

швидкості збіжності до функції є послідовність многочленів її найкращого наближення. Але, на жаль, оператор найкращого наближення не є лінійним. Це в великій мірі ускладнює побудову многочленів найкращого наближення, а, отже, їх використання.

Якщо розглядати лише лінійні методи підсумовування рядів Фур'є, то великий клас таких методів дає матричне підсумовування. Одним з цих методів є метод Фейєра, метод середніх арифметичних перших n сум Фур'є.

У цій статті знайдено асимптотичні рівності при $n \rightarrow \infty$ для верхньої межі величини сумісного наближення сумами Фейєра порядку n функцій, що мають похідну в сенсі Степанця, у випадку досягнення насиченості в метриці простору сумовних в p -тому степені функцій. При цьому виділено головний член асимптотичного розкладу та вказано порядок залишкового члена.

Ключові слова: суми Фейєра, сумісне наближення, похідна в сенсі Степанця, інтегральна метрика.

Отримано: 14.08.2019

УДК 621.315+539.1

DOI: 10.32626/2308-5878.2019-20.100-107

Н. Л. Сосницька, д-р пед. наук, професор,

В. І. Кравець, канд. фіз.-мат. наук,

М. В. Морозов, канд. фіз.-мат. наук,

Г. О. Онищенко, аспірант,

Л. В. Халанчук, аспірант

Таврійський державний агротехнологічний університет, м. Мелітополь

МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНІВ У КОНІЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

Розглядається рівняння Шредінгера для стаціонарних станів електронів (носіїв електричного заряду) у кінчній квантовій точці (ККТ). Отримані хвильові функції, щільність ймовірності, хвильові числа і власні значення енергії для S — електронів та вивчена їх залежність від параметрів ККТ: діаметра основи D та висоти H . Використовується циліндрична система координат та метод Фур'є розділення змінних. Крім того, розглянуто наближення Вентцеля-Крамерса-Брилюєна (ВКБ — метод) для визначення власних значень енергії електрона. Використана умова нормування хвильової функції та отримано значення амплітуди хвильової функції для стаціонарних станів електрона. Для випадку ККТ власна енергія електрона стаціонарного стану у наближенні ефективної маси залежить від координати z на відміну від циліндричної квантової точки. Розглянуто максимально і мінімально допустимі значення координати z та відповідні значення власної енергії основного стану

електрона при наступних параметрах ККТ: $D = 8$ нм, $H = 10$ нм. Побудовано 3D графіки дискретної моделі щільності ймовірності знаходження електрона у заданій області ККТ для випадку різних радіальних та аксіальних мод хвильової функції. Також розглянуто деякі види можливих стоячих електронних хвиль у ККТ та застосована умова Бора-Зоммерфельда квантування орбіт (нульове наближення метода Вентцеля-Крамєрс-Брилюєна) для отримання значень власної енергії електрона для відповідних мод. Для математичного моделювання та отримання дискретної моделі щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області кінчної квантової точки використані математичні пакети MathCad та Scilab.

Квантові точки знаходять широке застосування у наноелектроніці, наприклад: монітори (QLED — технології), інжекційні напівпровідникові лазери для волоконної оптики, сенсори та інше. Тому перспективним та актуальним є розробка наближених, спрощених моделей для розгляду фінітного руху носіїв заряду у кінчній квантовій точці, які можуть бути використані у лабораторному практикумі курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» спеціальності «Комп'ютерні науки».

Ключові слова: *кінчна квантова точка, власна енергія, інформаційні технології, комп'ютерне моделювання, дискретна модель.*

Постановка та обґрунтування актуальності проблеми. У сучасних оптоелектронних приладах (QLED — монітори, напівпровідникові інжекційні лазери, сенсори, біомаркери) використовують квантові точки (QD). Тому дослідження відповідних математичних моделей різноманітних квантових точок (сферичних, циліндричних, кінчних) та їх застосування для організації і проведення лабораторних робіт з дисципліни «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» спеціальності «Комп'ютерні науки» є актуальною задачею [3]. Перспективним є розробка наближених, спрощених моделей для розгляду фінітного руху електронів у квантових точках, які забезпечують визначення щільності ймовірності та власних значень енергії електрона.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У роботі [2] розглянуто методи отримання, властивості та використання різноманітних квантових точок. В першу чергу представлені методи молекулярно-променевої епітаксії, колоїдного синтезу та кванторозмірні ефекти в напівпровідниках гетероструктурах. Дискретний спектр дозволених енергій носіїв електричного заряду (електрона) залежать від форми, розмірів квантової точки (КТ) та виду обмежуючого потенціалу. В роботі [6] наведені дослідження стану електронів у пірамідальних і кінчних квантових точках та отримані власні значення енергії і графіки щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області

квантової точки для різних мод хвильових функцій. Розгляд стану електрона в кінчних квантових точках зроблено в статтях [1, 7, 8]. Застосовується адиабатичне наближення та числові методи (метод Арнольда). Отримані значення енергії та залежність її від геометричних параметрів ККТ діаметра D основи та висоти H .

Мета статті. Дослідити стан електронів у кінчній квантовій точці та залежність власної енергії від розмірів ККТ: висоти H та діаметра D основи у випадку абсолютно непрозорих стінок та наближення ефективної маси.

Методи дослідження. Використовується математичне, комп'ютерне моделювання поведінки електрона в кінчній квантовій точці. Знаходиться аналітичне рішення рівняння Шредінгера для стаціонарних станів та власні значення енергії електрона. Також застосовується нульове наближення метода Вентцеля-Крамерса-Брилюєна для розгляду стоячих електронних хвиль та визначення власних значень хвильових чисел електрона. Для математичного моделювання та побудови 3D графіків дискретної моделі щільності різних радіальних та аксіальних мод використовується математичні пакети MathCad та Scilab.

Виклад основного матеріалу. Розглянемо стан електрона у кінчній квантовій точці (ККТ — рис. 1 а) у випадку непрозорих стінок у наближенні ефективної маси. Виконуємо заміну змінної:

$$a = r + z R / H. \quad (1)$$

Тоді потенціальна енергія електрона для циліндричної системи координат (рис. 1 в) дорівнює:

$$U(r, z) = \begin{cases} U_1 = 0 & \text{у конусі, якщо } 0 \leq a \leq R \text{ та } 0 \leq z \leq H, \\ U_2 = \infty & \text{поза конусу, якщо } a > R \text{ та } z < 0, z > H. \end{cases} \quad (2)$$

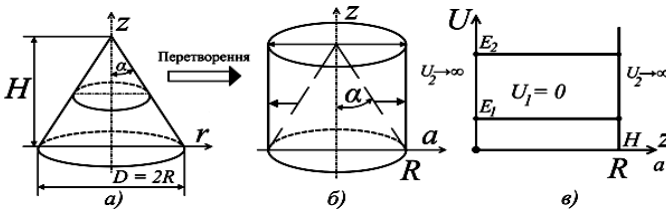


Рис. 1. а) Кінчна квантова точка; б) візуалізація математичних перетворень; в) потенціальна енергія електрона: R — радіус, H — висота.

Для S — електрона ($l = 0$) хвильова функція залежить тільки від координат r та z : $\psi(R, z)$. Тоді рівняння Шредінгера для стаціонарних станів у циліндричній системі координат має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(r, z) = 0, \quad (3)$$

де m — ефективна маса електрона, E — власна енергія.

Використовуємо метод Фур'є розділення змінних для розв'язання рівняння (3):

$$\psi(r, z) = A\varphi_1(r) \cdot \varphi_2(z) = AJ_0(k_1 r) \cdot \sin(k_2 z), \quad (4)$$

де k_1, k_2 — хвильові числа, $J_0(k_1 r)$ — функція Бесселя нульового порядку.

Після заміни змінної (1) рівняння Шредінгера (3) для хвильової функції $\psi(a, z)$ має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial a^2} + \frac{1}{(a-z) \cdot R/H} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial a} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(a, z) = 0. \quad (5)$$

Диференціальне рівняння (5) не має аналітичного розв'язку, але може бути розв'язана чисельними різницевиими методами при граничних умовах $a = R$:

$$\psi(R, z) = 0.$$

Хвильові числа k_1, k_2 та власні значення енергії електрона знаходимо, використовуючи граничні умови. Наприклад, для випадку,

коли висота конуса $H = \frac{R}{\operatorname{tg} \alpha} = \sqrt{3} \cdot R$, координата z_1 поверхні конуса

дорівнює:

$$z_1 = \frac{(R-r_1)}{\operatorname{tg} \alpha} = \sqrt{3} (R-r_1) = \frac{H}{R} (R-r_1) = H \left(1 - \frac{r_1}{R}\right).$$

Тоді

$$r_1 = R - \operatorname{tg} \alpha \cdot z_1 = R - z_1 R / H$$

та

$$\begin{aligned} \psi_1(r_1, z) &= A\varphi_1(R - z_1 R / H) \cdot \varphi_2(z_1) = \\ &= J_0[k_1 (R - z_1 R / H)] \cdot \sin k_2 z_1 = 0. \end{aligned}$$

Звідки:

$$k_1 (R - z_1 R / H) = b_n, \quad k_2 z_1 = n_2 \pi$$

та

$$k_1 = \frac{b_n \cdot H}{R(H - z_1)} \quad (6)$$

де b_n — нулі функції Бесселя $J_0(x)$ (табл. 1) [4].

Таблиця 1

Нулі функції Бесселя

n	1	2	3	4	5
b_n	2,405	5,250	8,654	11,791	14,931

Для $z = H$:

$$\sin(k_2 H) = 0,$$

тоді

$$k_2 = \frac{\pi \cdot n_2}{z_1}, \quad (7)$$

де $n_2 = 1, 2, 3$ — квантові числа.

Власні значення енергії електрона в ККТ залежать від координати z , з рівняння Шредінгера (3) отримуємо:

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2 + k_2^2,$$

та

$$E(z) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{3b_{n1}^2}{(H-z)^2} + \frac{n_2^2 \cdot \pi^2}{z^2} \right]. \quad (8)$$

Мінімальне $z_{\min} = 0,1$ Н та максимальне $z_{\max} = 0,9$ Н значення координати z визначаються параметрами кристалічної ґратки речовини КТ. На рис. 2 представлений графік залежності власної енергії E електрона від координати z .

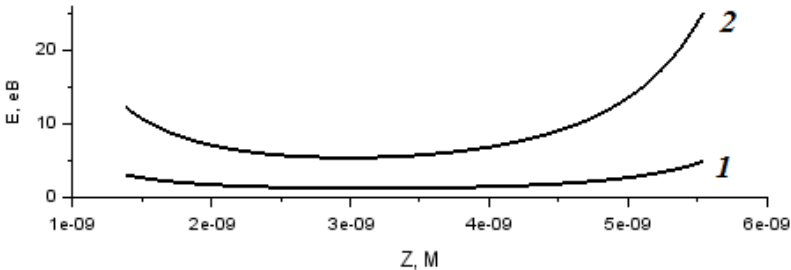


Рис. 2. Залежність власної енергії $E_{n1, n2}$ від координати z :

1 — $n_1 = 1, n_2 = 1$; 2 — $n_1 = 2, n_2 = 2$

Визначаємо амплітуду A хвильової функції $\psi(R, z)$ використовуючи умову нормування:

$$\begin{aligned} \int |\psi(r, z)|^2 dV &= \\ &= A^2 \int_0^H \int_0^{r_1} J_0^2(k_1 r) \cdot 2\pi r dr \cdot \sin^2(k_2 z) dz = 1. \end{aligned} \quad (9)$$

На рис. 3 представлені 3D графіки дискретної моделі [5] щільності ймовірності знаходження електрона у заданій точці області ККТ, яка дорівнює:

$$\rho(r, z) = \psi^2(r, z) = A^2 \cdot J_0^2(k_1 \cdot r) \cdot \sin^2(k_2 \cdot z). \quad (10)$$

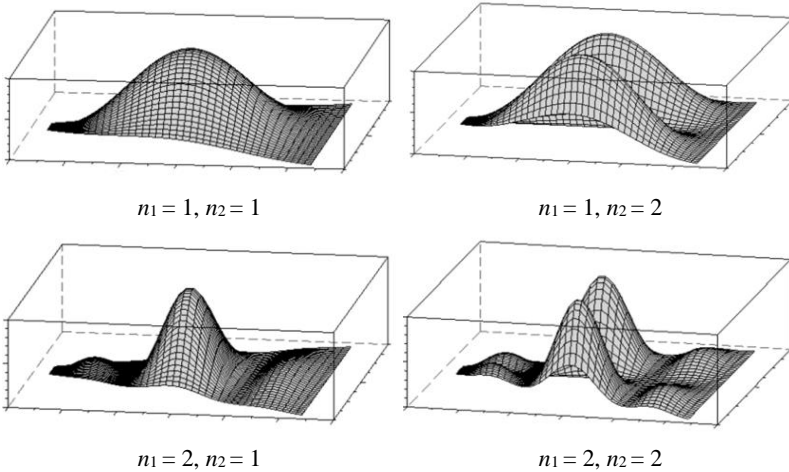


Рис. 3. Щільність ймовірності знаходження електрона у конічній квантовій точці для аксіальних та радіальних мод

Значення енергії електрона можна отримати, використовуючи умову Бора-Зоммерфельда квантування орбіт (нульове наближення метода ВКБ). На рис. 4 зображені можливі орбіти стоячих електронних хвиль у ККТ.

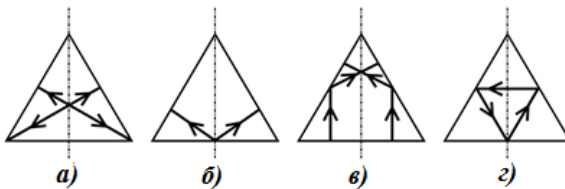


Рис. 4. Можливі орбіти стоячих електронних хвиль у ККТ

Наприклад, для випадку $H = \sqrt{3}R$ для стоячої хвилі а), $l_1 = \sqrt{3}R$ та $2p_1l_1 = n_1h$, тоді:

$$E_1 = \frac{p_1^2}{2m} = \frac{n_1^2 h^2}{24mR^2} = \frac{n^2 h^2}{6mD^2} \quad (11)$$

Мінімальна енергія електрона у ККТ залежить від D — діаметра основи та H — висоти конуса (8). Наприклад, значення енергії для основного стану електрона у наближенні ефективної маси при $z = H/2$, $R = 4 \text{ нм}$ та $\alpha = 60^\circ$ дорівнює $E_1 \approx 1,2 \text{ еВ}$.

Висновки з дослідження і перспективи подальших розробок. Розглянуто розв’язання рівняння Шредінгера стану S — електронів для конічної квантової точки у випадку непрозорих стінок. Отримані

хвильові функції та розподіл щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області ККТ. Досліджено залежність власних значень енергії від розмірів квантової точки.

Результати досліджень математичного, комп'ютерного моделювання використовують при організації та проведенні імітаційної лабораторної роботи «Математичне моделювання стану електронів у конічній квантовій точці» курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» спеціальності «Комп'ютерні науки». В подальшому предствляє значний інтерес розгляд рівняння Шредингера та стан електронів у конічній квантовій точці з оболонкою та залежність енергій електрона від більш складної геометрії квантових точок.

Список використаних джерел:

1. Багдасарян Д. А. Коническая квантовая точка: электронные состояния и дипольный момент / Д. А. Багдасарян, Д. Б. Айрапетян, А. А. Саркисян, Э. М. Казарян, А. Медвид // Известия НАН Армении, Физика. — 2017. — Т. 52, № 2. — С. 177–188
2. Грибачев В. Методы получения и применения квантовых точек / В. Грибачев // Компоненты и технологии. — 2009. — С. 127–130.
3. Дьоміна Н. А. Моделювання кванторозмірних гетероструктур у лабораторному практикумі з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» / Н. А. Дьоміна, М. В. Морозов // Збірник наукових праць Кіровоградського державного педагогічного університету імені Володимира Винниченка «Наукові записки. Серія: Проблеми методики фізико-математичної і технологічної освіти». — Кропивницький : ПВВ КДПУ ім. В. Винниченка, 2017. — Вип. 11. — № 5 (1227). — С. 108–134.
4. Кафтанова Ю. В. Специальные функции математической физики / Ю. В. Кафтанова. — Харьков : Новое слово, 2009. — 178 с.
5. Халанчук Л. В. Огляд методів генерації дискретних моделей геометричних об'єктів / Л. В. Халанчук, С. В. Чопоров // Вісник Запорізького національного університету. Фізико-математичні науки : збірник наукових статей. — Запоріжжя : ЗНУ, 2018. — № 1. — С. 139–152.
6. Lozovski V. The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots / V. Lozovski, V. Piatnytsia // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. — 2013. — № 8. — P. 2335–2343.
7. Kazaryan E. M. Quasi-Conical Quantum Dot: Electron States and Quantum Transitions / E. M. Kazaryan, L. S. Petrosyan, V. A. Shahnazaryan, H. A. Sarkisyan // IOP Publishing Limited. — 2015.
8. Hayrapetyan D. B. Direct Interband Light Absorption in Conical Quantum Dot / D. B. Hayrapetyan, A. V. Chalyan, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan // Journal of Nanomaterials. — Vol. 2015. — 6 p.

MODELLING OF ELECTRON STATES IN CONICAL QUANTUM DOTS

This paper is devoted to the study of solutions of the stationary Schrodinger equation for the case of a conical quantum dot (CQD). We ob-

tained wave numbers and functions, probability density, and energy eigen values for s -electrons, and studied how they depend on the geometrical parameters of a CQD (diameter D and height H). We used the Wentzel-Kramers-Brillouin method to calculate the energy eigen values. We used the wave function normalization condition to obtain the wave function amplitude for electron stationary states. The energy eigen states of a stationary electron in the effective mass approximation depends on z -coordinate in case of a CQD, unlike the case of a cylindrical quantum dot. We consider the z -coordinate limits for respective energy eigen values for a CQD with $D = 8$ nm and $H = 10$ nm. We plot 3D distribution of the electron probability density in a CQD for axial and radial wave function modes. We also consider the standing electron waves in a CQD with energy eigen values obtained using the Bohr-Sommerfeld quantization condition (0^{th} approximation of the Wentzel-Kramers-Brillouin method). The spatial probability density discrete modelling is performed in MathCad and Scilab environment. Computer and mathematical simulations have been widely employed in modern engineering. Based on the results of this research we developed a computer modelling laboratory work «Modelling of electronic states in a conical quantum dot». Quantum dots have found various applications in nanoelectronics, for example QLED screens, semiconductor lasers for fiber optics, sensors etc. Therefore, the development of simplified models of finite movement of charge carriers in a quantum dot is the promising direction of a laboratory course «Physical fundamentals of modern information technologies» for «Computer sciences» students.

Key words: *conical quantum dot, electron wave function, eigen energy, information technologies, computer modeling, discrete model.*

Отримано: 16.08.2019