергія електрона дорівнює (рис. 1б):

$$U(r, z) = \begin{cases} U_1 = 0, & \text{якщо } 0 \leq r \leq R, \quad 0 \leq z \leq H \\ U_2 = \infty, & \text{якщо } |r| > R, \quad z < 0, \quad |z| > H \end{cases} \quad (1)$$

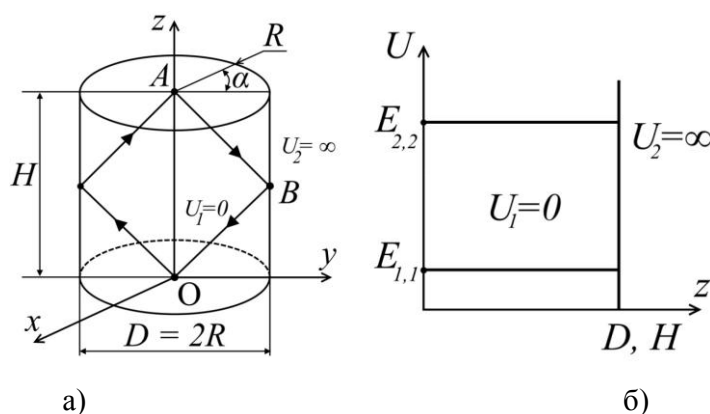


Рис. 1 Циліндрична квантова точка:

а) H – висота, D – діаметр КТ; б) потенціальна енергія електрона

Рівняння Шредінгера для стаціонарних станів хвильової функції $\psi(r, z, \alpha)$ у циліндричній системі координат має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \alpha^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = \Delta \psi + k^2 \psi = 0, \quad (2)$$

де m – ефективна маса, E – власна енергія електрона,

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \text{хвильове число.}$$

Для розв'язку рівняння Шредінгера (2) використовуємо метод Фур'є розділення змінних:

$$\psi(r, z, \alpha) = A e^{i m \alpha} \cdot I_0(k_1 r) \cdot \sin(k_2 z), \quad (3)$$

де $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - магнітне квантове число;

$I_0(k_1; r)$ - функція Бесселя нульового порядку.

Для випадку $m = 0$ (S – стани електрона) знаходимо хвильові числа k_1, k_2 та власну енергію E електрона, використовуючи граничні умови при $(r = R)$: $\varphi(R, z) = 0$: $I_0(k_1; R) = 0$

$$\text{Звідки: } k_1 = \frac{b_{n1}}{R}, \quad (4)$$

де b_{n1} - нулі функції $I_0(x)$ Бесселя нульового порядку приведені в таблиці 1 [7].

Таблиця 1

n	1	2	3	4	5
b_n	2,405	5,250	8,654	11,791	14,931

Для $z = H$: $\sin(k_2 \cdot H) = 0$, тоді

$$k_2 = \frac{\pi \cdot n_2}{H} \quad (5)$$

де $n_2 = 1, 2, 3$ - квантові числа.

Використовуючи рівняння (2) отримуємо:

$$k_1^2 + k_2^2 = k^2 = \frac{2mE_{n1,n2}}{\hbar^2}$$

Тоді власна енергія електрона дорівнює:

$$E_{n1,n2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{b_{n1}^2}{R^2} + \frac{\pi^2 n_2^2}{H^2} \right) = \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{b_{n1}^2}{\pi^2 R^2} + \frac{n_2^2}{H^2} \right) \quad (6)$$

Власні значення енергії електрона також можна отримати, якщо застосувати умову Бора-Зоммерфельда квантування орбіт (нульове наближення метода ВКБ) [9].

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad (7)$$

Для радіальних мод:

$$2p_{i,1} \int_0^D dx = 2p_{i,1} D = n_1 h,$$

$$\text{тоді } E_{1,0} = \frac{p_{i,1}^2}{2m} \cong \frac{\hbar^2}{8m} \frac{n_1^2}{D^2} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{n_1^2}{4R^2} \quad (8)$$

Для осьових мод:

$$2p_{i,2} \int_0^H dx = 2p_{i,2} H = n_2 h \quad \text{тоді } E_{0,2} = \frac{p_{i,2}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{n_2^2}{H^2} \quad (9)$$

У випадку орбіти, зображеної, наприклад, на рисунку 1, отримуємо

$$4p_{i,3} \cdot AB = n h, \quad \text{тоді } E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{8m} \frac{n^2}{(D^2 + H^2)} \quad (10)$$

Визначаємо амплітуду A хвильової функції $\psi(r, z)$, використовуючи умову нормування:

$$\int_V \psi^2(r, z) dV = \int_0^R \int_0^H A^2 I_0^2(k_1 \cdot r) \cdot \sin^2(k_2 \cdot z) \cdot 2\pi r \cdot dr \cdot dz = \frac{\pi H \cdot A^2 R^2 I_1^2(k_1 \cdot R)}{2} = 1$$

Тоді стала інтегрування дорівнює:

$$A = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi H R I_1(k_1 R)}}, \quad (11)$$

де $I_1(b_1)$ - значення функції Бесселя 1-го порядку для аргументу нуля функції Бесселя нульового порядку $I_0(b_1) = 0$.

Будуємо 3D графіки [12] щільності ймовірності знаходження електрона у заданій точці простору, яка дорівнює:

$$\rho(r, z) = |\psi(r, z)|^2 = A^2 \cdot I_0^2(k_1 \cdot r) \cdot \sin^2(k_2 \cdot z) \quad (12)$$

На рисунку 2 представлені аксіальні та радіальні моди розподілу щільності ймовірності знаходження електрона в об'ємі циліндричної квантової точки при $R = 4 \cdot 10^{-9} \text{ м}$ та $H = 10^{-8} \text{ м}$

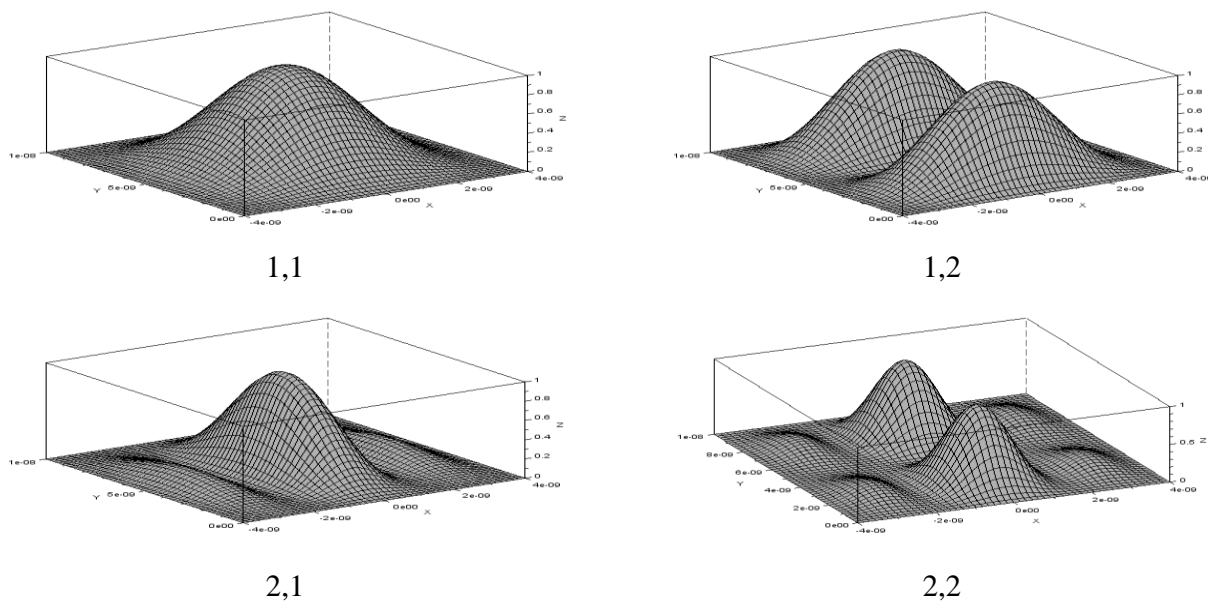


Рис. 2 Щільність ймовірності $\rho(r, z)$ для різних станів електрона при $n_1 = 1, 2$ та $n_2 = 1, 2$

Мінімальна власна енергія електрона у ЦКТ суттєво залежить від розмірів (D, H) квантової точки та збільшується, якщо розміри зменшуються (6). Наприклад, мінімальне власне значення енергії для основного стану електрона (квантові числа $n_1 = n_2 = 1$) при наближенні ефективної маси ($m = 0,62 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$) у випадку $R = 4 \text{ нм}$ дорівнює $E_{1,1} = 0,26 \text{ eV}$.

Мінімально допустимі розміри ЦКТ визначаються параметрами кристалічної ґратки (приблизно 2 нм). В подальшому значний інтерес представляє розгляд стану електрона в циліндричній квантовій точці у випадку стінок кінцевої висоти та для кінчних квантових точок [12; 15].

Висновки і перспективи подальших досліджень. Розглянуто стан S-електронів (носіїв заряду) у циліндричних квантових точках з непрозорими стінками. Отримано вид хвильової функції, щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області квантової точки. Досліджена залежність власних значень енергії електрона від параметрів циліндричної квантової точки.

Результати досліджень та математичного, комп'ютерного моделювання використовують при організації та проведенні лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій». В подальшому має інтерес дослідження моделей кінчних квантових точок з оболонкою та різноманітних видів обмежуючого потенціалу.

Список використаних джерел

1. Айрапетян Д. Б., Казарян Э. М., Тевосян О. Х. Примесные состояния в цилиндрической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера. Volume 49, 2014. Issue 3, PP. 190–195
2. Айрапетян Д. Б., Котанджян Т. В., Тевосян О. Х. Моделирование ограничивающего потенциала для цилиндрической квантовой точки. Известия, НАН РА Физика, т. 49, №6, 2014. С. 410–414
3. Арутюнян В. А., Айрапетян Д. Б., Багдасарян Д. А. Одноэлектронные состояния в полупроводниковом наносферическом слое большого радиуса, 51 (4). 2016. PP. 471–483. ISSN 0002-3035
4. Грибачев В. Методы получения и применения квантовых точек: Компоненты и технологии. 2009. С. 127–130.
5. Дунаев А. С. Специальные функции в 2 ч. Часть 1: справочник для вузов / А. С. Дунаев, В. И. Шлычков. М.: Издательство Юрайт, 2019. 417 с. (Серия: Университеты России). ISBN 978-5-534-07664-6.
6. Дьоміна Н. А., Морозов М. В. Моделювання кванторозмірних гетероструктур у лабораторному практикумі з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій». Збірник наукових праць Кіровоградського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка «Наукові записки. Випуск 11. Серія: Проблеми методики фізико-математичної і технологічної освіти». Кропивницький: РВВ КДПУ ім. В. Винниченка. 2017. № 5 (1227). С. 108–134.
7. Кафтанова Ю. В. Специальные функции математической физики. Научно-популярное издание. Харьков: Новое слово, 2009. 178 с. ISBN 978-966-2046-62-5
8. Леденцов Н. Н., Устинов В. М., Щукин В. А., Копьев П. С., Алферов Ж. И., Д. Бимберг. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры Обзор: Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия. Institut fur Festk orperphysik, Technische Universit at Berlin, 10623 Berlin, Germany. 1998. Том: 32. Номер: 4. С. 385–410
9. Мкртчян А. Р., Алексанян Ал. Г., Арамян К. С., Алексанян А. А. О механизме роста силы оптических переходов в квантовых точках Ge, внедренных в матрицу Si, 51 (2). 2016. pp. 235-243. ISSN 0002-3035
10. Седракян Д. М., Бадалян Д. А., Седракян Л. Р. Определение энергии электрона в квантовой проволоке с точечным дефектом. Известия НАН Армении, Физика, т. 49, №2, 2014. С. 71–81
11. Фізичні основи сучасних інформаційних технологій: Навч.-мет. посібник / Н. Л. Сосницька, Н. А. Дьоміна, Н. В. Морозов, Г. О. Онищенко. Мелітополь: Видавничий будинок Мелітопольської міської друкарні, 2018. 142 с.
12. Халанчук Л. В., Чопоров С. В. Огляд методів генерації дискретних моделей геометричних об'єктів // Вісник Запорізького національного університету: Збірник наукових статей. Фізико-математичні науки. Запоріжжя: ЗНУ, 2018. №1. С. 139–152.
13. Lozovski V., Piatnytsia V. (2013). The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 8. 2335–2343. 10.1166/jctn.2011.1965.
14. Eduard M Kazaryan , Lyudvig S. Petrosyan, Vanik A Shahnazaryan, and Hayk A Sarkisyan Russian-Armenian (Slavonic) University, 0051 Yerevan, Armenia Yerevan State Medical University, 0025 Yerevan, Armenia Science Institute, University of Iceland, Dunhagi-3, IS-107, Reykjavik, Iceland and Yerevan State University, 0025 Yerevan, Armenia
15. K. G. Dvoyan, D. B. Hayrapetyan, E. M. Kazaryan. Direct interband light absorption in a strongly prolated ellipsoidal quantum dot. Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2007.
16. Morozov N. V., Diomina N. A. Modelling of electron states in cylindrical and conical quantum dots / Optics and High Technology Material Science, SPO 2018, Scientific works, Kyiv, P. 70–71.

References

1. Ayrapetyan, D.B., Kazaryan, E.M., Tevosyan, O.H. (2014). *Primesnyie sostoyaniya v tsilindricheskoy kvantovoy tochke s modifitsirovannyim potentsialom Peshlya–Tellera [Impurity states in a cylindrical quantum dot with a modified Peshl – Teller potential]*. Volume 49, Issue 3, PP. 190-195
2. Ayrapetyan, D.B., Kotandzhyan T.V., Tevosyan, O.H. (2014). *Modelirovanie ogranchivayuschego potentsiala dlya tsilindricheskoy kvantovoy tochki [Simulation of the limiting potential for a cylindrical quantum dot]*. Izvestiya, NAN RA Fizika [News, NAS RA Physics], t. 49, № 6, S.410-414[in Russian].
3. Arutyunyan, V.A., Ayrapetyan, D.B., Bagdasaryan, D.A. (2016). *Odnoelektronnyie sostoyaniya v poluprovodnikovom nanosfericheskom sloe bolshogo radiusa [Single-electron states in a semiconductor nanospheric layer of large radius]*. 51 (4). PP. 471-483. ISSN 0002-3035

4. Gribachev, V. (2009). *Metodyi polucheniya i primeneniya kvantovyih tochk: Komponenty i tehnologii [Methods of obtaining and applying quantum dots: Components and technologies]*. S. 127-130. [in Russian].

5. Dunaev, A.S. (2019). *Spetsialnyie funktsii v 2 ch. Chast: spravochnik dlya vuzov / A. S. Dunaev, V. I. Shlyichkov [Special functions in 2 parts. Part 1: Handbook for universities]*. M.: Izdatelstvo Yurayt, 417 s. (Seriya: Universitetyi Rossii [Series: Russian Universities]). ISBN 978-5-534-07664-6. [in Russian].

6. Domina, N.A., Morozov M.V. (2017). *Modelyuvannya kvantorozmIrnih geterostruktur u laboratornomu praktikumI z kursu "FIzichnI osnovi suchasnih InformatsIynih tehnologIy" [Collection of scientific works of the Kirovohrad State Pedagogical University named after Volodymyr Vynnychenko "Scientific notes - Issue 11. Series: Problems of Methodology of Physical-Mathematical and Technological Education"]*. ZbIrnik naukovih prats KIrovogradskogo derzhavnogo pedagogIchnogo unIversitetu ImenI Volodimira Vinnichenka "NaukovI zapiski. Vipusk 11. SerIya: Problemi metodiki flziko-matematichnoYi I tehnologIchnoYi osvIti. Kropivnitskiy: RVV KDPU Im. V. Vinnichenka. № 5 (1227). S. 108-134 [in Ukrainian].

7. Kaftanova, Yu.V. (2009). *Spetsialnyie funktsii matematicheskoy fiziki. Nauchno-populyarnoe izdanie [Special functions of mathematical physics. Popular science edition]*. Harkov: Novoe slovo, 178 s. ISBN 978-966-2046-62-5 [in Ukrainian].

8. Ledentsov, N.N., Ustinov, V.M., Schukin, V.A., Kopev, P.S., Alferov, Zh.I., D. Bimberg. (1998). *Geterostrukturyi s kvantovymi tochkami: poluchenie, svoystva, lazeryi Obzor: Fiziko-tehnicheskiiy institut im. A.F. Ioffe Rossiyskoy akademii nauk [Quantum-dot Heterostructures: Production, Properties, Lasers Overview: Physicotechnical Institute. A.F. Ioffe Russian Academy of Sciences]*, 194021 Sankt-Peterburg, Rossiya. Institut fur Festk orperphysik, Technische Universit at Berlin, 10623 Berlin, Germany. Tom: 32. Nomer: 4 S. 385-410 [in Russian].

9. Mkrtchyan, A.R., Aleksanyan, A.G., Aramyan, K.S., Aleksanyan, A.A. (2016). *O mehanizme rosta silyi opticheskikh perehodov v kvantovyih tochkah Ge, vnedrennyih v matritsu Si [On the mechanism of the growth of the strength of optical transitions in Ge quantum dots embedded in a Si matrix]*. 51 (2). PP. 235–243. ISSN 0002-3035 [in Armenian].

10. Sedrakyan, D.M., Badalyan D.A., Sedrakyan L.R. (2014). *Opredelenie energii elektrona v kvantovoy provoloke s tochechnym defektom [Determination of electron energy in a quantum wire with a point defect]*. Izvestiya NAN Armenii, Fizika [Proceedings of the National Academy of Sciences of Armenia, Physics], t. 49, №2., S. 71-81 [in Armenian].

11. *FIzichnI osnovi suchasnih InformatsIynih tehnologIy [Physical basis of modern information technologies]: Navch.-met. posIbnik. N.L. Sosnitska, N.A. DomIna, N.V. Morozov, G.O. Onischenko. Melltopol: Vidavnicхий budinok MelltopolskoYi mlskoYi drukarnI [Melitopol], 2018. 142 s. [in Ukrainian].*

12. Khalanchuk, L.V., Choporov, S.V. (2018). *Ohliad metodiv heneratsii dyskretnykh modelei heometrychnykh obiektiv [Review of discrete models of geometric objects generation methods]*. Visnyk Zaporizkoho natsionalnoho universytetu: Zbirnyk naukovykh statei. Fyzyko-matematychni nauky. Zaporizhzhia: ZNU. №1. S. 139-152 [in Ukrainian].

13. Lozovski, V., Piatnytsia, V. (2013). *The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 8. 2335–2343. 10.1166/jctn.2011.1965.*

14. Eduard M Kazaryan , Lyudvig S. Petrosyan, Vanik A Shahnazaryan, and Hayk A Sarkisyan Russian-Armenian (Slavonic) University, 0051 Yerevan, Armenia Yerevan State Medical University, 0025 Yerevan, Armenia Science Institute, University of Iceland, Dunhagi-3, IS-107, Reykjavik, Iceland and Yerevan State University, 0025 Yerevan, Armenia

15. K.G. Dvoyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan. *Direct interband light absorption in a strongly prolated ellipsoidal quantum dot. Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2007*

16. Morozov, N.V., Diomina, N.A. *Modelling of electron states in cylindrical and conical quantum dots / Optics and High Technology Material Science, SPO 2018, Scientific works, Kyiv, P. 70–71.*

SOSNICKAYA Natalya, Doctor of Pedagogic Sciences, Professor at the Department of "Higher mathematics and physics", Tavria State Agrotechnological University;

MOROZOV Mykola, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of "Higher mathematics and physics", Tavria State Agrotechnological University;

ONYSHCENKO Halyna, Assistant, Department of "Higher mathematics and physics", Tavria State Agrotechnological University;

KHALANCHUK Larysa, Assistant, Department of "Higher mathematics and physics", Tavria State Agrotechnological University.