

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені М. П. ДРАГОМАНОВА



# Матеріали

МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

«ОСВІТА ТА НАУКА : ПАМ'ЯТАЮЧИ ПРО МИНУЛЕ,  
ТВОРИМО МАЙБУТНЄ»

<b>Терещук Андрій, Терещук Сергій, Колмакова Віра</b> Застосування технології мобільного навчання для розвитку STEM-освіти у вимірі нової української школи	261-263
<b>Топоріна Марія</b> Розвиток творчого мислення учнів на уроках фізики з використанням методу проєктів	264-267
<b>Ущатовська Ірина</b> Назва бренду: до визначення маркетингових та лінгвістичних характеристик	268-271
<b>Фофанов Олександр, Фофанов Вячеслав, Юрцева Алла, Надбродна Ольга</b> Особливості дистанційного навчання студентів-медиків на клінічних кафедрах в умовах карантину	272-276
<b>Хуторна Анна</b> Вплив високоосвічених європейських наукових кіл на розвиток фізичної науки у вітчизняних класичних університетах (XIX ст.)	277-278
<b>Цоколенко Олександр</b> Євгеній Васильович Коршак про видатних учених	279-283
<b>Чінчой Олександр</b> Розширення кругозору учнів під час вивчення практичного використання аеродинаміки в сучасних видах спорту	284-287
<b>Шатковська Галина, Літвинчук Світлана</b> Компетентність як педагогічне явище	288-290
<b>Шевченко Лариса</b> Розвиток ключових фахових компетентностей медичних сестер в сучасному освітньому просторі	291-294
<b>Шкуренко Олександра</b> Реалізація здоров'язберезувальних технологій у процесі вивчення інформатики	295-298
<b>Шут Микола, Благодаренко Людмила, Січкара Тарас</b> Нова спеціальність «Середня освіта (Фізика) та робототехніка» : актуальність і перспективи	299-303
<b>Пудченко Сергій, Остролицька Наталія</b> Професор Коршак Є.В. – популяризатор науки на фізико-математичному факультеті НПУ імені М.П. Драгоманова	304-309
<b>Кух Аркадій, Кух Оксана</b> Експеримент в технології наочного навчання	310-315
<b>Пудченко Сергій, Васьковська Ольга</b> Михайло Васильович Остроградський	316-320
<b>Морозов Микола, Халанчук Лариса, Кравець Василь, Рожкова Олена</b> Застосування математичного моделювання у лабораторному практикумі з фізики	321-327

**ЗАСТОСУВАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ У ЛАБОРАТОРНОМУ  
ПРАКТИКУМІ З ФІЗИКИ**

**Морозов Микола Вікторович**

*кандидат фізико-математичних наук, доцент,  
Таврійський державний агротехнологічний  
університет імені Дмитра Моторного,  
nv52morozov@gmail.com*

**Халанчук Лариса Вікторівна**

*асистент,  
Таврійський державний агротехнологічний  
університет імені Дмитра Моторного,  
larysa.khalanchuk@tsatu.edu.ua*

**Кравець Василь Іванович**

*кандидат фізико-математичних наук, доцент,  
Таврійський державний агротехнологічний  
університет імені Дмитра Моторного  
v\_i\_kravets@ukr.net*

**Рожкова Олена Павлівна**

*старший викладач,  
Таврійський державний агротехнологічний  
університет імені Дмитра Моторного,  
olena.rozhkova@tsatu.edu.ua*

**Постановка проблеми.** Віртуальні імітаційні лабораторні роботи знаходять все більш широке застосування, в першу чергу при дистанційній формі навчання [1, 2]. Тому дослідження відповідних математичних моделей процесів та систем є

актуальною задачею науково-методичного забезпечення лабораторного практикуму з фізики.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Для моделювання стану електронів в квантових точках (КТ) використовують рівняння Шредінгера та відповідний обмежуючий потенціал. Власні значення енергії електрона визначаються формою, розмірами, речовиною ядра КТ та параметрами оболонки. У роботах [3-6] розглянуто стан електрона у циліндричній КТ для різних моделей обмежуючого потенціалу. В статті [7] приведено результати моделювання сферичних КТ з оболонкою. Аналітичні дослідження стану електрона у пірамідальних КТ з використанням модифікованої циліндричної системи координат представлено в роботі [8]. У статтях [9-12] розглянуто моделі конічних КТ з оболонкою та без. Отримано залежність власної енергії електрона від висоти та радіуса основи конуса.

**Виклад основного матеріалу.** В останній час низькорозмірні квантові гетероструктури, в першу чергу КТ, знаходять все більш широке застосування в елементній базі сучасної наноелектроніки внаслідок гранично малих розмірів та максимальної швидкодії. Наприклад: лазери, монітори, модулятори, сонячні панелі, приймачі з використанням різноманітних КТ.

Розглянемо найпростішу модель прямокутної призматичної КТ з ребрами  $a$ ,  $b$ ,  $c$  і оболонкою товщиною  $d$ . Це аналог просторової (3D) потенціальної ями зі стінками кінцевої висоти [13]. Речовина ядра – напівпровідник  $n$ -типу, оболонки – напівпровідник  $p$ -типу.

У першому наближенні потенціальна енергія (модель обмежуючого потенціалу) має вигляд:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{для ядра,} \\ U_0, & \text{для оболонки.} \end{cases} \quad (1)$$

Хвильове рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електрона у ядрі має вигляд:

$$\left(\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2}\right) + k_1^2 \cdot \psi_1(x, y, z) = 0, \quad (2)$$

де  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  – хвильове число електрона у ядрі КТ.

Для оболонки КТ у випадку, коли потенціальна енергія більша повної енергії ( $U_0 > E$ ), рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\left(\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2}\right) - k_2^2 \cdot \psi_2(x, y, z) = 0, \quad (3)$$

де  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$  – хвильове число електрона в оболонці.

Для випадку непарної хвильової функції відповідно методу Фур'є розділення змінних рішення рівняння Шредінгера для ядра шукаємо у вигляді:

$$\psi_1(x, y, z) = A \cdot \text{sink}_{1,1}x \cdot \text{sink}_{1,2}y \cdot \text{sink}_{1,3}z, \quad (4)$$

де  $k_1^2 = k_{1,1}^2 + k_{1,2}^2 + k_{1,3}^2$ .

Для оболонки хвильова функція має вигляд:

$$\psi_2(x, y, z) = B \cdot e^{-k_{2,1}x} \cdot e^{-k_{2,2}y} \cdot e^{-k_{2,3}z} \quad (5)$$

Власні значення хвильових чисел, енергії та приведену амплітуду  $B$  (при  $A=1$ ) знаходимо, використовуючи граничні умови ядро-оболонка: хвильова функція повинна бути неперервною та гладкою. Отримані рівняння розв'язуються чисельним методом послідовних наближень (ітерацій). Для визначення початкового, нульового наближення використовується модель абсолютно непрозорої стінки ядра КТ:  $\psi_2(x, y, z) \rightarrow 0$ .

Тоді, якщо  $a = b = c = 10^{-8}$  м,  $d = 6 \cdot 10^{-9}$  м,  $U_0 = 0,5$  eВ, та ефективна маса електрона  $m = 0,7 \cdot 10^{-31}$  кг, тоді власні хвильові числа дорівнюють:  $k_{1,1} = k_{1,2} = 0,476 \cdot 10^9$  м<sup>-1</sup>,  $k_{2,1} = k_{2,2} = 0,334 \cdot 10^9$  м<sup>-1</sup>.

Приведена амплітуда хвильової функції для оболонки дорівнює:

$$B_1 = e^{-k_{2,1} \frac{a}{2}} \cdot \text{sink}_{1,1} \frac{a}{2} \quad (6)$$

Вид хвильової функції  $\varphi(x)$  обчислено і побудовано в пакеті програм MathCad (рис. 1).

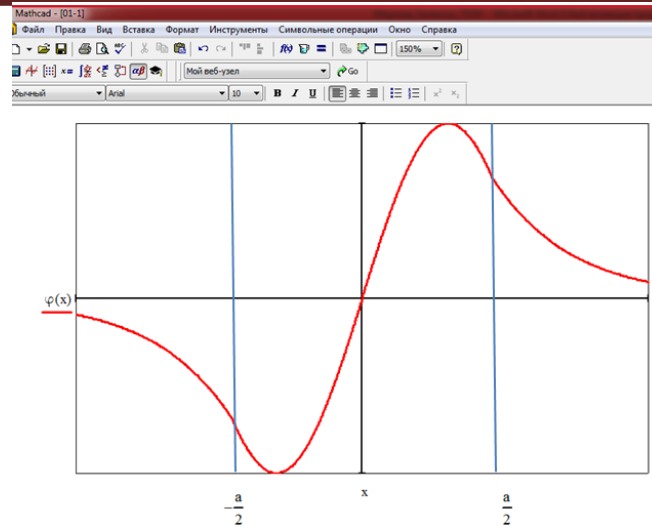


Рис. 1. Графік хвильової функції  $\varphi(x)$  при значенні квантового числа  $n_1=1$

Тоді щільність ймовірності дорівнює:

$$\begin{cases} \rho_1(x, y) = \sin^2 k_{1,1}x \cdot \sin^2 k_{1,2}y, \\ \rho_2(x, y) = B^2 \cdot e^{-2k_{2,1}x} \cdot e^{-2k_{2,2}y}, \end{cases} \quad (7)$$

Для моделювання щільності ймовірності (рис. 2) використано методи дискретних сіток та середа програмування Scilab [14].

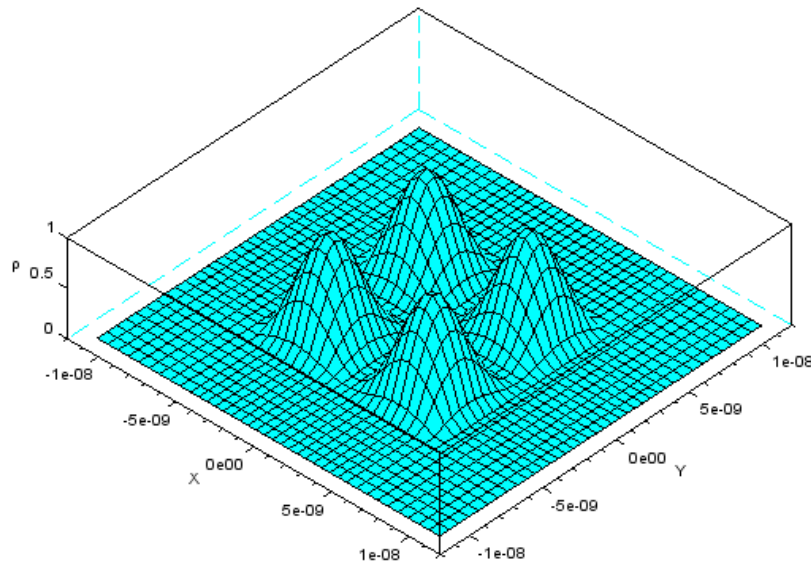


Рис. 2. Щільність ймовірності знаходження електрона для непарної хвильової функції при значенні квантових чисел  $n_1=n_2=1$

**Висновки.** Розглянуто розв'язок рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електрона для призматичної прямокутної чотиригранної КТ з оболонкою та

залежність власної енергії електрона від її параметрів. Застосування математичного моделювання дозволяє організувати віртуальні імітаційні лабораторні роботи, що забезпечує поглиблене вивчення курсу фізики (розділи атомна, квантова фізика, фізика твердого тіла).

В подальшому представляє інтерес розгляд випадку парної хвильової функції та порівняння результатів дослідження з результатами для КТ іншої форми (сферичних, циліндричних).

### Література

1. 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.
2. Sosnickaya N., Morozov M., Khalanchuk L., Onyshchenko H. Modelling the Electromagnetic Processes and Phenomena in QuantumSized Systems in the Course of Physical and Mathematical Support of Master's Programs for the "Electric Power Engineering, Electrical Engineering and Electromechanics Specialty". Proceedings of the International Conference on Modern Electrical and Energy Systems, MEES 2019 (Kremenchuk; Ukraine; 23 September 2019 - 25 September 2019). 2019. DOI: 10.1109/MEES.2019.8896623
3. 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.
4. Алексанян А., Арамян К., Никогосян Г., Буниатян В. Управление энергией основного перехода в цилиндрической квантовой точке, покрытой слоем квантовой ямы // Ученые записки Арцахского государственного университета, естественные науки. 2015. – № 1. – С. 39-44.

5. Айрапетян Д. Б., Котанджян Т. В., Тевосян О. Х. Моделирование ограничивающего потенциала для цилиндрической квантовой точки // Известия НАН РА: Физика, 2014. – Т. 49. № 6. – С. 410-414.
6. Айрапетян Д. Б., Казарян Э. М., Тевосян О. Х. Примесные состояния в цилиндрической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля–Теллера // Известия НАН РА: Физика, 2014. – Т. 49. № 3. – С. 190-195.
7. 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.
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. – P. 2335–2343.
9. Kazaryan E. M., Petrosyan L. S., Shahnazaryan V. A., Sarkisyan H. A. Quasi-conical quantum dot: electron states and quantum transitions // Communications in Theoretical Physics, 2015. – Vol. 63. № 2. – P. 255-260.
10. Hayrapetyan D. B., Chalyan A. V., Kazaryan E. M., Sarkisyan H. A. Direct Interband Light Absorption in Conical Quantum Dot // Journal of Nanomaterials, 2015. № 1. P. 1-6. DOI:10.1155/2015/915742
11. Багдасарян Д. А., Айрапетян Д. Б., Саркисян А. А., Казарян Э. М., Медвид А. Коническая квантовая точка: электронные состояния и дипольный момент // Известия НАН Армении, Физика, 2017. – Т. 52. №2. – С. 177-188.
12. Сосницька Н. Л., Морозов М. В., Кравець В. І., Халанчук Л. В., Онищенко Г. О. Моделювання стану електрону у конічних квантових точках // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць. – Кам'янець-Подільський: Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2019. – С. 110-115.

13. Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атомов. – М.: Наука, 1974. – 447 с.
14. 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.



Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції «Освіта та наука : пам'ятаючи про минуле, творимо майбутнє» / Відповідальний редактор проф. Т.Ю. Дудка. – К., 2020. – 319 с.

