

УДК: 537, 681.3
МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНА У КВАНТОРОЗМІРНИХ
ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Н.А. Дьоміна, М.В. Морозов

Таврійський державний агротехнологічний університет, Мелітополь
e-mail: deminanatasha@yandex.ua

Постановка проблеми. Математичне моделювання широко використовується для розв'язання практичних задач різних галузей науки, техніки, виробництва. Математичне моделювання є одним із основних сучасних методів дослідження. У зв'язку з інтенсивним розвитком інформаційних технологій розробка математичних комп'ютерних моделей є актуальною задачею.

Мета дослідження. Розглянути математичні моделі стану електронів у кванторозмірних гетероструктурах та розробити математичні комп'ютерні моделі, зокрема для проведення навчальних занять

Аналіз актуальних досліджень. У попередніх роботах розглянуто моделювання поведінки електрона у різноманітних кванторозмірних гетеросистемах для проведення імітаційних лабораторних робіт дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» [1, 2], але немає реалізації на комп'ютері цих математичних моделей для уявлення про можливі кордони або типи поведінки системи, впливи на неї різних чинників. Для комп'ютерного моделювання пропонується математичний пакет MathCAD [3]. Цей пакет популярний в інженерному середовищі. Математичний пакет MathCAD реалізує три основних редактора: текстовий, редактор формул і графічний, що забезпечує задачі математичного моделювання. Пакет MathCAD є середовищем візуального програмування, тобто не вимагає знання специфічного набору команд. Зручність освоєння пакета, простий інтерфейс, відносна невибагливість до можливостей комп'ютера - головне, чому саме цей пакет був обраний, особливо при навчанні студентів.

Викладення основного матеріалу дослідження. У роботі описані моделі поведінки електронів у потенціальній квантовій ямі, як у випадку нескінченної висоти стінок, так і для ями з кінцевою висотою [4].

Було розглянуто енергетичний спектр електрона в одновимірній ямі у випадку, коли потенціальна енергія стінки прямує до нескінченності. Для стаціонарного стану рівняння Шредінгера для хвильової функції $\varphi(x)$ у одновимірній квантовій ямі має вигляд:

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi = 0.$$

Для одновимірної потенціальної ями нескінченної глибини, коли повна енергія електрона набагато менша ($E \ll U$) висоти стінки квантової ями, потенціальна енергія має вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{якщо } x < 0 \\ 0, & \text{якщо } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{якщо } x > a \end{cases}$$

Остаточно хвильова функція електрона в квантовій записується:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right).$$

На основі математичної моделі були розроблені програми (MathCAD) для комп'ютерного моделювання стану електрона в квантовій ямі. Квантові потенціальні ями на гетероструктурах використовують для створення напівпровідникових лазерів, світлодіодів, фотоприймачів у приладах інформаційних технологій.

Також було розглянуто стаціонарні стани електрона у одновимірній потенціальній ямі зі стінками кінцевої висоти U_0 , ширина якої a .

Потенціальна енергія електрона має вигляд:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{якщо } x < 0 \\ 0, & \text{якщо } 0 \leq x \leq a \\ U_0, & \text{якщо } x > a \end{cases}$$

Рівняння Шредінгера для хвильової функції $\varphi(x)$ стаціонарних станів у цьому випадку:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi_1 = 0 \\ \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi_2 = 0 \\ \frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \varphi_3 = 0 \end{cases}$$

Використовуючи умову нормування хвильової функції, остаточно отримуємо від хвильових функцій $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ та $\varphi_3(x)$:

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A \cdot \sin \alpha \cdot e^{k_1 x} \\ \varphi_2(x) = A \cdot \sin(k_2 x + \alpha) \\ \varphi_3(x) = A \cdot e^{k_1 x} \cdot \sin(k_2 x + \alpha) \cdot e^{k_1 x} \end{cases}$$

Для цієї математичної моделі також була розроблена комп'ютерна модель процесу. Особливий інтерес представляє застосування пакету MathCAD при анімації або «оживлення» відповідних графіків $\varphi_n(x)$ та $\rho_n(x)$. Використовується команда «Animation» на панелі інструментів MathCAD та відповідні формули для $\varphi(x, n)$ та $\rho(x, n)$. В цих формулах застосовується змінна FRAME n . Діапазон зміни цієї величини FRAME $n = 1 \dots 5$ та частота кадрів задається у діалоговому вікні команди «Animation», у якому і спостерігається зміна вигляду відповідного графіка $\varphi_n(x)$ та $\rho_n(x)$.

Висновки. Були розглянуті математичні моделі поведінки електронів у кванторозмірних гетероструктурах та розроблені комп'ютерні моделі цих процесів, зокрема для проведення навчальних занять. Використання ПК спрямовано на активізацію та підвищення ролі самостійної роботи студентів, що дозволяє більш ефективно використовувати час студентів і викладачів. Таким чином, формування у студентів навичок мислення засобами інформаційних технологій забезпечує підготовку студентів до життя в інформаційному суспільстві.

Література

1. Дьоміна Н. А. Моделювання кванторозмірних гетероструктур при організації імітаційних лабораторних робіт / Н.А. Дьоміна, М.В. Морозов // Збірник науково-методичних праць «Удосконалення навчально-виховного процесу в вищому навчальному закладі» – Мелітополь. – 2015. – В.18. – С. 67-74.
2. Імітаційні лабораторні роботи з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» та моделювання кванторозмірних структур: (матеріали II Всеукраїнської науково-практичної конференції кафедри дидактики та методик навчання природничо-математичних дисциплін комунального закладу "Запорізький обласний інститут післядипломної педагогічної освіти" Запорізької обласної ради «Розвиток сучасної природничо-математичної освіти 2015») [Електронний ресурс] / Н.А Дьоміна, М.В. Морозов // м. Запоріжжя. – 5-9 жовтня 2015 р. – Режим доступу:
3. http://confdidakt-2.blogspot.com/p/blog-page_13.html,
<https://drive.google.com/file/d/0B7WH9R9G1nxuQ3JxRV9nVjRqWUE/view?pli=1>
4. Дьяконов В.П. MathCad 2001i: энциклопедия. – СПб.: Питер, 2004- 832 с.
5. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т. 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома / Э.В. Шпольский. – М.: Наука, 1974. – 448 с.