

## МОДЕЛЮВАННЯ СФЕРИЧНИХ ТА ЦИЛІНДРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Дьоміна Н. А., к. т. н.,

Морозов М. В., к. ф.-м. н.

*Таврійський державний агротехнологічний університет  
ім. Д. Моторного*

Тел. (0619) 42-68-62

*Анотація* – розглянуто найпростіші моделі 3D просторових квантових точок: сферичної та циліндричної. Математичне, комп'ютерне моделювання стану електронів у кванторозмірних структурах використовується при розробці імітаційних лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» для магістрів спеціальності «Комп'ютерні науки та інформаційні технології проектування». При комп'ютерному моделюванні застосовується математичний пакет Mathcad. Особливий інтерес представляє розгляд поведінки електрона у випадку просторових потенціальних ям зі стінками кінцевої висоти. Квантові точки (КТ – Quantum Dots) використовують в елементній базі наноелектроніки, в першу чергу при створенні дисплеїв четвертого покоління (AMOLED-технологія), які приходять на зміну рідинно кристалічним дисплеям. Крім того, перспективним є створення лазерів на КТ.

Властивості квантових точок (дискретний спектр значень власної енергії) залежить від їх форми, розмірів та матеріалу (величини ефективної маси носіїв заряду). Важливу роль грають також граничні умови – вид потенціалу, який обмежує рух електронів. Найпростіша модель КТ є тривимірна нескінченно глибока просторова потенціальна яма. Але реальні квантові точки (як з оболонкою, так і без) мають потенціальні стінки кінцевої висоти, тому моделювання електронної структури та визначення хвильової функції і щільності ймовірності у цьому випадку є актуальною задачею.

Розглядається розв'язування рівняння Шредінгера для хвильової функції стаціонарних станів S-електронів у сферичній та циліндричній системах координат. Отримані у першому наближенні власні значення енергії, вид хвильової функції та щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області

простору.

**Ключові слова** – сферична і циліндрична квантові точки, комп'ютерне моделювання, імітаційні лабораторні роботи.

*Постановка проблеми.* Квантові точки знаходять все більш широке застосування у квантовій наноелектроніці. Тому розборка математичних, комп'ютерних моделей кванторозмірних структур є актуальною як для організації імітаційних лабораторних робіт з дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій», так і для подальшого застосування при проектуванні гетероструктур наноелектроніки, у тому числі лазерів на квантових точках

*Аналіз останніх досліджень.* Поведінка електронів (хвильові функції та енергетичні спектри) в сферичних та циліндричних квантових точках представлені в роботах [2, 3].

*Формулювання цілей статті (постановка завдання).* Дослідити комп'ютерні, математичні моделі тривимірних потенціальних ям зі стінками кінцевої висоти, визначити хвильові функції, щільність ймовірності та спектр власних значень енергії для забезпечення імітаційних, віртуальних лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій».

*Основна частина.* 1. Розглянемо найпростішу модель сферичної квантової точки радіуса  $R_1$  (рис. 1, в). Це аналог просторової сферичної потенціальної ями зі стінкою кінцевої висоти ( $U_0 > E$ ), потенціальна енергія  $U_0$ , якої більша повної енергії електрона. У першому наближенні потенціальна енергія електрона дорівнює (рис. 1, б):

$$U(r) \equiv \begin{cases} 0, & \text{якщо } r \leq R_1 \\ U_0, & \text{якщо } r > R_1 \end{cases} \quad (1)$$

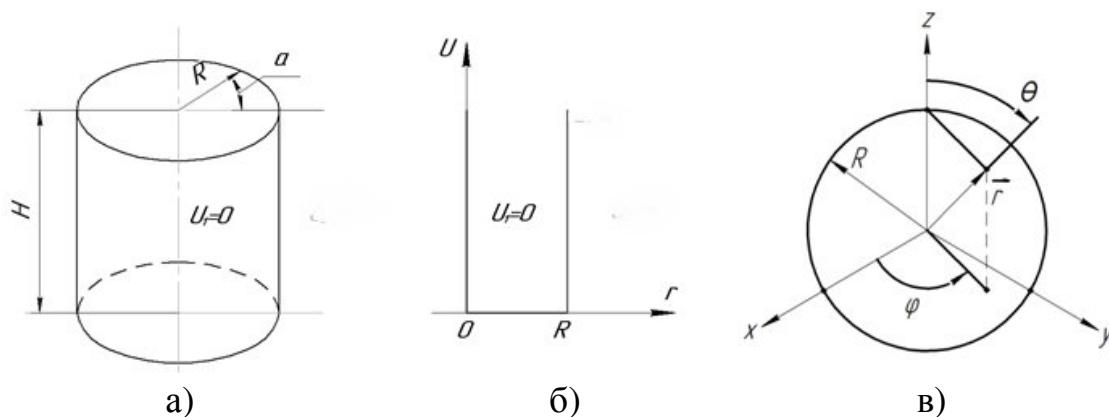


Рис. 1. а) циліндрична квантова точка (quantum wire); б) потенціальна енергія електрона; в) сферична квантова точка (quantum dot)

Тоді рівняння Шредінгера для стаціонарних  $S$ -станів електрона у сферичній системі координат має вигляд:

$$\text{для області 1: } \varphi_1'' + \frac{2}{r} \varphi_1' + k_1^2 \cdot \varphi_1(r) = 0, \quad \text{при } 0 \leq r \leq R_1 \quad (2)$$

$$\text{для області 2: } \varphi_2'' + \frac{2}{r} \varphi_2' + k_2^2 \cdot \varphi_2(r) = 0, \quad \text{при } r > R_1, \quad (3)$$

де  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ;  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$  – хвильові числа.

Диференціальне рівняння (2) є одним з різновидів рівнянь Бесселя та має наступний розв'язок:

$$\varphi_1(r) = \frac{A}{\sqrt{r}} \cdot J_{1/2}(k_1 \cdot r) = \frac{A_1}{r} \sin(k_1 \cdot r), \quad (4)$$

де  $J_{1/2}(k_1 \cdot r) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot k_1 \cdot r}} \cdot \sin(k_1 \cdot r)$  – функція Бесселя першого роду порядку  $1/2$ .

Якщо  $k = ik_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$ , то розв'язок диференціального рівняння (3) має вигляд:

$$\varphi_2(r) = \frac{B \cdot e^{-k \cdot r}}{r}. \quad (5)$$

Використовуємо граничні умови при  $r = R_1$ :

$$\begin{cases} \varphi_1(R_1) = \frac{A_1}{R_1} \sin(k_1 \cdot R_1) = \varphi_2(R_1) = \frac{B \cdot e^{-kR_1}}{R_1} \\ \varphi_1'(R_1) = -\frac{A_1}{R_1^2} \sin(k_1 \cdot R_1) + \frac{A_1 \cdot k_1}{R_1} \cdot \cos(k_1 \cdot R_1) = \varphi_2'(R_1) = -\frac{B}{R_1^2} e^{-k \cdot R_1} - \frac{B \cdot k}{R_1} \cdot e^{-k \cdot R_1} \end{cases}$$

Тоді,

$$B = A_1 \cdot \sin(k_1 \cdot R_1) \cdot e^{k \cdot R_1}. \quad (6)$$

Отримаємо наступне трансцендентне рівняння для власних значень енергії електрона  $E_n$ :

$$k_1 \cdot \cos(k_1 \cdot R_1) = -k \cdot \sin(k_1 \cdot R_1) \quad (7)$$

$$\text{tg}(k_1 \cdot R_1 + n\pi) = -\frac{k_1}{k}, \quad (8)$$

де  $n = \pm 1, 2, 3 \dots$  – квантові числа.

Розв'язки рівняння (8) можна знайти графічним або наближеним чисельним методом. У випадку, коли  $U_0 \gg E$  у першому наближенні  $-\frac{k_1}{k} \cong -\text{tg} \frac{k_1}{k}$  та

$$k_1 \cdot R_1 + \frac{k_1}{k} = n\pi. \quad (9)$$

Тоді власні дискретні значення енергії для електрона у сферичній квантовій точці дорівнюють:

$$E_n = \frac{\pi^2}{\left(\frac{\sqrt{2m} \cdot R_1}{\hbar} + \frac{1}{\sqrt{U_0}}\right)^2} \cdot n^2. \quad (10)$$

Якщо висота стінки потенціальної квантової ями нескінченна ( $U_0 \rightarrow \infty$ ) отримаємо:

$$E_{n,1}^* = \frac{\hbar^2}{8mR_1^2} \cdot n^2. \quad (11)$$

Для визначення амплітуди  $A_1$  хвильової функції  $\varphi_1(r)$  використовуємо умову нормування:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi_1(r)|^2 \cdot dV &= \int_0^{R_1} 4\pi r^2 \cdot |\varphi_1(r)|^2 \cdot dr + \int_{R_1}^\infty 4\pi r^2 \cdot |\varphi_2(r)|^2 \cdot dr = \\ &= \int_0^{R_1} 4\pi r^2 \cdot \frac{A_1^2}{r^2} \cdot \sin^2(k_1 \cdot r) \cdot dr + \int_{R_1}^\infty 4\pi r^2 \cdot \frac{A_1^2 \cdot e^{2k \cdot R_1} \cdot \sin^2(k_1 R_1)}{r^2} \cdot e^{-2k \cdot r} dr = \\ &= 2\pi A_1^2 \cdot \left( R_1 + \frac{\sin^2(k_1 \cdot R_1)}{k} - \frac{\sin(2k_1 \cdot R_1)}{2k_1} \right) = 1 \end{aligned} \quad (13)$$

Звідки:

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \left( R_1 + \frac{\sin^2(k_1 \cdot R_1)}{k} - \frac{\sin(2k_1 \cdot R_1)}{2k_1} \right)}}. \quad (14)$$

Застосування математичного пакету *Mathcad* дозволяє визначити амплітуду  $A_1$  хвильової функції  $\psi_1(r) = \begin{cases} \varphi_1(r), & 0 \leq r \leq R_1 \\ \varphi_2(r), & r > R_1 \end{cases}$ , власні значення енергії  $E_n$  та  $\rho_1(r)$  щільності ймовірності

знаходження електрона у заданій області простору. На рис.2 представлені графіки залежності хвильової функції  $\psi_1(r)$  та щільності ймовірності  $\rho_1(r) = |\psi_1(r)|^2$  для квантового стану  $n = 2$ .

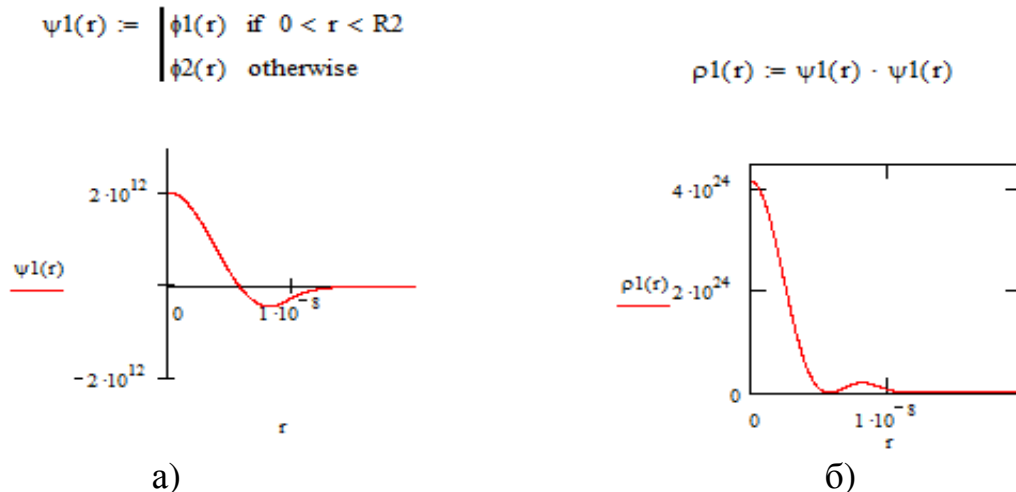


Рис. 2. Моделювання стану електрона у сферичній квантовій точці: а) графік  $\psi_1(r)$  хвильової функції для  $n = 2$ ; б) графік  $\rho_1(r)$  для  $n = 2$

Розглянемо стан електронів у циліндричній квантовій точці радіуса  $R_2$  та висотою  $H$ . У першому наближенні  $R \ll H$  потенціальна енергія електрона дорівнює (рис. 1, б):

$$U(r) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } 0 < r \leq R_2 \\ U_0, & \text{якщо } r > R_2 \end{cases}. \quad (15)$$

Використовуємо циліндричну систему координат. Рівняння Шредінгера для стаціонарних станів хвильової функції  $S$ -електронів має вигляд для області I:

$$\varphi_3'' + \frac{1}{r} \cdot \varphi_3' + k_3^2 \cdot \varphi_3(r) = 0, \quad \text{при } 0 \leq r \leq R_2, \quad (16)$$

де  $k_3 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  – хвильове число.

Для області II:

$$\varphi_4'' + \frac{1}{r} \cdot \varphi_4' - k_4^2 \cdot \varphi_4(r) = 0, \quad \text{при } r > R_2, \quad (17)$$

де  $k_4 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$  – хвильове число.

Розв'язок диференціального рівняння (16) має вигляд :

$$\varphi_3(r) = C \cdot J_0(k_3 \cdot r), \quad (18)$$

де  $J_0(k_3 \cdot r)$  – функція Бесселя нульового порядку (циліндрична функція).

Диференціальне рівняння (17) є модифікованим рівнянням Бесселя та має наступний розв'язок:

$$\varphi_4(r) = D \cdot J_0(ik_4 \cdot r) = D \cdot K_0(k_4 \cdot r), \quad (19)$$

де  $K_0(k_4 \cdot r)$  – функція Макдональда (модифікована функція Бесселя другого роду від уявного аргументу).

У випадку, коли  $U_0 \gg E$  ( $U_0 \rightarrow \infty$ ) хвильова функція  $\varphi_4(r) \rightarrow 0$ . Використовуємо граничні умови та визначаємо власні значення енергії електрона:

$$\psi_2(R) = C_1 \cdot J_0(k_5 \cdot R_2) = 0. \quad (20)$$

Тому:  $k_{5,n} \cdot R_2 = b_n$ ,

де  $b_n$  – нулі функції Бесселя  $J_0(x)$  нульового порядку першого роду наведені в таблиці 1 [4]:

Таблиця 1

$n$	1	2	3	4	5
$b_n$	2,405	5,52	8,654	11,791	14,931

Знаходимо власні значення енергії  $E_{2,n}$  електрона:

$$E_{2,n} = \frac{\hbar^2 \cdot b_n^2}{2m \cdot R_2^2} \quad (21)$$

Вид хвильової функції  $\psi_2(r)$  для випадку стінки нескінченної висоти представлено на рис. 3(а).

Амплітуду  $C_1$  хвильової функції  $\psi_2(r)$  визначаємо з умови нормування:

$$\int |\psi_2(r)|^2 \cdot dV = \int_0^{R_2} 2\pi r \cdot H \cdot C_1^2 \cdot J_0^2(k_5 \cdot r) \cdot dr = \pi \cdot C_1^2 \cdot H \cdot R_2^2 \cdot J_1^2(k_5 \cdot R_2) = 1 \quad (22)$$

Тому

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi H \cdot R_2 \cdot J_1(k_5 \cdot R_2)}}, \quad (23)$$

де  $J_1(k_5 \cdot R_2) = J_1(b_n)$  – значення функції Бесселя 1-го порядку при  $x = b_n$

Застосування математичного пакету *Mathcad* та комп'ютерне моделювання дозволяють визначити амплітуду  $C_n$  хвильової функції  $\psi_{2,n}(r)$ , хвильові числа  $k_{2,n}$ , власні дискретні значення енергії  $E_{2,n}$  та

побудувати графіки  $\psi_{2,n}(r)$  власної хвильової функції та щільності ймовірності  $\rho_{2,n}(r) = |\psi_{2,n}(r)|^2$  для різних значень квантового числа  $n$ .

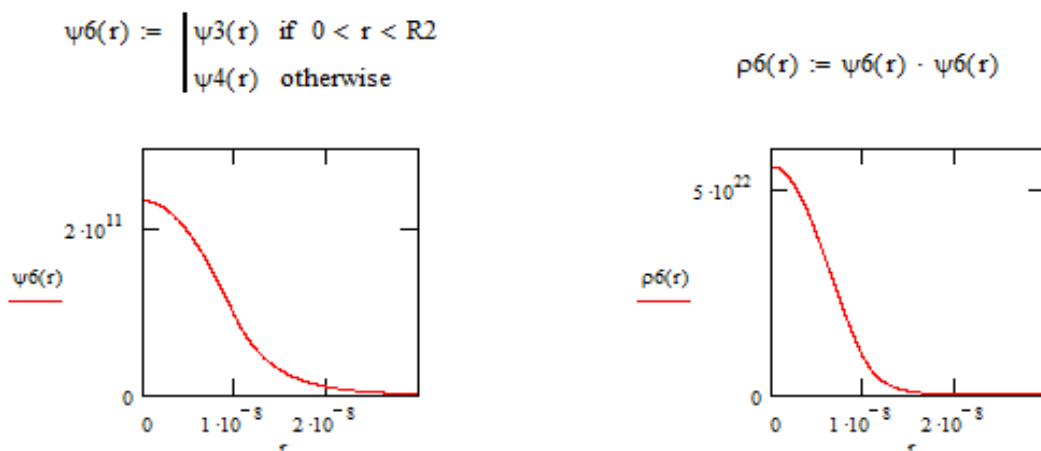


Рис. 3. Моделювання стану електрона у циліндричній квантовій точці зі стінками кінцевої висоти

У випадку циліндричної квантової точки зі стінками кінцевої висоти  $U_0$  власні значення енергії  $E_{3,n}$  можна визначити, використовуючи граничні умови, шляхом послідовного наближення при початковій енергії:

$$E_{3,n} = 0,5 \cdot E_{2,n} = 0,5 \cdot \frac{\hbar^2 \cdot b_n^2}{2mR_2^2}, \tag{24}$$

тоді:

$$\begin{cases} \varphi_{3,n}(R_2) = C \cdot J_0(k_{3,n} \cdot R_2) = \varphi_{4,n}(R) = D \cdot K_0(k_{4,n} \cdot R_2) \\ \varphi'_{3,n}(R_2) = \varphi'_{4,n}(R_2) = -C \cdot k_{3,n} \cdot J_1(k_3 \cdot R_2) = -D \cdot k_4 \cdot K_1(k_4 \cdot R_2) \end{cases}, \tag{25}$$

тоді:

$$D = C \cdot \frac{J_0(k_3 \cdot R_2)}{K_0(k_4 \cdot R_2)} \tag{26}$$

$$\frac{k_3}{k_4} = \frac{J_0(k_3 \cdot R_2)}{J_1(k_3 \cdot R_2)} \cdot \frac{K_1(k_4 \cdot R_2)}{K_0(k_4 \cdot R_2)} \tag{27}$$

$$E_{2,1} = U_0 \cdot \frac{J_0^2(k_3 \cdot R_2) \cdot K_1^2(k_4 \cdot R_2)}{J_0^2(k_3 \cdot R_2) \cdot K_1^2(k_4 \cdot R_2) + K_0^2(k_4 \cdot R_2) \cdot J_1^2(k_3 \cdot R_2)} \tag{28}$$

Визначаємо амплітуду  $C$  хвильової функції  $\varphi_3(r)$ , використовуючи умову нормування:

$$\int |\psi_3(r)|^2 \cdot dV = \int_0^{R_2} 2\pi \cdot r \cdot H \cdot C^2 \cdot J_0^2(k_3 \cdot r) \cdot dr + \int_{R_2}^{\infty} 2\pi \cdot r \cdot H \cdot C^2 \cdot \frac{J_0^2(k_3 \cdot R_2)}{K_0^2(k_4 \cdot R_2)} \cdot K_0^2(k_4 \cdot r) \cdot dr =$$

$$= \pi \cdot C^2 \cdot H \cdot R_2^2 \cdot \left[ J_1^2(k_3 \cdot R_2) + \frac{J_0^2(k_3 \cdot R_2) \cdot K_1^2(k_4 \cdot R_2)}{K_0^2(k_4 \cdot R_2)} \right] = 1 \quad (29)$$

$$C = \frac{K_0(k_4 \cdot R_2)}{\sqrt{\pi \cdot H \cdot R_2 \sqrt{J_0^2(k_3 \cdot R_2) \cdot K_1^2(k_4 \cdot R_2) + J_1^2(k_3 \cdot R_2) \cdot K_0^2(k_4 \cdot R_2)}}} \quad (30)$$

На рис. 3 представлено графік хвильової функції:

$$\psi_{3,1}(r) = \begin{cases} \varphi_{3,1} = C \cdot J_0(k_3 \cdot r), & \text{якщо } 0 \leq r \leq R_2 \\ \varphi_{4,1} = D \cdot K_0(k_4 \cdot r), & \text{якщо } r > R_2 \end{cases}$$

Стан електронів, власні хвильові функції та дискретні спектри енергії у прямокутних, просторових 3D потенціальних ямах розглянуто, наприклад, в [5]. Таким чином, у першому наближенні пояснюється поведінка вільних електронів у металах та зонна теорія твердих тіл у випадку, коли робота виходу електрона з поверхні метала набагато більша, ніж кінетична енергія електрона  $A \gg kT$ . Значний інтерес у подальшому представляє розгляд фінітного руху електронів у прямокутній циліндричній квантовій точці (ЦКТ), коли висота та радіус ЦКТ одного порядку  $H \approx R$  та у випадку конусної квантової точки (ККТ).

*Висновки.* Розглянуто математичні, комп'ютерні моделі квантових точок (сферичної та циліндричної) зі стінками кінцевої висоти. Отримані хвильові функції, власні значення енергії та щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області простору. Результати дослідження кванторозмірних структур використовуються при організації та проведенні імітаційних віртуальних лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій».

#### Література:

1. Дьоміна Н. А., Морозов М. В. Моделювання кванторозмірних гетероструктур у лабораторному практикумі з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» // Наукові записки [Кіровоградського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка]. Сер. Проблеми методики фізико-математичної і технологічної освіти. 2017. Вип. 12 (2). С. 72-79.

2. Расчет энергетического спектра S-электронов сферической квантовой точки на основе узкозонных полупроводниковых соединений A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> в матрице GaP / С. Б. Смирнов и др. // Нетрадиційні і поновлювані джерела енергії. 2011. С. 164-168.

3. Айрапетян Д. Б., Казарян Э. М., Тевосян О. Х. Примесные состояния в цилиндрической квантовой точке с модифицированным потенциалом Пешля-Теллера // Известия НАН Армении. 2014. Т. 49, № 3. С. 190-195.



4. *Кафтанова Ю. В.* Специальные функции математической физики. Харьков: Новое слово, 2009. 596 с.

5. *Шпольский Э. В.* Атомная физика. Введение в атомную физику. Москва: Наука, 1984. 552 с.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СФЕРИЧЕСКОЙ И ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Демина Н. А., Морозов М. В.

**Аннотация** – рассмотрены простейшие модели 3D пространственных квантовых точек: сферической и цилиндрической. Математическое, компьютерное моделирование состояния электронов в кванторозмирных структурах используется при разработке имитационных лабораторных работ по курсу «Физические основы современных информационных технологий» для магистров специальности «Компьютерные науки и информационные технологии проектирования». При компьютерном моделировании применяется математический пакет Mathcad. Особый интерес представляет рассмотрение поведения электрона в случае пространственных потенциальных ям со стенками конечной высоты. Квантовые точки (КТ – Quantum Dots) используют в элементной базе наноэлектроники, в первую очередь при создании дисплеев четвертого поколения (AMOLED-технология), которые приходят на смену жидкостно кристаллическим дисплеям. Кроме того, перспективным является создание лазеров на КТ.

Свойства квантовых точек (дискретный спектр значений собственной энергии) зависит от их формы, размеров и материала (величины эффективной массы носителей заряда). Важную роль играют также граничные условия – вид потенциала, который ограничивает движение электронов. Простейшая модель КТ является трехмерная бесконечно глубокая пространственная потенциальная яма. Но реальные квантовые точки (как с оболочкой, так и без) имеют потенциальные стенки конечной высоты, поэтому моделирование электронной структуры и определения волновой функции и плотности вероятности в этом случае является актуальной задачей.

Рассматривается решение уравнения Шредингера для волновой функции стационарных состояний S-электронов в сферической и цилиндрической системах координат. Полученные в первом приближении собственные значения энергии, вид волновой функции и плотности вероятности нахождения

**электрона в заданной области пространства.**

## **SIMULATION OF SPHERICAL AND CYLINDRICAL QUANTUM POINTS**

N. D'omina, M. Morozov

### *Summary*

**The simplest models of 3D spatial quantum dots are considered: spherical and cylindrical. Mathematical, computer simulation of the state of electrons in quantum-size structures is used in the development of simulation laboratory work in the course "Physical Foundations of Modern Information Technologies" for masters of specialty "Computer Science and Information Technology Design". In computer simulation, Mathcad is used. It is of particular interest to consider the behavior of the electron in the case of spatial potential wells with finite-height walls. Quantum Dots (Quantum Dots CT) are used in the element base of nanoelectronics, primarily in the creation of fourth generation displays (AMOLED technology), which are replaced by liquid crystal displays. In addition, the creation of CT lasers is promising.**

**The properties of quantum dots (the discrete range of eigenvalues) depend on their shape, size and material (the magnitude of the effective mass of charge carriers). Boundary conditions also play an important role - the kind of potential that limits electron movement. The simplest CT model is a three-dimensional infinitely deep spatial potential well. But real quantum dots (both with and without shell) have potential finite-height walls, so modeling electronic structure and determining the wave function and probability density in this case is an urgent task.**

**The solution of the Schrödinger equation for the wave function of steady states of S-electrons in spherical and cylindrical coordinate systems is considered. The eigenvalues obtained in the first approximation, the type of wave function, and the probability of finding an electron in a given region of space are obtained.**