

**МОДЕЛЮВАННЯ У ЛАБОРАТОРНОМУ ПРАКТИКУМІ
КУРСУ «ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ МАГІСТЕРСЬКИХ
ПРОГРАМ»**

Морозов М.В. к.ф.-м.н.

email: mykola.morozov@tsatu.edu.ua

Халанчук Л.В., інженер

email: larysa.khalanchuk@tsatu.edu.ua

Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Моторного

Актуальність та постановка проблеми. Комп'ютерне математичне моделювання знаходить все більш широке застосування у лабораторному практикумі з різних курсів, наприклад, «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» [1-3]. Методи моделювання використовують також для організації імітаційних лабораторних робіт з вивченням електромагнітних коливань, розгляду низькорозмірних квантових систем різноманітних квантових точок та гармонічного аналізу. Для моделювання відповідних процесів та побудови графіків використовується програмне забезпечення MathCad та Scilab. Розглянуто, як приклад, моделювання стану електрона у пірамідальних та конічних квантових точках [4-5]. Впровадження імітаційних лабораторних робіт на базі комп'ютерного моделювання в курсі «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм» є актуальною задачею та дозволяє підвищити ефективність занять. Крім того, особливий інтерес представляє розробка методичного забезпечення лабораторних робіт «Моделювання пірамідальної квантової точки» та «Моделювання конічної квантової точки».

Виклад основного матеріалу. Дисципліна «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм» формує у магістрів спеціальності «Електроенергетика, електротехніка та електромеханіка» фундаментальні знання з таких розділів вищої математики та математичної фізики як теорія поля, рівняння Максвелла для електромагнітного поля в інтегральній та диференціальній формі; гармонічний аналіз та застосування рядів Фур'є; рівняння математичної фізики та застосування рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електрона у квантових точках. Розглянемо стан S-електронів у пірамідальній (тетраедальній) квантовій точці без оболонки (рис. 1).

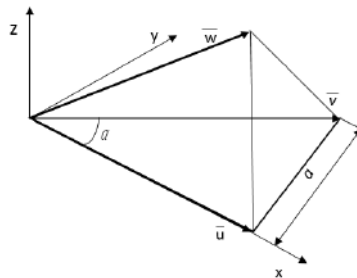


Рисунок 1. Тетраедальна квантова точка

Зв'язок між прямокутними декартовими та косокутними координатами має вигляд:

$$u = x - \frac{y}{\operatorname{tg}\alpha} \quad v = \frac{y}{\sin\alpha} \quad w = \sqrt{\frac{3}{2}}z \quad (1)$$

$$x = u + \frac{v}{2} \quad y = \frac{v\sqrt{3}}{2} \quad z = \sqrt{\frac{2}{3}}w \quad (2)$$

Використовуючи коефіцієнти Ламе, отримаємо оператор Лапласа і відповідне рівняння Шредінгера для хвильової функції $\psi(u, v, w)$ для стаціонарних станів:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial v^2} + \frac{3}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial w^2} + k^2 \psi(u, v, w) = 0 \quad (3)$$

Рішення рівняння (3) має вигляд:

$$\psi(u, v, w) = A \cdot \text{sink}_1 u \cdot \text{sink}_2 v \cdot \text{sink}_3 w. \quad (4)$$

Використовуючи граничні умови, знаходимо хвильові числа:

$$k_1 = \frac{\pi}{a} n_1 \quad k_2 = \frac{\pi}{a} n_2 \quad k_3 = \frac{\pi}{a} n_3 \quad (5)$$

де n_1, n_2, n_3 – цілі квантові числа, a – довжина ребра тетраедра.

Дискретні власні значення енергії дорівнюють:

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8ma^2} \left(n_1^2 + n_2^2 + \frac{3}{2} n_3^2 \right). \quad (6)$$

На рис. 2 представлено графіки відносної ($A=1$) щільності ймовірності знаходження електрона у заданій точці області пірамідальної квантової точки при $z_1 = \frac{a}{2n_3}$:

$$\rho(x, y, z_1) = \sin^2 k_1 \left(x - \frac{y}{\text{tg} \alpha} \right) \cdot \sin^2 k_2 \frac{y}{\text{sin} \alpha} \quad (7)$$

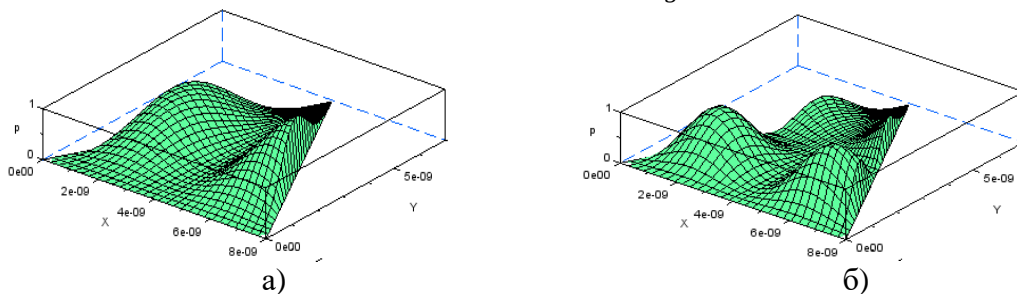


Рисунок 2. Графіки відносної щільності ймовірності знаходження електрона у заданій точці області пірамідальної квантової точки:

а) $n_1 = 2, n_2 = 1$; б) $n_1 = n_2 = 2$

Висновок. Таким чином, методи математичного комп'ютерного моделювання забезпечують організацію та проведення імітаційних лабораторних робіт з поглибленим вивченням різноманітних кванторозмірних гетеросистем курсу «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм».

Список використаних джерел.

1. N. Sosnytska, M. Morozov, L. Khalanchuk. Modeling of Electron State in Quantum Dot Structures. 2020 IEEE Problems of Automated Electrodrive. Theory and Practice (PAEP), Kremenchuk, Ukraine, 2020, pp. 1-5.
2. Сосницька Н.Л., Морозов М.В., Онищенко Г.О., Халанчук Л.В. Моделювання кванторозмірних гетеросистем та методичне забезпечення курсу «Фізичні основи інформаційних технологій». Науковий вісник Льотної академії: Серія: Педагогічні науки. Збірник наукових праць. 2019. Вип.5. С. 415-421.
3. Усанов Д.А., Скрипаль Ал.В. Компьютерное моделирование микро и наноструктур. Учебное пособие для студ. фак. Нано- и биомедицинских технологий. Саратов, СГУ, 2008. 100 с.
4. 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. 2335–2343. 10.1166/jctn.2011.1965.
5. 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.