



XIV Міжнародна науково-практична конференція магістрантів та аспірантів

**ТЕОРЕТИЧНІ ТА
ПРАКТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ**

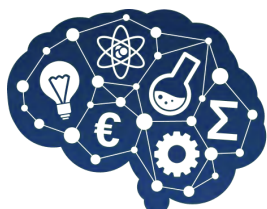
ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ



**TAL
TECH**



**01-04 грудня 2020
Україна, Харків, НТУ «ХПІ»**



РАДА МОЛОДИХ ВЧЕНИХ
НТУ «ХПІ»

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
„ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”
OTTO-VON-GUERICKE-UNIVERSITÄT, MAGDEBURG
TALLINN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, ESTONIA
RIGA TECHNICAL UNIVERSITY, LATVIA

**XIV МІЖНАРОДНА
НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ
МАГІСТРАНТІВ ТА АСПІРАНТІВ
(01–04 грудня 2020 року)**

Матеріали конференції

Харків 2020

УДК 621.315.592

МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНА У КВАНТОВІЙ НИТЦІ**В. В. Шквиря¹, А. Ф. Дяденчук²**¹ студент факультету енергетики і комп'ютерних технологій, ТДАТУ, Мелітополь, Україна² старший викладач кафедри «Вища математика і фізика», канд. техн. наук, ТДАТУ, Мелітополь, Українаalena.dyadenchuk@tsatu.edu.ua

Прогрес у сучасних нанотехнологіях актуалізував вивчення проблеми квантових станів електрона в низьковимірних системах, до яких відносяться нанодропи і нанотрубки [1]. Дані структури викликають величезний інтерес дослідників завдяки високому ступеню локалізації носіїв заряду. Оскільки нанодропи характеризуються великим відношенням площі поверхні до об'єму, навіть незначні зовнішні впливи можуть призводити до помітних змін їх транспортних характеристик. Властивості таких структур, а значить і приладів на їх основі, в основному визначаються їх електронним спектром, який відрізняється від електронного спектру об'ємних матеріалів.

Метою роботи є обчислення енергетичного спектру електронів у квантовій нитці, що являє собою наноккомпозит $\text{TiO}_2/\text{porous-Si}$.

Енергію основного стану електрона в квантовій нитці знаходимо розв'язавши стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 f(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = Ef(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де $U(\mathbf{r})$ – потенціал, що характеризує рельєф краю зони провідності в квантовій ямі, $f(\mathbf{r})$ – огибаюча блохівської хвильової функції електрона в кристалі.

Для розв'язку рівняння (1) скористаємося циліндричною системою координат. Надалі індексом А позначаться параметри зони провідності у вузькозонному матеріалі (Si), а індексом В – у широкозонному (TiO_2). При розв'язуванні врахуємо, що потенціал U й ефективна маса m^* електрона залежать від ρ . Потенційна енергія електрона задається виразом:

$$U(\rho) = \begin{cases} E_{cA}, & 0 \leq \rho \leq r \\ E_{cB}, & r \leq \rho \leq R \\ \infty, & \rho > R \end{cases} \quad (2)$$

де $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ – радіальна координатна змінна в поперечному перерізі нитки, r – радіус внутрішньої нитки, R – радіус зовнішньої трубки.

Ефективна маса виражається:

$$m^*(\rho) = \begin{cases} m_A^*, & 0 < \rho < r \\ m_B^*, & r < \rho < R \end{cases} \quad (3)$$

При цьому $m_B^* > m_A^*$, оскільки напівпровідники з більшою забороненою зоною характеризується більшою ефективною масою електронів.

При виведенні граничних умов гетероструктура розбивається на три області: дві області є однорідні об'ємні напівпровідники, а третя – вузька прикордонна область. Передбачається, що далеко від гетерограниці огибаюча хвильова функція задовольняє звичайному рівнянню ефективної маси для об'ємних напівпровідників. Вимоги

безперервності хвильової функції повинні зберігатися також і на гетерограниці, де через розрив зон має місце різка зміна ефективного потенціалу. Оскільки для матеріалів ефективні маси будуть різні, при записі граничних умов необхідно враховувати зміну ефективної маси носіїв для консервації щільності потоку ймовірності при перетині межі.

$$\begin{aligned} \psi(r_A) &= \psi(r_B), \\ \frac{1}{m_A^*} \frac{d\psi(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=r_A} &= \frac{1}{m_B^*} \frac{d\psi(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=r_B}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для розв'язання рівняння Шредінгера необхідно вирішити рівняння окремо для областей А і В, а потім «зшити» розв'язок на межі областей з урахуванням граничних умов.

Записавши початкові та граничні умови знаходимо розв'язок рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електронів [2]. Наразі відбувається отримання та дослідження нанокompatитів $\text{TiO}_2/\text{porous-Si}$ з метою подальшого аналізу відповідності отриманих в даній роботі значень провідності й експериментальних даних.

Список літератури:

1. Дяденчук, А. Ф. Нанотрубки оксиду цинку, отримані методом радикало-променевої епітаксії на поруватій поверхні селеніду цинку / А. Ф. Дяденчук, В. В. Кідалов // Вчені записки Таврійського національного університету імені ВІ Вернадського. Серія: Технічні науки. – 2018. – Т. 29 (68), № 1 (3). – С. 214-218.
2. Морозов, М. В. Моделювання стану електрона у циліндричній квантовій точці з оболонкою / М. В. Морозов, Л. В. Халанчук // Вісник Запорізького національного університету. Фізико-математичні науки. – 2019. – № 2. – С. 117-123.