

Міністерство освіти і науки України



ПРАЦІ
Таврійського державного
агротехнологічного університету

Випуск 20, том 2

Наукове фахове видання
Технічні науки

Мелітополь – 2020 р.

УДК [62+631.3+664]

Т 13

Праці Таврійського державного агротехнологічного університету : наукове фахове видання / ТДАТУ ; гол. ред. д.т.н., проф. В. М. Кюрчев.- Мелітополь: ТДАТУ, 2020. - Вип. 20, т. 2. - 273 с.

Друкується за рішенням Вченої Ради ТДАТУ,
Протокол № 9 від 12.05.2020 року

Представлені результати досліджень вчених у галузях галузевого машинобудування, харчових технологій, електроенергетики, електротехніки та електромеханіки, а також комп'ютерних наук та інформаційних технологій.

Видання призначене для наукових працівників, викладачів, аспірантів, інженерно-технічного персоналу і студентів, які спеціалізуються у відповідних або суміжних галузях науки та напрямках виробництва.

Реферативні бази: Crossref, Google Scholar, eLibrary, AGRIS, «Україніка наукова», НБУ ім. В. І. Вернадського.

Редакційна колегія праць ТДАТУ:

Головний редактор

Кюрчев В. М. – чл.-кор. НААН України, д.т.н., проф. (Україна)

Заступник головного редактора

Надикто В. Т. – чл.-кор. НААН України, д.т.н., проф. (Україна)

Відповідальний секретар

Діордієв В. Т. – д.т.н., проф. (Україна)

Beloev Hristo – д.т.н., проф. (Болгарія)

Ivanovs Semjons – PhD (Latvia)

Jose Italo Cortez - PhD (Mexico)

Нукешев Саяхат – д.т.н., проф. (Казахстан)

Прищепов М.А. – д.т.н., доц. (Білорусь)

Постолатій В. М. – д.х.т.н. (Молдова).

Шингисов А. У. – д.т.н., проф. (Казахстан)

Волошина А.А. – д.т.н., проф. (Україна)

Гнатюшенко В. В. – д.т.н., проф. (Україна)

Гумен О. М. – д.т.н., проф. (Україна)

Дейниченко Г. В. – д.т.н., проф. (Україна)

Дідур В. А. – д.т.н., проф. (Україна)

Євлаш В. В. – д.т.н., проф. (Україна)

Караєв О. Г. – д.т.н., с.н.с. (Україна)

Кузнецов М. П. – д.т.н., с.н.с. (Україна)

Леженкін О. М. – д.т.н., проф. (Україна)

Лисенко В. П. – д.т.н., проф. (Україна)

Лисиченко М. Л. – д.т.н., проф. (Україна)

Малкіна В. М. – д.т.н., проф. (Україна)

Мілько Д. О. – д.т.н., в.о. проф. (Україна)

Назаренко І. П. – д.т.н., проф. (Україна)

Паламарчук І. П. – д.т.н., проф. (Україна)

Панченко А. І. – д.т.н., проф. (Україна)

Пилипенко Л. М. – д.т.н., проф. (Україна)

Погребняк А. В. – д.т.н., доц. (Україна)

Прісс О. П. – д.т.н., проф. (Україна)

Самойчук К. О. – д.т.н., доц. (Україна)

Сердюк М. Є. – д.т.н., доц. (Україна)

Соболь О. М. – д.т.н., проф. (Україна)

Тарасенко В. В. – д.т.н., проф. (Україна)

Шоман О. В. – д.т.н., проф. (Україна)

Гавриленко Є. А. – к.т.н., доц. (Україна)

Кашкарьов А. О. – к.т.н., доц. (Україна)

Квітка С. О. – к.т.н., доц. (Україна)

Лендел Т. І. – к.т.н., (Україна)

Лясковська С. Є. – к.т.н., доц. (Україна)

Сидоренко О. С. – к.т.н., доц. (Україна)

Скляр О. Г. – к.т.н., проф. (Україна)

Строкань О. В. – к.т.н., доц. (Україна)

Мацулевич О. Є. – к.т.н., доц. (Україна)

Холодняк Ю. В. – к.т.н. (Україна)

Яковлев В. Ф. – к.т.н., проф. (Україна)



Відповідальний за випуск – д.т.н., доцент Самойчук К.О.

Адреса редакції: ТДАТУ

просп. Б. Хмельницького 18,
м. Мелітополь Запорізька обл.
72312 Україна

ISSN 2078–0877

© Таврійський державний агротехнологічний університет
імені Дмитра Моторного, 2020

МАТЕМАТИЧНЕ КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИХ ЯВИЩ ТА ПРОЦЕСІВ

Сосницька Н. Л., д.п.н.,

ORCID: 0000-0001-6329-768X

Морозов М. В., к.ф-м.н.,

ORCID: 0000-0002-5122-8449

Халанчук Л. В., асистент

ORCID: 0000-0002-6055-6233

Таврійський державний агротехнологічний університет

імені Дмитра Моторного

Тел. (0619) 42-68-74

Постановка проблеми. Методи математичного комп'ютерного моделювання знаходять все більш широке застосування для дослідження різноманітних систем та явищ. Перспективним є моделювання складних абстрактних квантово-механічних явищ та процесів. Це зумовлено тим, що знання з квантової фізики мають важливе значення для розвитку різних технологій в сфері енергетики, транспорту, отримання нових матеріалів з заданими властивостями, розвитку інформаційних технологій та обчислювальної техніки тощо. Тому на сьогодні є актуальним розробка моделей різноманітних квантових точок (quantum dot – QD), які використовуються у багатьох сучасних приладах [1, 2].

Аналіз останніх досліджень. В роботах [3-16] розглянуто застосування математичного комп'ютерного моделювання квантово-механічних явищ та процесів, де приведено моделі різноманітних квантових точок (QD) та отримані дискретні спектри власних значень енергії та хвильових функцій електронів. Розглянуто також залежність спектрів власних значень енергії від форми та розмірів квантової точки. В роботі [17] розглянуто структуру енергетичних квантових рівнів у квантовій точці, яка має форму стиснутого тіла обертання. Для розрахунків хвильової функції, щільності ймовірності, хвильових чисел, власних значень енергії та побудови відповідних графіків використовуються пакети програм Scilab, MathCad, дискретні моделі розв'язку диференціальних рівнянь у частинних похідних та дискретні структуровані сітки [19].

Однак дослідниками не розглядалось питання моделювання стану електронів з використанням пакета програм Scilab.

Формулювання цілей статті. Розробити модель просторової (3D), прямокутної квантової ями з нескінченно високими стінками та на її основі запропонувати віртуальні імітаційні лабораторні роботи з вивчення та дослідження зонної теорії провідності твердих тіл.

Основана частина. Використано методи математичного комп'ютерного моделювання для вивчення та дослідження хвильової функції електрона та власних значень енергії і їх залежності від структури, форми та розмірів квантової точки (QD).

Застосування пакета програми Scilab дозволяє візуалізувати вид хвильової функції та щільності ймовірності для 3D просторової квантової ями.

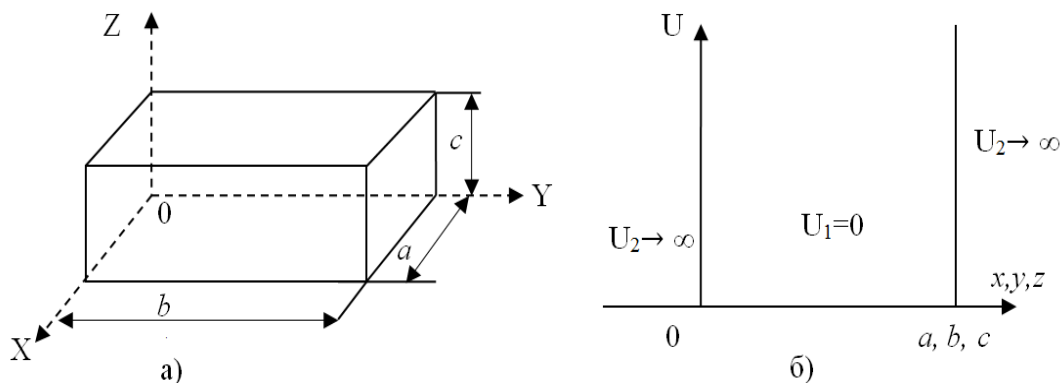
Постановка задачі. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера для стаціонарних електронів та власні значення енергії і їх залежність від параметрів зразка.

Розглянемо моделювання стану вільних електронів у металах і сплавах та утворення зони провідності у випадку, коли робота A виходу електрона з металу багато більша, ніж енергія теплового хаотичного руху електрона [18]:

$$A \gg kT.$$

Вважаємо, що область 3D простору, в якій може рухатись електрон, визначається нерівностями (рис. 1.а):

$$0 \leq x \leq a; 0 \leq y \leq b; 0 \leq z \leq c.$$



а) параметри зразка; б) потенціальна енергія електрона.

Рис. 1. Квантова прямокутна 3D потенціальна яма.

Хвильове рівняння Шредінгера для стаціонарних станів S – електронів має вигляд:

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0, \quad (1)$$

Граничні умови для хвильової функції:

$$\Psi(0, y, z) = \Psi(x, 0, z) = \Psi(x, y, 0) = \Psi(a, y, z) = \Psi(x, b, z) = \Psi(x, y, c) = 0 \quad (2)$$

Рішення диференціального рівняння (1) у частинних похідних шукаємо у вигляді (метод Фур'є розділення змінних):

$$\Psi(x, y, z) = A \cdot \sin k_1 x \cdot \sin k_2 y \cdot \sin k_3 z \quad (3)$$

Тоді

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \quad (4)$$

Знаходимо хвильові числа, використовуючи граничні умови:

$$k_1 = \frac{n_1 \pi}{a}; \quad k_2 = \frac{n_2 \pi}{b}; \quad k_3 = \frac{n_3 \pi}{c}$$

де $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots$ - квантові числа.

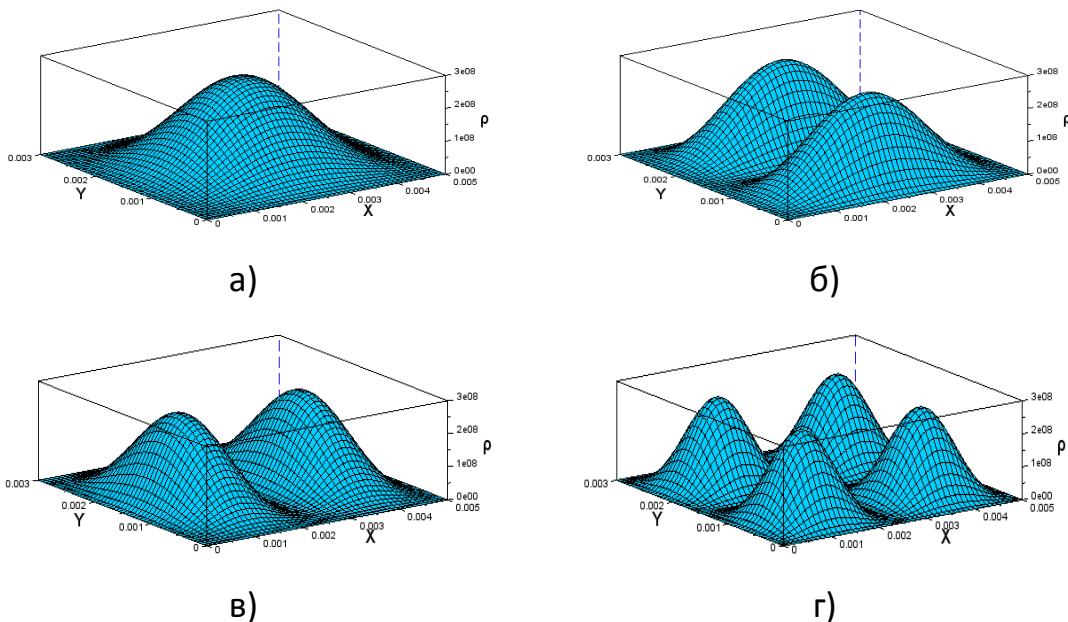
Амплітуду хвильової функції A визначаємо з умови нормування хвильової функції:

$$\int A^2 \cdot \sin^2 k_1 x \cdot \sin^2 k_2 y \cdot \sin^2 k_3 z dV = 1$$

$$A = \left(\frac{8}{abc} \right)^{1/2} \quad (5)$$

Будуємо графіки щільності ймовірності знаходження електрона в 3D потенціальній ямі (рис. 2) для випадку $n_{1,1} = n_{1,2} = n_{1,3} = 1$ та $n_{2,1} = n_{2,2} = n_{2,3} = 2$:

$$\rho \left(x, y, \frac{c}{2} \right) = \Psi^2 \left(x, y, \frac{c}{2} \right) = \frac{8}{abc} \sin^2 \left(\frac{n_1 \pi}{a} x \right) \sin^2 \left(\frac{n_2 \pi}{b} y \right) \quad (6)$$



а) $n_1=1, n_2=1$; б) $n_1=1, n_2=2$; в) $n_1=2, n_2=1$; г) $n_1=2, n_2=2$.

Рис. 2. Графіки щільності ймовірності знаходження електрона в потенціальній ямі.

Використовуючи метод Фур'є розділення змінних, граничні умови та чисельний метод послідовних наближень (ітерацій) визначаємо власні значення енергії $E_{n,m}$ та хвильові числа.

З метою підвищення якості та ефективності базової фізико-математичної підготовки здобувачів вищої освіти інженерних спеціальностей на основі результатів нашого дослідження було розроблено віртуальні імітаційні лабораторні роботи з дисциплін фізика, фізичні основи сучасних інформаційних технологій, фізико-математичне забезпечення магістерських програм, де вивчаються елементи квантової фізики. Така організація освітнього процесу сприяє актуалізації знань та формуванню наукового стилю мислення студентів; дозволяє створювати проблемні ситуації, що спонукає студентів до пошуку відповіді в процесі самостійної розумової діяльності; сприяє узагальненню й осмисленню знань, отриманих при виконання завдань та розв'язуванні задач.

Висновки. Розглянуто математичні, комп'ютерні моделі просторової прямокутної квантової ями з нескінченно високими стінками. 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 дисциплін: фізика, фізичні основи сучасних інформаційних технологій і фізико-математичне забезпечення магістерських програм при вивченні розділів «Зонна теорія твердих тіл» та «Електронна провідність металів».

Література:

1. Sosnickaya N., Morozov M., Khalanchuk L., Onyshchenko H. Modelling the Electromagnetic Processes and Phenomena in Quantum-Sized Systems in the Course of Physical and Mathematical Support of Master's Programs for the "Electric Power Engineering, Electrical Engineering and Electromechanics Specialty". *Proceedings of the International Conference on Modern Electrical and Energy Systems, MEES 2019 (Kremenchuk; Ukraine; 23 September 2019-25 September 2019)*. 2019. DOI: 10.1109/MEES.2019.8896623.

2. Грибачев В. Методы получения и применения квантовых точек. *Компоненты и технологии*. 2009. № 9. С. 127-130.

3. Романова К. А., Галяметдинов Ю. Г. Моделирование квантовых состояний квантовых точек «ядро/оболочка» CdSe/CdS и CdSe/ZnS. *Вестник Казанского технологического университета*. 2017. Т. 20, № 19. С. 15-17.

4. Расчет энергетического спектра S-электронов сферической квантовой точки на основе узкозонных полупроводниковых

соединений $A''Bv$ в матрице GaP / С. Б. Смирнов и др. *Нетрадиційні і поновлювані джерела енергії*. 2011. С. 164-168.

5. Pokutnyi S. Strongly optical absorbing nanostructure containing metal quantum dots: theory. *Journal of Lasers, Optics & Photonics*. 2017. Vol. 4, № 2. P. 156-158. DOI: 10.4172/2469-410X.1000156.

6. 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.

7. Морозов М. В., Халанчук Л. В. Моделювання стану електрона у циліндричній квантовій точці з оболонкою. *Вісник Запорізького національного університету. Сер. Фізико-математичні науки*. Запоріжжя, 2019. № 2. С. 117-123. DOI: 10.26661/2413-6549-2019-2-13.

8. Коническая квантовая точка: электронные состояния и дипольный момент / Д. А. Багдасарян и др. *Известия НАН Армении. Сер. Физика*. 2017. Т. 52, № 2. С. 177-188.

9. Айрапетян Д. Б., Двоян К. Г., Казарян Э. М. Прямое межзонное поглощение света в сильно сплюснутой эллипсоидальной квантовой точке. *Известия НАН Армении. Сер. Физика*. 2007. Т. 42, № 4. С. 227-235.

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

11. Алексанян А., Арамян К., Никогосян Г., Буниатян В. Управление энергией основного перехода в цилиндрической квантовой точке, покрытой слоем квантовой ямы. *Ученые записки Арцахского государственного университета. Сер. Естественные науки*. 2015. № 1. С. 39-44.

12. Айрапетян Д. Б., Котанджян Т. В., Тевосян О. Х. Моделирование ограничивающего потенциала для цилиндрической квантовой точки. *Известия НАН РА. Сер. Физика*. 2014. Т. 49, № 6. С. 410-414.

13. Арутюнян В. А., Айрапетян Д. Б., Багдасарян Д. А. Одноэлектронное состояние в полупроводниковом наносферическом слое большого радиуса. *Известия НАН Армении. Сер. Физика*. 2016. Т. 51, № 4. С. 471-483.

14. 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. P. 2335–2343.

15. Kazaryan E. M., Petrosyan L. S., Shahnazaryan V. A., Sarkisyan H. A. Quasi-conical quantum dot: electron states and quantum transitions. *Communications in Theoretical Physics*. 2015. Vol. 63, № 2. P. 255-260. DOI:10.1088/0253-6102/63/2/20.

16. 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. DOI:10.1155/2015/915742.

17. Зегря Г. Г., Константинов О. В., Матвеевцев А. В. Структура энергетических квантовых уровней в квантовой точке, имеющей форму сплюснутого тела вращения. *Физика и техника полупроводников*. 2003. Т. 37, Вып. 3. С. 334-338.

18. Кучерук І. М., Горбачук І. Т., Луцик П. П. Загальний курс фізики: навч. посібник: у 3 т. Т. 2. Електрика і магнетизм. Київ: Техніка, 2001. 452 с.

19. Халанчук Л. В., Чопоров С. В. Огляд методів генерації дискретних моделей геометричних об'єктів. *Вісник Запорізького національного університету. Сер. Фізико-математичні науки*. Запоріжжя, 2018. № 1. С. 139-152. DOI: 10.26661/2413-6549-2018-1-14.

МАТЕМАТИЧНЕ КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИХ ЯВИЩ ТА ПРОЦЕСІВ

Сосницька Н. Л., Морозов М. В., Халанчук Л. В.

Анотація

У статті розглянуто застосування математичного комп'ютерного моделювання стану електронів у просторовій квантовій ямі з нескінченно високими стінками. Використано хвильове рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електрона і граничні умови для отримання власних значень енергії та виду хвильової функції і щільності ймовірності. Для аналітичного розв'язку рівняння Шредінгера використовується метод Фур'є розділення змінних. Для побудови графіків хвильової функції та щільності ймовірності знаходження електрону в заданій області квантової ями використано пакети програм Scilab, MathCad, дискретні моделі розв'язку диференціальних рівнянь у частинних похідних та дискретні структуровані сітки.

Ключові слова: математичне комп'ютерне моделювання, рівняння Шредінгера, квантові точки, хвильова функція, власні значення енергії електрона, структуровані дискретні моделі, віртуальні імітаційні лабораторні роботи.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ

Сосницкая Н. Л., Морозов Н. В., Халанчук Л. В.

Аннотация

В статье рассмотрено применение математического компьютерного моделирования состояния электронов в пространственной квантовой яме с бесконечно высокими стенками. Использовано волновое уравнение Шредингера для стационарных состояний электрона и граничные условия для получения

собственных значений энергии, вида волновой функции и плотности вероятности нахождения электрона в заданной области квантовой ямы. Для аналитического решения уравнения Шредингера используется метод Фурье разделения переменных. Для построения графиков волновой функции и плотности вероятности нахождения электрона в заданной области квантовой ямы использованы пакеты программ Scilab, MathCad, дискретные модели решения дифференциальных уравнений в частных производных и дискретные структурированные сетки.

Ключевые слова: математическое компьютерное моделирование, уравнение Шредингера, квантовые точки, волновая функция, собственные значения энергии электрона, структурированные дискретные модели, виртуальные имитационные лабораторные работы.

MATHEMATICAL COMPUTER SIMULATION OF QUANTUM-MECHANICAL PHENOMENA AND PROCESSES

N. Sosnyckaya, M. Morozov, L. Khalanchuk

Summary

The article deals with the application of mathematical computer simulation of the state of electrons in a spatial quantum well with infinitely high walls. Mathematical computer simulation methods were used to study and research the wave function of an electron and the eigenvalues of energy and their dependence on the structure, shape and size of a quantum dot. We used the Schrödinger wave equation for steady state electrons and boundary conditions to obtain the eigenvalues of the energy and the type of wave function and probability density of finding an electron in a given quantum well. The analytical solution of the Schrödinger equation uses the Fourier method of separating variables. Using the Fourier method of separation of variables, the boundary conditions and the numerical method of successive approximations (iterations) determine the eigenvalues of energy and wave numbers. Scilab, MathCad software package, discrete partial differential equation models, and discrete structured grids were used to plot the wave function and the probability density of finding an electron in a given quantum well. Using the Scilab software package, you can visualize the kind of wave function and probability density for a 3D spatial quantum well. The results of the research were used to provide methodological support for the laboratory practicum in the following disciplines: physics, physical foundations of modern information technologies and physico-mathematical provision of master's programs in the study of sections "Zone theory of solids" and "Electronic conductivity of metals".

Key words: mathematical computer simulation, Schrödinger equation, quantum dots, wave function, eigenvalues of electron energy, structured discrete models, virtual simulation laboratory works.

15. *Дейниченко Г. В., Золотухіна І. В., Юдіна Т. І.* Дослідження органолептичних та фізико-хімічних показників низькокальцієвого копреципітату зі сколотин 142
16. *Дейниченко Г. В., Гузенко В. В., Омельченко О. В., Мельник О. Є.* Аналіз сучасного використання пектинопродуктів в харчовій промисловості 151
17. *Євлаш В. В., Пілюгіна І. С., Железняк З. В., Добровольська О. В.* Розробка та оцінка якості желе, збагаченого аскорбіновою кислотою 159
18. *Лозенко С. І., Воевода Н. В.* Дослідження результативності обробки виноматеріалів на базі ТОВ «Торгівельно виробнича компанія Квадро» 168
19. *Назаренко І. А., Горяйнова Ю. А., Боднарчук О. А., Світлична О. О.* Дослідження якості бубликів ванільних із використанням борошна з пивної дробини 175
20. *Медведева А. О., Антонюк І. Ю.* Технологія безглютенового печива пісочного 186
21. *Головко Т. М., Геліх А. О., Применко В. Г., Головко М. П.* Зміна показників якості фаршу із прісноводних гідробіонтів з рослинними компонентами 193
22. *Заморська І. Л., Волкова Т. В., Сасс А. В.* Інноваційні технології збереження якості замороженої суниці садової для виробництва харчової продукції 202
23. *Загорко Н. П., Коляденко В. В., Кашуба А. А.* Відомості щодо виробництва плодово-ягідних вин в Україні 211
24. *Прісс О. П., Жукова В. Ф.* Розробка технології та оцінка якості зефіру підвищеної харчової цінності 220

*ЕЛЕКТРОЕНЕРГЕТИКА, ЕЛЕКТРОТЕХНІКА ТА
ЕЛЕКТРОМЕХАНІКА*

25. *Галько С. В., Самойчук К. О.* Исследование гибридной солнечной панели на основе цилиндрических когенерационных фотомодулей 231
26. *Сілі І. І., Азархов О. Ю.* Дослідження та розрахунок параметрів антенної системи знищення шкідників картоплі 241

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

27. *Лубко Д. В., Строкань О. В., Мірошніченко М. Ю.* Дослідження та аналіз інформаційно-пошукового web-ресурсу Eures 250
28. *Сосницька Н. Л., Морозов М. В., Халанчук Л. В.* Математичне комп'ютерне моделювання квантово-механічних явищ та процесів 262