УДК 621.315; 539.1

ДОСЛІДЖЕННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНА У ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ ЗІ СТІНКАМИ КІНЦЕВОЇ ВИСОТИ

Морозов М.В., к.ф-м.н., https://orcid.org/0000-0002-5122-8449
Халанчук Л.В., https://orcid.org/0000-0002-6055-6233
Рожкова О.П., https://orcid.org/ 0000-0003-2393-6090
Михайленко О.Ю., https://orcid.org/ 0000-0001-7587-4544
Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Моторного
e-mail: larysa.khalahchuk@tsatu.edu.ua

Анотація **- розглянуто математичне, комп'ютерне моделювання стану електронів у прямокутній потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти. Використовується рівняння Шредінгера для знаходження хвильових функцій та власних значень енергії електрона. Застосування граничних умов та чисельних методів послідовних наближень (ітерацій) дозволяє визначити хвильові числа для різних квантових чисел.**

Для математичного, комп'ютерного моделювання та побудови відповідних графіків хвильової функції та щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області прямокутної потенціальної ями використовуються пакети програм Scilab та Mathcad. Результати досліджень застосовують для методичного забезпечення лабораторного практикуму для магістрантів з дисциплін «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» та «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм».

Ключові слова**: потенціальна яма кінцевої глибини, математичне, комп'ютерне моделювання, власна енергія, дискретні моделі.**

Постановка проблеми. Кванторозмірні системи широко використовують у технічному забезпеченні сучасних інформаційних технологій. Тому розробка та дослідження математичних, комп'ютерних моделей гетеросистем, які мають гранично малі розміри, є актуальною задачею [1]. Використання рівняння Шредінгера для стаціонарних станів хвильової функції та розгляд впливу параметрів 1D потенціальної ями на спектр власних значень енергії електрона представляє значний інтерес.

Аналіз останніх досліджень. Математичне, комп’ютерне моделювання стану електронів у різноманітних гетероструктурах також використовують для методичного забезпечення імітаційних лабораторних робіт з дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» [2,3].

В роботах [4 - 9] представлені моделі різноманітних квантових точок: сферична з оболонкою [4]; циліндрична [5,6]; конічна [7-9]. Розглянуто рішення рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електрона та визначення дискретних рівнів власної енергії для квантових точок з оболонкою і без.

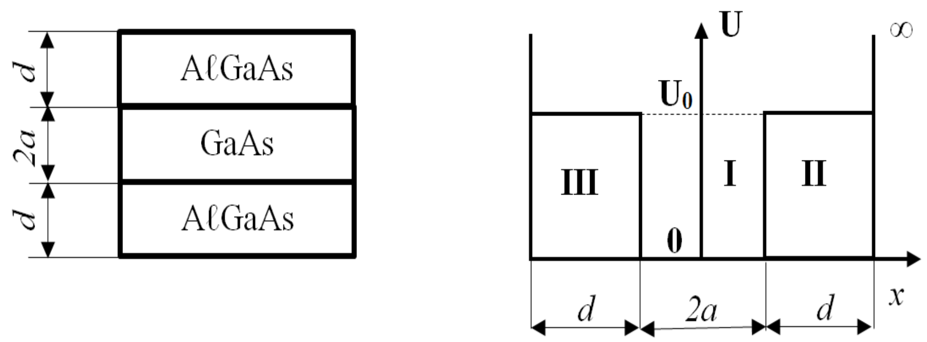
В роботі [6] представлені також чисельні методи рішення рівнянь для граничних (ядро-оболонка) умов хвильової функції та побудови дискретних сіток [10] для отримання графіків щільності ймовірності у циліндричній квантовій точці з оболонкою.

Формулювання цілей статті. Розглянути стан електрона у одновимірній потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти: знайти рішення рівняння Шредінгера, вид хвильової функції, щільності ймовірності та дискретний спектр власних значень енергії.

Також, в роботі необхідно розробити численні методи розв’язання рівнянь граничних умов для хвильової функції електрона, щільності ймовірності та алгоритм побудови графіків, використовуючи пакети програм Mathcad,Scilab.

Основні матеріали дослідження. Розглянемо одновимірну прямокутну потенціальну яму зі стінками кінцевої висоти. Квантові потенціальні ями отримують на базі гетероструктур, наприклад, AℓGaAs – GaAs - AℓGaAs(рис.1). Гетероструктура – це шарова структура з напівпровідників, які мають різну ширину забороненої зони:

$$E_1\ (\text{A}\ell\text{GaAs}) = 1{,}9\ \text{еВ};$$
$$E_2\ (\text{GaAs}) = 1{,}4\ \text{еВ}.$$



а) б)

Рис.1. Потенціальна яма зі стінками кінцевої висоти:
а) базова гетероструктура; б) потенціальна енергія: U_0 – висота стінок, *2a* – ширина, *d* – товщина оболонки.

Потенціал, що обмежує рух електрона, для потенціальної ями має вид:

$$U(x)=\begin{cases}0, -a\le x\le a & (Область\, I)\\ U_0, -(d+a)<x<-a; a<x<(a+d) & (Область\, II, III)\end{cases} \quad (1)$$

Хвильове рівняння Шредінгера для стаціонарних станів S – електронів (орбітальний момент ℓ = 0) для області I (ядро) має вигляд:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+k_1^2\cdot\psi_1(x)=0 \quad (2)$$

де

$$k_1=\frac{\sqrt{2\cdot m\cdot E}}{\hbar} \quad (3)$$

хвильове число для ядра.

Для області II, III (оболонки):

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2}-k_2^2\cdot\psi_2(x)=0 \quad (4)$$

де

$$k_2=\frac{\sqrt{2\cdot m(U_1-E)}}{\hbar} \quad (5)$$

хвильове число для оболонки

Рішення рівняння Шредінгера (2) для області I має вигляд:

$$\psi_1(x)=A\sin k_1x+B\cos k_1x \quad (6)$$

Для області II, III:

$$\psi_2(x)=C\cdot e^{k_2x}+D\cdot e^{-k_2x} \quad (7)$$

Використовуємо граничні умови та визначаємо власні значення енергії.

При $x = a$:

$$\begin{cases}\psi_{1,1}(a)=A_1\sin k_{1,1}a+B_1\cos k_{1,1}a=\psi_{2,1}(a)=C_1\cdot e^{k_{2,1}\cdot a}+D_1\cdot e^{-k_{2,1}\cdot a};\\ \psi_{1,1}'(a)=A_1\cdot k_{1,1}\cdot\cos k_{1,1}a-B_1\cdot k_{1,1}\cdot\sin k_{1,1}a=\psi_{2,1}'(a)=C_1\cdot k_{2,1}\cdot e^{k_{2,1}\cdot a}-D_1\cdot k_{2,1}\cdot e^{-k_{2,1}\cdot a}\end{cases} \quad (8)$$

У випадку, коли $\psi_1(x)$ парна функція $A_1 = 0$, для області III $C_1 = 0$, для області II $D_{1,2} = 0$.

Отримаємо трансцендентне рівняння:

$$tgk_{1,1}a=\frac{k_{2,1}}{k_{1,1}} \quad (9)$$

Рівняння (9) можливо вирішити графічно [11] або чисельним методом. Наприклад, для потенціальної ями

$U_0 = 0,5 еВ$,
$2a = 8\cdot 10^{-9}$ м,
$d = 5\cdot 10^{-9}$ м,
$m = 0,61\cdot 10^{-31}$ кг.

У першому наближенні, коли $tgk_{1,1}a \approx k_{1,1} \cdot a$:

$$E^*_{1,1} = 0{,}116eB;$$

$$U0=0.3eB,$$

$$E_1=0.056eB,$$

$$k_{1,1} = 3.149\cdot 10^8 м^{-1},$$

$$k_{2,1} = 6.573\cdot 10^8 м^{-1}$$

Приведена амплітуда D_1при B_1=1 дорівнює:

$$D_1 = e^{k_{2,1}\cdot a} \cdot \cos k_{1,1}a \qquad (10)$$

Тоді щільність ймовірності дорівнює:

$$\begin{cases} \rho_{1,1}(x) = |\psi_{1,1}(x)|^2 = cos^2 k_{1,1}x; & при \ 0 \le x \le a \\ \rho_{1,2}(x) = |\psi_{2,1}(x)|^2 = cos^2(k_{1,1}\cdot a)\cdot e^{2k_{2,1}\cdot(a-x)} & при \ a \le x \le a+d \end{cases} \qquad (11)$$

У випадку, коли хвильова функція $\psi_2(x)$ непарна B_2 = 0, граничні умови мають вигляд при $x=a$:

$$\begin{cases} \psi_{1,2}(a) = A_2 \sin k_{1,2}a + B_2 \cos k_{1,2}a = \psi_{2,2}(a) = C_2 \cdot e^{k_{2,2}\cdot a} + D_2 \cdot e^{-k_{2,2}\cdot a}; \\ \psi'_{1,2}(a) = A_2 \cdot k_{1,2} \cdot \cos k_{1,2}a - B_2 \cdot k_{1,2} \cdot \sin k_{1,2}a = \psi'_{2,2}(a) = C_2 \cdot k_{2,2} \cdot e^{k_{2,2}\cdot a} - D_2 \cdot k_{2,2} \cdot e^{-k_{2,2}\cdot a} \end{cases} \qquad (12)$$

Отримаємо трансцендентне рівняння:

$$tgk_{1,2}a = -\frac{k_{1,2}}{k_{2,2}} \qquad (13)$$

Визначаємо приведену ($A_2 = 1$) амплітуду D_2 :

$$D_2 = e^{k_{2,2}\cdot a} \cdot \sin k_{1,2}a \qquad (14)$$

Тоді у першому наближенні, якщо

$$tgk_{1,2}a \approx k_{1,2} \cdot a,$$

то

$$k_{2,2} = \frac{\sqrt{2\cdot m(U_1 - E_{2,2})}}{\hbar} = \frac{1}{a};$$

$$E^*_{2,2} = U_1 - \frac{\hbar^2}{2\cdot m\cdot a^2} \approx 0{,}465eB$$

Використовуючи чисельний метод ітерацій визначаємо

$$E_2=0.285eB,$$

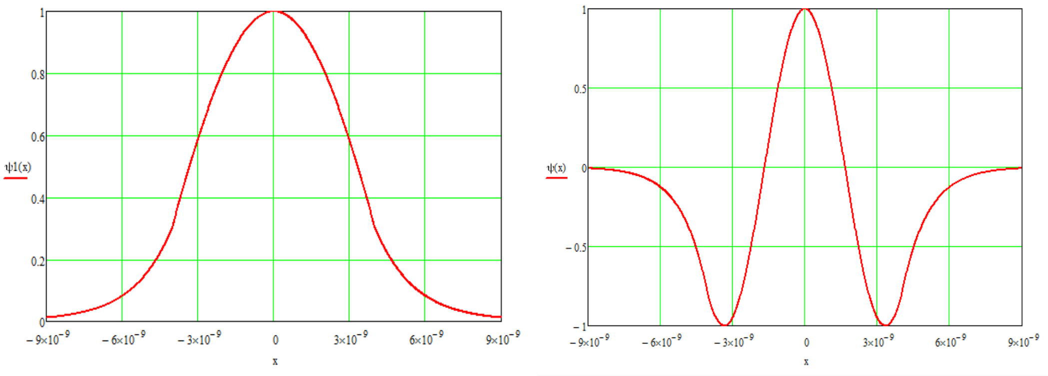
$$k_{1,2} = 7.104\cdot 10^8 м^{-1},$$

$$k_{2,2} = 2.295\cdot 10^9 м^{-1}$$

Щільність ймовірності для непарної хвильової функції дорівнює:

$$\begin{cases} \rho_{2,1}(x) = |\psi_{1,2}(x)|^2 = sin^2 k_{1,2}a; & при \ \ 0 \le x \le a \\ \rho_{2,2}(x) = |\psi_{2,2}(x)|^2 = sin^2(k_{1,2}\cdot a)\cdot e^{2k_{2,2}\cdot(x-a)} & при \ \ a \le x \le a+d \end{cases} \qquad (15)$$

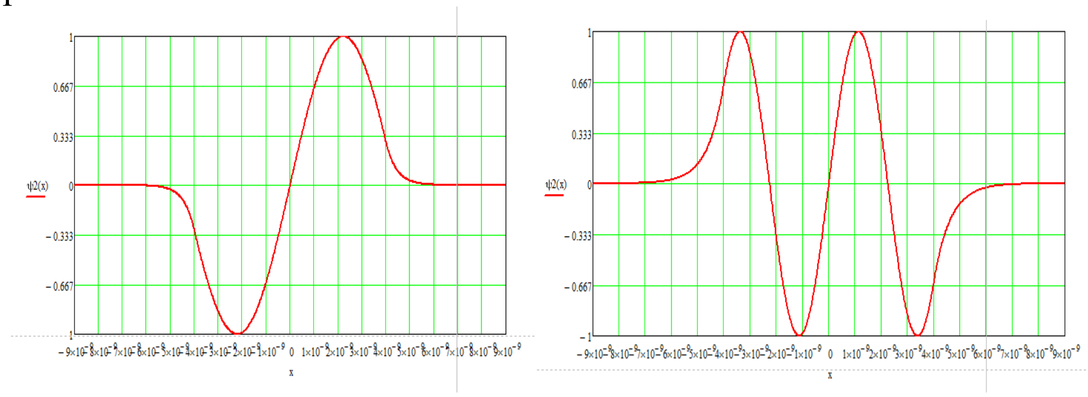
Будуємо графіки парної $\psi_1(-x) = \psi_1(x)$ (рис. 2) та непарної $\psi_2(-x) = -\psi_2(x)$ хвильових функцій (рис. 3).



а) б)

Рис.2. Графіки хвильової функції в потенціальній ямі для парної $\psi_1(-x)=\psi_1(x)$ функції: а) n=1; б) n=2.

Мінімальна енергія електрона у потенціальній ямі залежить від її параметрів: ширини *2a* та глибини U_1. Визначення власної енергії та побудови графіків використовуються математичні пакети MathCad,Scilab. У подальшому представляє значний інтерес розгляд стану електронів у 3D прямокутній потенціальній ямі та моделювання призматичної квантової точки.



а) б)

Рис. 3. Графіки хвильової функції в потенціальній ямі для непарної $\psi_2(-x)=-\psi_2(x)$ функції: а) n=1; б) n=2.

Висновок. В роботі досліджено стан електрона в одновимірній прямокутній потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти. Отримані хвильові функції, щільність ймовірності та власні значення енергії для різних станів електрона. Досліджена залежність дискретних рівнів електрона від параметрів потенціальної ями: ширини і глибини.

Результати математичного, комп’ютерного моделювання використовуються для методичного забезпечення лабораторного практикуму з дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» спеціальності «Комп’ютерні науки» та дисципліни «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм» спеціальності 141 «Електроенергетика, електротехніка і електромеханіка».

У подальшому значний інтерес представляє розгляд фінітного руху електрона та дискретного спектру енергії для прямокутної просторової 3D потенціальної ями (призматичної квантової точки з оболонкою).

Література:

1. *Грибачев В.* Методы получения и применения квантовы хточек: Компоненты и технологии. 2009. С. 127-130.
2. *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.
3. *Сосницька Н.Л., Дьоміна Н.А., Морозов Н.В., Онищенко Г.О.* Фізичні основи сучасних інформаційних технологій : Навч.-мет. посібник / Мелітополь: Видавничий будинок Мелітопольської міської друкарні, 2018. 142 с.
4. *Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.* Моделирование квантовых состояний квантовых точек «ядро/оболочка» CdSe/CdS и CdSe/ZnS. //*Вестник Казанского технологического университета.* 2017. Т. 20, № 19. С. 15-17.
5. *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
6. *Морозов М.В., Халанчук Л.В.*Моделювання стану електрона у циліндричній квантовій точці з оболонкою // Вісник Запорізького національного університету: Збірник наукових статей.Фізико-математичні науки. Запоріжжя: ЗНУ, 2019. №2. С. 117-123.
7. *M.Kazaryan Eduard, S.Petrosyan Lyudvig, A.Shahnazaryan Vanik, A.Sarkisyan Hayk.* Quasi-Conical Quantum Dot: Electron Statesand Quantum Transitions. IOP Publishing Limited, 2015
8. *Lozovski V., Piatnytsia V.* The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. 2013. 8. 2335–2343. 10.1166/jctn.2011.1965.
9. *Сосницька Н.Л., Морозов М.В., Кравець В.І., Халанчук Л.В., ОнищенкоГ.О.* Моделювання стану електрону у конічних квантових точках. //Математичне та комп’ютернемоделювання.

Серія: Фізико-математичні науки : зб. наук.праць / Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова Національної академії наук України, Кам’янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка. Кам’янець-Подільський: Кам’янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2019. С. 110-115.
10. *ХаланчукЛ.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.
11. *Шпольский Э.В.* Атомная физика. Т. 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атомов. М.: Наука, 1974, 447 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ СО СТЕНКАМИ КОНЕЧНОЙ ВЫСОТЫ

Морозов Н.В., Халанчук Л.В., Рожкова Е.П., Михайленко Е.Ю.

Аннотация

Рассмотрено математическое, компьютерное моделирование состояния электронов в прямоугольной потенциальной яме со стенками конечной высоты. Используется уравнение Шредингера для поиска волновых функций и собственных значений энергии электрона. Применение граничных условий и численных методов последовательных приближений (итераций) позволяет определить волновые числа для разных квантовых чисел.

Для математического, компьютерного моделирования и построения соответствующих графиков волновой функции и плотности вероятности нахождения электрона в заданной области прямоугольной потенциальной ямы используются пакеты программ ScilabиMathcad. Результаты исследований применяют для методического обеспечения лабораторного практикума для магистрантов по дисциплине «Физические основы современных информационных технологий» и «Физико-математическое обеспечение магистерских программ».

Ключевые слова: **потенциальная яма конечной глубины, математическое, компьютерное моделирование, собственная энергия, дискретныемодели.**

RESEARCH OF THEELECTRON STATE IN A POTENTIAL PIT WITH FINITE HEIGHT WALLS

M.Morozov, L.Khalanchuk, O.Rozhkova, O.Mykhailenko

Summary

Quantum systems are widely used in the technical support of modern information technologies. Therefore, the development and research of mathematical, computer models of heterosystems, which are extremely small, is an urgent task. The use of the Schrödinger equation for stationary states of the wave function and the consideration of the influence of the parameters of the 1D potential well on the spectrum of the eigenvalues of the electron energy are of considerable interest.

Mathematical, computer modeling of the state of electrons in a rectangular potential well with walls of finite height is considered. Quantum potential wells are obtained on the basis of heterostructures, for example, AℓGaAs - GaAs - AℓGaAs. A heterostructure is a layered structure of semiconductors that have different band gaps. The Schrödinger equation is used to find the wave functions and the eigenvalues of the electron energy.

The application of boundary conditions and numerical methods of successive approximations (iterations) allows to determine wave numbers for different quantum numbers. The wave functions, probability density and eigenvalues of energy for different electron states are obtained. The dependence of discrete electron levels on the parameters of the potential well: width and depth is investigated.

Numerical methods for solving the equations of boundary conditions for the electron wave function, probability density, and the algorithm for plotting have been developed. Scilab and Mathcad software packages are used for mathematical, computer modeling and construction of appropriate graphs of the wave function and the density of the probability of finding an electron in a given area of a rectangular potential well. The research results are used for methodological support of laboratory workshops for undergraduates in the disciplines "Physical foundations of modern information technology" and "Physical and mathematical support of master's programs".

Key words: **potential pit of finite depth, mathematical, computer modeling, self-energy,discrete models.**