

*Павлюк Олександр,
здобувач другого (магістерського) рівня вищої освіти
фізико-математичного факультету
Грищук Андрій,
кандидат педагогічних наук, доцент,
доцент кафедри фізики та методики її навчання,
Житомирський державний університет імені Івана Франка,
м. Житомир, Україна*

ОСОБЛИВОСТІ ЗАСТОСУВАННЯ ПРОГРАМИ СИМВОЛЬНОГО ЧИСЛЕННЯ WOLFRAM MATHEMATICA ТА WOLFRAM ALPHA, ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСІВ РУХУ ЕЛЕКТРОНІВ В КВАНТОВИХ ХРЕСТОПОДІБНИХ НАНОСТРУКТУРАХ

В сучасній фізиці та нанотехнологіях моделювання руху електронів у квантових наноструктурах відіграє ключову роль для розуміння та прогнозування поведінки матеріалів на нанорівні. Одним із перспективних об'єктів дослідження є хрестоподібні наноструктури, які володіють унікальними властивостями пов'язаними із симетрією системи та квантовим ефектам. Аналіз таких систем вимагає складних обчислень, які можна ефективно виконувати за допомогою програм символічного числення. У цьому контексті програми Wolfram Mathematica та Wolfram Alpha є потужними інструментами для аналітичного та чисельного моделювання, що дозволяє не лише спростувати розрахунки, але й отримувати глибші інсайти в механізми процесів на квантовому рівні.

Розглянуті дослідження методів застосування Wolfram Mathematica та Wolfram Alpha для симуляції поведінки електронів у квантових хрестоподібних наноструктурах, акцентуючи увагу на точності, швидкості та візуалізації результатів.

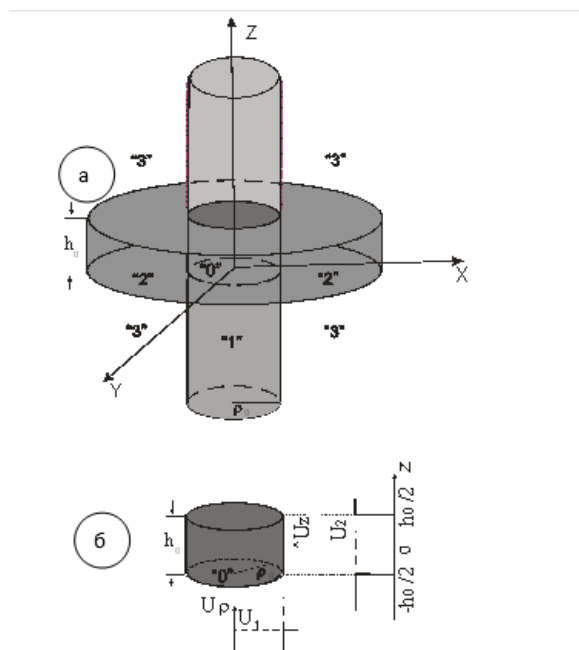


Рис.1. Геометрична схема хрестоподібної наноструктури, та потенціальна енергія електрона в квантовій точці.

Наногетеросистема містить циліндричний квантовий дріт (1), що перетинає під прямим кутом безмежну плоску квантову яму (2) шириною , утворюючи таким чином циліндричну квантову точку (КТ) (0) (рис.1).

Щоб отримати спектр екситонів у досліджуваній системі, спершу потрібно розробити теорію для електронного та діркового спектрів і відповідних хвильових функцій. Оскільки ця теорія однаково застосовна для обох квазічастинок, надалі ми будемо розглядати спектр і хвильові функції квазічастинки загалом, без вказівки на тип (електрон чи дірка), використовуючи ефективну масу і потенціал . Ефективні маси і потенціальні енергії квазічастинки (електрона або дірки) в різних областях наногетеросистеми вважаються відомими і збігаються з тими, що характерні для масивних аналогів відповідних нанокристалів.

Розв'язок рівняння Шредінгера та використання граничних умов розмежування середовищ спричиняє до виникнення двох зв'язаних між собою трансцендентних рівнянь

$$\begin{cases} \frac{k_0}{\mu_0} \begin{pmatrix} \text{ctg}(k_0 \frac{h_0}{2}) \\ -\text{tg}\left(k_0 \frac{h_0}{2}\right) \end{pmatrix} = -\frac{k_1}{\mu_1}, \\ \frac{\chi_0 J'_m(\chi_0 \rho_0)}{\mu_0 J_m(\chi_0 \rho_0)} = \frac{\chi_2 K'_m(\chi_2 \rho_0)}{\mu_2 K_m(\chi_2 \rho_0)}, \end{cases} \quad (1)$$

з якої однозначно визначається енергетичний спектр квазічастинки $E_{n_z, n_\rho, m}^{(n_w, n_f)}$ при фіксованих значеннях чисел n_w, n_f та квантових чисел n_z, n_ρ, m .

При цьому визначаються і хвильові функції квазічастинки

$$\Psi_{n_z, n_\rho, m}^{(n_w, n_f)}(z, \rho, \varphi) = \begin{cases} \Psi_{n_z, n_\rho, m}^{(0)n_w, n_f}(z, \rho, \varphi) \\ \Psi_{n_z, n_\rho, m}^{(1)n_w, n_f}(z, \rho, \varphi) \\ \Psi_{n_z, n_\rho, m}^{(2)n_w, n_f}(z, \rho, \varphi) \end{cases} \quad (2)$$

Зауважимо, що числа n_w, n_f формально подібні до квантових чисел n_z, n_ρ , тільки перші визначаються лише умовами зникнення хвильових функцій на відповідних межах із зовнішнім середовищем (n_w — дріт-середовище, n_f — плівка-середовище), а другі - умовами неперервності хвильових функцій і потоків густин на внутрішніх межах складної наногетеросистеми. Отже, "фізична природа" груп чисел (n_w, n_f) і (n_z, n_ρ) трохи подібна, а трохи

відрізняється, тому надалі ми будемо називати (n_w, n_f) просто числами, а (n_z, n_ρ) – квантовими числами.

Отже, енергетичні спектри і хвильові функції електрона (e), чи дірки (h), тепер цілком визначені і далі вони будуть позначатися відповідними індексами (e, h).

Розрахунки виконувалися з використанням програми символьного числення **Wolfram Mathematica 11**.

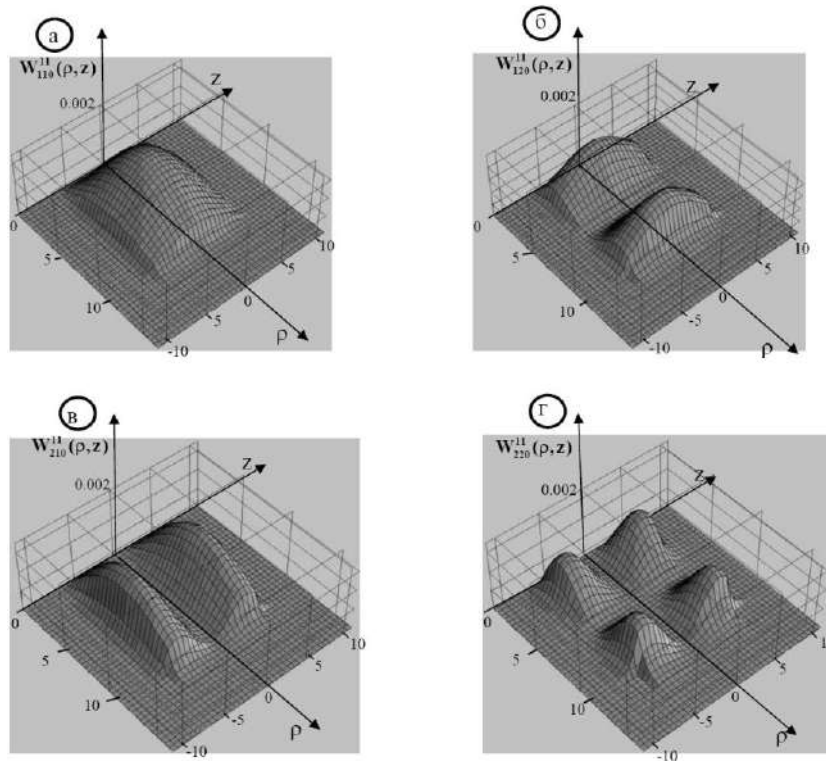


Рис. 2 Залежності хвильових функцій $W_{n_z n_\rho}^{n_w n_f}$ в різних станах та середовищах від ρ і z при $\rho_0 = 10a_{\text{HgS}}$; $h_0 = 15a_{\text{HgS}}$.

На рис. 2.а, б, в, г представлено залежності густин ймовірностей для основного та кількох нижніх збуджених станів електрона від координат z та ρ . Зокрема, на рис. 2а показано, що густина ймовірності основного стану має один максимум, що узгоджується із загальною теорією локалізованих станів квазічастинок.

Рис. 2б демонструє перший збуджений енергетичний рівень з квантовими числами $n=1, m=0$, де густина ймовірності характеризується двома максимумами уздовж напрямку ρ та одним уздовж осі z .

На рис. 2в показано густину ймовірності для третього збудженого стану з квантовими числами $n=2, m_0$, де зображено два максимума вздовж осі z (хвильова функція симетрична відносно z) та один уздовж напрямку ρ .

Наостанок, рис. 2г відповідає квантовим числам $n_2, m=0$, де густина ймовірності показує по два максимума уздовж обох осей z та ρ .

Підсумовуючи результати, слід зазначити, що розроблена теорія та методи обчислень за допомогою Wolfram Mathematica 11 не лише описують спектральні

характеристики електронів та дірок, а й забезпечують основу для побудови теорії екситонного спектра, ґрунтуючись на хвильових функціях цих квазічастинок.

Список використаних джерел та літератури

1. O.M.Makhanets, O.M.Voitsekhivska, A.M.Gryshchuk Spectrum of confined and interface phonons in complicated cylindrical nanoheterosystem placed into the plane quantum well in water // Advanced optical materials. – 2006. V.9, №5. P. 1564-1567
2. O.M.Makhanets, A.M. Gryshchuk., M.M.Dovganiuk. Influence of electric field at electron energy spectrum in cylindrical quantum wire with two quantum dots // Rom.Journ.Phys. 2007. Vol. 52. №.3-4. P. 403-409.
3. Mykola Tkach, Olexander Makhanets, Andrii Gryshchuk, Rostyslav Fartushynsky Exciton in Quantum Tube with Hexagon Cross // Rom.Journ.Phys. 2007. Vol. 54. №.1-2. P. 37-47.
4. Zinovchuk, A.V., Gryshchuk, A.M. Alloy-assisted Auger recombination in InGaN // Optical and Quantum Electronics, 2018, V. 50 455 P.