

**Список використаних джерел:**

1. Master pose vs copy pose vs mesh merge. *Gamedev Guide*. URL: <https://ikrima.dev/ue4guide/gameplay-programming/animation-subsystem/master-pose-vs-copy-pose-vs-mesh-merge/> (дата звернення: 25.11.2024).
2. Unreal Engine. Building Modular Characters in Unreal Engine | Unreal Fest 2022, 2022. *YouTube*. URL: <https://www.youtube.com/watch?v=7IUra3Pxqug> (дата звернення: 25.11.2024).
3. IK Rig Retargeting in Unreal Engine. *Unreal Engine Documentation*. URL: [https://dev.epicgames.com/documentation/en-us/unreal-engine/ik-rig-animation-retargeting-in-unreal-engine?application\\_version=5.0](https://dev.epicgames.com/documentation/en-us/unreal-engine/ik-rig-animation-retargeting-in-unreal-engine?application_version=5.0) (дата звернення: 25.11.2024).

УДК 004.891.2

**ЗАСТОСУВАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО ПАКЕТУ MATHCAD ДЛЯ  
АНАЛІТИЧНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ ЯВИЩА ТУНЕЛЬНОГО ЕФЕКТУ  
ПРИ МОДЕЛЮВАННІ СТАНУ ЕЛЕКТРОНІВ У КВАНТОВІЙ ЯМІ**

Гавриленко Є.А., д.т.н.

*e-mail: yevhen.havrylenko@tsatu.edu.ua*

Мацулевич О.Є., к.т.н.

*e-mail: oleksandr.matsulevych@tsatu.edu.ua*

Супрун М.В., асистент

*e-mail: maksym.suprun@tsatu.edu.ua*

*Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Мотроного*

**Актуальність та постановка проблеми.** Тунельний ефект, тунелювання – подолання мікрочастинкою потенційного бар'єру у випадку, коли її повна енергія (що залишається при тунелюванні незмінною) менше висоти бар'єру. Тунельний ефект – явище винятково квантової природи, неможливе в класичній механіці і навіть повністю суперечить їй.

Аналогом тунельного ефекту в хвильовій оптиці може бути проникнення світлової хвилі всередину відбиває середовища (на відстані порядку довжини світлової хвилі) за умов, коли, з погляду геометричної оптики, відбувається повне внутрішнє відбиток. фізики, у фізиці атомного ядра, твердого тіла тощо. Тому квантоворозмірні гетероструктури (потенціальні ями та бар'єри) широко використовуються в напівпровідникових приладах сучасних інформаційних технологій.

**Основні матеріали дослідження.** Основна мета даної роботи розглянути можливість використання спеціалізованих пакетів прикладних програм для математичного моделювання енергетичного стану електрона в одновимірній потенціальній ямі з нескінченно високими стінками та проходження електронна крізь потенціальний бар'єр (тунельний ефект). Розглянути використання математичного моделювання для проведення віртуальних лабораторних робіт з фізики та фізичних основ сучасних інформаційних технологій.

Потенціальна яма утворюється за допомогою етероструктури, коли між двома напівпровідниками з широкою забороненою зоною, наприклад, AlGaAs, розташовано напівпровідник з вузькою забороненою зоною – GaAs. Якщо повна енергія електрона набагато менша ширини забороненої зони, виникає квантова яма з нескінченно високими стінками. Розглянемо енергетичний спектр електрона в одновимірній потенціальній ямі у випадку, коли потенціальна енергія стінки  $U_1$ ,

$U_3$  прямує до нескінченності (рисунок 1а). Для стаціонарного стану рівняння Шредінгера для хвильової функції  $\varphi(x)$  у квантові ямі має вигляд

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \cdot \varphi = 0 \quad (1)$$

де  $m$  - ефективна маса електрона;

$\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с – стала Планка;

$E$  – власні значення повної енергії електрона.

В канонічній формі диференціальне рівняння (1):

$$\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad (2)$$

де  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ;  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  - хвильове число.

Рішення рівняння (2) має вигляд

$$\varphi(x) = A \cdot \sin kx + B \cdot \cos kx \quad (3)$$

Сталі інтегрування  $A, B$ , а також власні значення енергії електрона  $E$ , при яких можливе рішення рівняння (2), знаходимо, використовуючи граничні умови та умови нормування хвильової функції. Хвильова функція повинна бути неперервною, тому

$$\begin{cases} \varphi(0) = A \sin k \cdot 0 + B \cdot \cos k \cdot 0 = 0; & B = 0 \\ \varphi(a) = A \sin k \cdot a + B \cdot \cos k \cdot a = 0; \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{Звідси, якщо } A \neq 0: \quad ka = n\pi \quad (5)$$

де  $n = 1, 2, 3, \dots$  - квантове число.

Тоді власні значення енергії електрона, при яких рівняння (2) має розв'язок, мають дискретні значення

$$E_n = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \cdot n^2 = \frac{h^2}{8ma^2} \cdot n^2 \quad (6)$$

Визначаємо сталу  $A$  (амплітуду хвильової функції) з умови нормування хвильової функції

$$\int_0^a |\varphi(x)|^2 \cdot dx = \int_0^a \left(A \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x\right)^2 \cdot dx = A^2 \cdot \frac{a}{2} = 1 \quad (7)$$

Тоді  $A = \sqrt{2/a}$ . Остаточно хвильова функція електрона в квантовій ямі має вигляд (рисунок 1)

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) \quad (8)$$

Квадрат модуля хвильової функції визначає щільність ймовірності знаходження частинки в інтервалі  $[x, x+dx]$  (рисунок 1)

$$|\varphi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} \cdot x\right) \quad (9)$$

Розроблені програми (MathCad) для математичного, комп'ютерного моделювання стану електрона в квантовій ямі використовуються для організації та проведення імітаційних, віртуальних лабораторних робіт з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій».

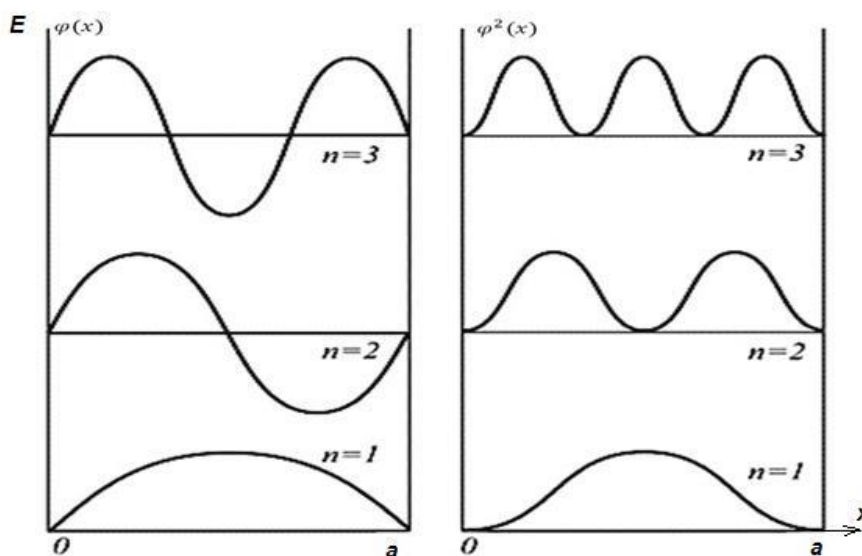


Рисунок 1 – Одновимірний потенціальна яма з нескінченно високими стінками

Квантові, потенціальні ями на гетероструктурах використовують для створення напівпровідникових лазерів, світлодіодів, фотоприймачів у приладах сучасних інформаційних технологіях.

Розглянемо проходження електрона крізь потенціальний бар'єр у випадку, коли його повна енергія  $E$  менша висоти бар'єра  $U$  (рисунок 2). Рівняння Шредінгера для електрона має вигляд

$$\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \varphi(x) = 0 \quad (10)$$

Для області 1:  $U_1 = 0$ ; для області 2:  $U_2 = U_0$  та області 3:  $U_3 = 0$ .

Рішення рівняння (10) Шредінгера відповідно мають вигляд:

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{ik_1x} + B_1 \cdot e^{-ik_2x} & \text{для } x < 0 \\ \varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{ik_2x} + B_2 \cdot e^{-ik_2x} & \text{для } 0 \leq x \leq b \\ \varphi_3(x) = A_3 \cdot e^{ik_1x} & \text{для } x > b \end{cases} \quad (11)$$

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

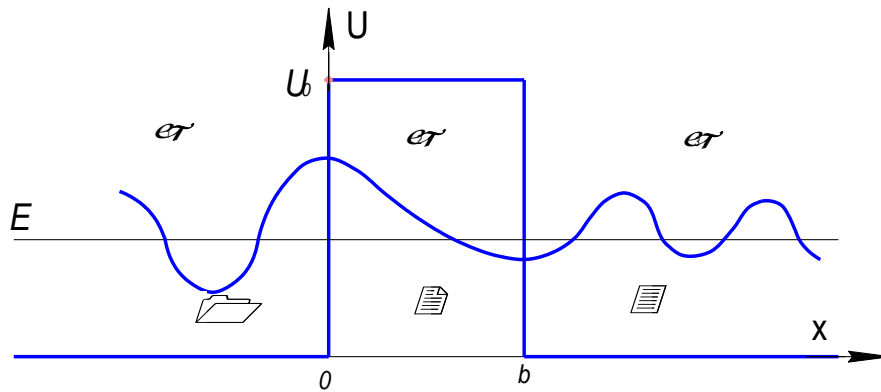


Рисунок 2 – Рух електронів крізь потенціальний бар'єр:  $b$ - ширина бар'єра

Сталі інтегрування - коефіцієнти  $B_1, A_2, B_2, A_3$  знаходимо з відповідних граничних умов

$$\begin{cases} \varphi(x=0): A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ \varphi'(x=0): k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2) \\ \varphi(x=b): A_2 \cdot e^{ik_2b} + B_2 \cdot e^{-ik_2b} = A_3 \cdot e^{ik_1b} \\ \varphi'(x=b): k_2 \cdot (A_2 \cdot e^{ik_2b} - B_2 \cdot e^{-ik_2b}) = k_1 \cdot A_3 \cdot e^{ik_1b} \end{cases} \quad (12)$$

Тоді 
$$A_3 = \frac{4k_1 k_2}{C} \cdot A_1 \quad (13)$$

де 
$$C = (k_1 + k_2)^2 e^{i(k_1 - k_2)b} - (k_1 - k_2)^2 e^{i(k_1 + k_2)b}$$

$$A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)b} \cdot A_3 \quad (14)$$

$$B_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1+k_2)b} \cdot A_3 \quad (15)$$

$$B_1 = A_2 + B_2 - A_1 \quad (16)$$

Коефіцієнт проходження (прозорості або пропускання) потенціального бар'єру дорівнює

$$D_1(E) = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{4k_1 k_2}{C} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 bk_2 + 4k_1^2 k_2^2} \quad (17)$$

Коефіцієнт відбиття від потенціального бар'єру:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = 1 - D \quad (18)$$

Аналіз для коефіцієнтів прозорості та відбиття для потенціального бар'єру показує, по-перше, у випадку, коли енергія електрона менша висоти бар'єра  $E_1 < U$  є ймовірність проходження крізь потенціальний бар'єр з області I у область III. Це явище має назву тунельного ефекту і не має аналогу в класичній механіці. По-друге, у випадку, коли енергія електрона більша висоти бар'єра  $E_2 > U$  та електрон «пролітає» над потенціальним бар'єром, є ймовірність його відбиття від бар'єру (рисунок 3).

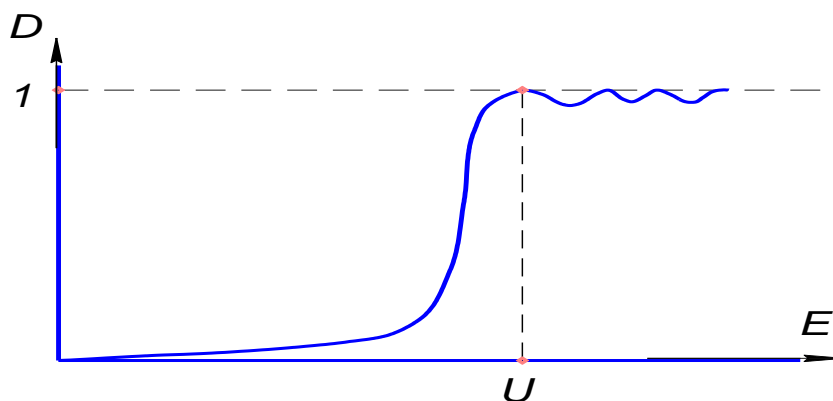


Рисунок 3 – Залежність коефіцієнта проходження крізь потенціальний бар'єр від енергії електрона

В деяких випадках коефіцієнт проходження крізь багатобар'єрні шарові гетероструктури (наприклад, двобар'єрну систему) буде більший коефіцієнту проходження для кожного окремого бар'єру. Цей ефект виникає внаслідок інтерференції хвиль де Бройля і має назву резонансного тунельного ефекту. Застосування математичного пакету (MathCad) дозволяє провести математичне комп'ютерне моделювання тунельного ефекту та дослідити залежність коефіцієнту прозорості бар'єру від повної енергії електрона (рисунок 3). При проведенні імітаційної лабораторної роботи «Вивчення тунельного ефекту за допомогою математичного моделювання» з курсу «Фізичні основи сучасних

інформаційних технологій» для анімації графіка  $D(E)$  в залежності від значення ширини  $b$  потенціального бар'єру використовується команда «Animation» на панелі інструментів MathCad та відповідна формула (17) для коефіцієнта прозорості  $D(E,b)$ . В цій формулі використовується змінна  $FRAME$   $q: b = b_0q$ , де  $b_0 = \text{бнм}$ . Діапазон величини  $FRAME$   $q = 1 \dots 10$  та частота кадрів задається в діалоговому вікні команди «Animation», в якому і спостерігається зміна відповідного графіку  $D(E)$ . Тунельний ефект пояснює явище автоелектронної емісії,  $\alpha$  – розпад радіоактивних ядер, ядерні реакції синтезу та інш., а також використовується в таких приладах мікро- та наноелектроніки, як тунельний діод і тунельний електронний мікроскоп.

**Висновки.** Розглянуті математичні моделі одновимірної потенціальної ями та проходження електрона крізь потенціальний бар'єр (тунельний ефект). Розроблена програма досліджень цих явищ за допомогою математичного пакету MathCad.

#### **Список використаних джерел:**

1. Болбат О.І., Морозов М.В., Радев С.Ю. Математичне комп'ютерне моделювання процесів коливань та його застосування у лабораторному практикумі. – *Праці Таврійського державного агротехнологічного університету /* Вип. 10, т. 6, Мелітополь, 2010 р. с. 137-141
2. Кучерук І.М. Загальний курс фізики: Навчальне видання у 3-х томах/, т.3:Оптика. Квантова фізика. К.: Техніка, 1999. – 518 с.
3. Юхновський, І.Р. Основи квантової механіки : навч. посіб. – Київ : Либідь, 2002. – 392 с.
4. Alrefo, I.F., Rawashdeh, M.O., Matsulevych, O., Vershkov O., Halko, S., Suprun, O. Designing the functional surfaces of camshaft cams of internal combustion engines. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, 2024, (3), pp 72–78. DOI: <https://doi.org/10.33271/nvngu/2024-3/072>
5. Alrefo, I.F., Matsulevych, O., Vershkov, O., Halko, S., Suprun, O., Miroshnyk, O. Designing the working surfaces of rotary planetary mechanisms. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, 2023, 4, pp. 82-88.
6. Мацулевич О.Є. Застосування спеціалізованої PLM-системи Technologi CS при розробці автоматизованої системи ведення конструкторсько-технологічних баз даних підприємства сільськогосподарського машинобудування. *Праці Таврійського державного агротехнологічного університету: Наукове фахове видання /* ТДАТУ; Запоріжжя : ТДАТУ, 2024. Вип. 24, том. 1.
7. Паляничка Н.О., Вершков О.О., Антонова Г.В. Аналіз новітніх пристроїв для гомогенізації. *Праці Таврійського державного агротехнологічного університету*. Мелітополь: ТДАТУ, 2017. Вип. 17, т. 3. С. 194-200.
8. Мацулевич О.Є., Гавриленко Є.А., Мірошніченко М.Ю. В. Набуття навичок комп'ютерної обробки аудіо сигналів з використанням програмного забезпечення Adobe Audition. *Розвиток сучасної науки та освіти : матеріали IV Міжнародної наук.-практ. інтернет-конф.* (Запоріжжя, 29-31 травня 2023 р.). Запоріжжя : ТДАТУ, 2023. С. 80-86.
9. Вершков О.О., Мацулевич О.Є., Дереза О.О. Загальні налаштування системи MASTERCAM для виконання завдань з розробки управляючих програм токарної обробки валів. *Розвиток сучасної науки та освіти: реалії, проблеми якості, інновації : матеріали V Міжнародної наук.-практ. інтернет-конф.* (м. Запоріжжя, 29-31 травня 2024 р.). Запоріжжя : ТДАТУ, 2024. С. 100-105.