

МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНІВ У ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

Хлепiтько В.В., Мамонтов Р.В., магістрант

Науковий керівник : Морозов М.В., к.ф.-м.н., доцент

Таврійський державний агротехнологічний університет

Постановка проблеми. У сучасній елементній базі комп'ютерної техніки все більше широко використовують різноманітні квантові точки (Quantum Dot's). Тому актуальні дослідження стану електрона у таких кванторозмірних системах та визначення дискретних спектрів власних значень енергії.

Мета статті. Пропонується найпростіша модель циліндричної квантової точки зі стінками нескінченної висоти та розглядається рівняння Шредінгера у циліндричній системі координат.

Основні матеріали дослідження. Рівняння Шредінгера для стаціонарних S-станів електронів у циліндричній системі координат [1] має вигляд:

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

Розв'язок рівняння (1) для циліндричної квантової точки з нескінченно високими стінками ($U_1=0$) має вид (метод Фур'є розділення змінних):

$$\psi(r, z) = \varphi_1(r) \varphi_2(z) = A J_0(k_1 r) \sin(k_2 z), \quad (2)$$

де $J_0(k_1 r)$ – функція Бесселя нульового порядку першого роду.

Визначаємо хвильові числа, використовуючи граничні умови:

$$k_{1,n} = \frac{b_{n,1}}{R} \quad (3) \quad k_{2,n} = \frac{\pi n_2}{H} \quad (4)$$

де $b_{n,1}$ – нулі функції Бесселя нульового порядку; $n_2 = 1, 2, \dots$ - квантове число; R – радіус, H – висота циліндричної квантової точки.

Отримуємо дискретні значення власної енергії електрона $E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2)$.

Амплітуда A_n хвильової функції (стану інтегрування) визначаємо з умови нормування

$$\int |\psi_{n_1, n_2}|^2 \Psi V = 1:$$

$$A_n = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi H} J_1(b_n) J_1(k_1 R)} \quad (6)$$

де $J_1(k_1 R) = J_1(b_n)$ – значення функції Бесселя першого порядку

Щільність ймовірності дорівнює $\rho(r, z) = |\psi(r, z)|^2$.

Моделювання стану електронів дозволяє отримати графіки хвильової функції та щільності ймовірності за допомогою MathCad для різних значень квантових чисел.

Висновки. Результати досліджень використовуються для організації імітаційних лабораторних робіт з дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» та «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм» [2].

Список використаних джерел.

1. Айрапетян Д.Б. Моделирование ограничивающего потенциала для цилиндрической квантовой точки / Айрапетян Д.Б., Котанджян Т.В., Тевосян О.Х. // Известие НАН Армении. Физика, 2014. - т.49, №6. - С. 410-414.
2. Дьоміна Н.А., Морозов М.В. Моделювання кванторозмірних гетероструктур у лабораторному практикумі з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» / Н.А. Дьоміна, М.В. Морозов // Наукові записи ДПУ ім. В.Виниченка. – Кропивницький, 2017. - Вип. 12. - С. 72-79.