

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

# Фізичні основи наноелектроніки

## Практикум

Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського  
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра  
за освітньою програмою «Електронні мікро- і наносистеми та технології»  
спеціальності 176 Мікро- та наносистемна техніка

Укладачі: О. В. Семеновська, О. М. Фалєєва

Електронне мережеве навчальне видання

Київ  
КПІ ім. ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО  
2024

Укладачі: *Семеновська Олена Володимирівна*, канд. техн. наук, доц.  
*Фалєєва Олена Михайлівна*, канд. техн. наук

Рецензент *Татарчук Д.Д.*, д.т.н, доцент, зав. кафедри МЕ

Відповідальний редактор *Тимофєєв В.І.*, д.т.н, проф., зав. кафедри ЕІ

*Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського  
(протокол № 1 від 10.09.2024 р.)  
за поданням вченої ради факультету електроніки  
(протокол № 06/2024 від 26.06.2024 р.)*

**Семеновська О. В.**

Ф21 Фізичні основи наноелектроніки [Електронний ресурс]: практикум: навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавра за освіт. програмою «Електронні мікро- і наносистеми та технології» спец. 176 Мікро- та наносистемна техніка / КПІ ім. Ігоря Сікорського; уклад.: О. В. Семеновська, О. М. Фалєєва. – Електрон. текст. дані (1 файл). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – 36 с.

У посібнику викладено основні концепції та методики розрахунку характеристик нанорозмірних структур та вивчення методів їх комп'ютерного моделювання. Приділено увагу таким важливим задачам, як падіння частинки на потенціальну сходинку, утворену гетеропереходом, як найпростіший приклад використання методу ефективної маси для гетероструктур, розраховано енергетичний спектр електронів у квантових ямах, що утворюються у дозволених зонах гетероструктур, розраховано енергетичні рівні у квантовій ямі скінченної глибини та досліджено залежності кількості та енергії рівнів від фізико-топологічних параметрів гетероструктури.

Навчальний посібник призначений для здобувачів освіти ступеня бакалавра за освітньою програмою «Електронні мікро- і наносистеми та технології» спеціальності 176 Мікро- та наносистемна техніка, але буде також корисним для аспірантів та наукових працівників, які працюють у суміжних областях.

УДК 621.3.049.77

Реєстр. № НП 24/25-060. Обсяг 2,31 авт. арк.

Національний технічний університет України  
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»  
проспект Берестейський, 37, м. Київ, 03056  
<https://kpi.ua>

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 5354 від 25.05.2017 р.

© О. В. Семеновська, О. М. Фалєєва, 2024  
© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024

## З М І С Т

ВСТУП .....	4
1. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА .....	5
2. РУХ МІКРООБ'ЄКТА У ОДНОВИМІРНІЙ НЕСКІНЧЕННО ГЛИБОКІЙ ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ .....	9
3. РУХ МІКРООБ'ЄКТА НАД ЯМАМИ І БАР'ЄРАМИ .....	16
4. ПОТЕНЦІЙНИЙ БАР'ЄР СКІНЧЕННОЇ ШИРИНИ .....	22
5. ПОТЕНЦІЙНА ЯМА КІНЦЕВОЇ ШИРИНИ .....	27
6. КВАНТОВІ СТАНИ У НИЗЬКОРОЗМІРНИХ УМОВАХ .....	32
ВИСНОВКИ .....	37
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ .....	38
ДОДАТОК А Розрахункові домашні роботи .....	39

## ВСТУП

Нанoeлектроніка є новою галуззю науки і техніки, яка формується сьогодні на основі останніх досягнень фізики твердого тіла, квантової електроніки, фізичної хімії та технології напівпровідникової електроніки. Її зміст визначається необхідністю встановлення фундаментальних закономірностей, що визначають фізико-хімічні особливості формування нанорозмірних структур, їх електронні та оптичні властивості.

Дослідження у сфері нанoeлектроніки важливі для розробки нових принципів, а разом з ними і нового покоління надмініатюрних супер швидкодіючих систем обробки інформації. У сучасних інтегральних мікросхемах їх розміри становлять одиниці і десятки частки мікрона. З зменшенням розмірів твердотільних структур до нанометрового діапазону, що складається з одиниць і десятків атомів, все більше проявляються квантові властивості електрона. У його поведінці починають переважати хвильові закономірності, характерні для квантових частинок. З одного боку, це призводить до порушення працездатності класичних транзисторів, які використовують закономірності поведінки електрона як класичної частинки, а з іншого – відкриває перспективи створення нових унікальних елементів для комутації, зберігання і підсилення в інформаційних системах. Ці елементи є основним об'єктом досліджень і розробок нової галузі електроніки - нанoeлектроніки, що зародилася в 80-х роках минулого століття.

Навчальний посібник призначений для використання у навчальному процесі. Основними цілями практичних занять є детальний розгляд та аналіз певної наноструктури, математичний опис фізичних процесів у даній структурі та моделювання переносу заряду в тій чи іншій наноструктурі.

# 1. РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

Вивчення руху мікрооб'єктів у квантовій механіці є важливим аспектом розуміння фундаментальних принципів фізики. Одним із ключових рівнянь, що описують поведінку таких об'єктів, є рівняння Шредінгера, яке описує хвильову функцію мікрооб'єкта.

**Хвильова функція (ХФ)** є математичним виразом, що характеризує ймовірність знаходження частинки в певній точці простору. Сама ХФ не має ніякого фізичного змісту, але має фізичний зміст квадрат амплітуди модуля ХФ  $|\psi|^2 = \psi\psi^*$  – **щільність ймовірності виявлення частинки у даній точці простору.**

Згідно гіпотези де Бройля: якщо об'єкт вільний, то його руху відповідає плоска монохроматична хвиля.

1) *Але вільних мікрооб'єктів не існує!*

2) *Будь-яке вимірювання – це взаємодія з мікрооб'єктом (інакше як ми дізнаємося щось про нього?)*

*А якщо ми взаємодіємо з мікрооб'єктом, це означає що мікрооб'єкт не вільний. А якщо він не вільний, то він не може бути описаний плоскою монохроматичною хвилею де Бройля!*

*Виникає питання: як описати ХФ мікрооб'єкта якщо він не вільний?*

*Відповідь: Дуже просто!! Треба знати умови його руху!*

Умови руху мікрооб'єкту задаються залежністю його потенціальної енергії від координати.

Потенціальна енергія  $U(x, y, z, t) = U(r, t)$  залежить від координат і часу.

**Запишемо рівняння Шредінгера (РШ), яке залежить від часу [1]:**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + U(r, t) \Psi(r, t),$$

де  $\nabla^2 \Psi$  – Лапласіан  $= \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$ ;

$U(x, y, z, t)$  – потенціальна функція частинки;  $\Psi(x, y, z, t)$  – хвильова функція частинки.

Таке рівняння Шредінгера є залежним від часу.

Для того щоб РШ мало розв'язок на ХФ накладаються такі умови:

- 1) Вона повинна бути **НЕПЕРЕРВНОЮ** та **ГЛАДКОЮ** (перша похідна повинна бути неперервною).
- 2) **ОДНОЗНАЧНІСТЬ** (аргументу відповідає одне єдине значення функції).
- 3) **ЛІМІТОВАНІСТЬ**.
- 4) **НОРМОВАНІСТЬ**.

Визначити вид цієї функції у кожній конкретній задачі – основна та складна задача. У деяких випадках взагалі не можна знайти розв'язок цього рівняння.

Для того щоб розв'язати РШ вводять спрощення, і тоді, за певних умов, РШ має розв'язки. Більш простий випадок – рух частинки у стаціонарному силовому полі. Це стаціонарні стани або стани з фіксованим значенням енергії.

Наведемо ПРИКЛАДИ стаціонарної задачі:

1) Гармонічний осцилятор:  $U(x) = \frac{kx^2}{2}$ ;

2) Електрон у воднеподібній системі:  $U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{ze^2}{r}$ ,

де  $r$  – відстань між атомом та електроном.

У випадку стаціонарного силового поля функція  $U = U(x, y, z)$  не залежить від часу і є потенціальною енергією, а ХФ являє собою добуток двох функцій:

$$\Psi(r, t) = \psi(r) \cdot \varphi(t),$$

де  $\varphi(t) = e^{-j\omega t} = e^{-\frac{jEt}{\hbar}}$  – часова частина ХФ;  $\psi(r)$  – координатна частина ХФ.

Підставимо отримані вирази у РШ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) \cdot e^{-\frac{jEt}{\hbar}} + U \cdot \Psi(r, t) \cdot e^{-\frac{jEt}{\hbar}} = i\hbar \Psi(r) \cdot -\frac{jE}{\hbar} \cdot e^{-\frac{jEt}{\hbar}}.$$

Після перетворень

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + U \cdot \Psi(r, t) = E \cdot \Psi(r, t)$$

або

$$\nabla^2 \Psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \Psi(r) = 0$$

Таке рівняння має назву **стаціонарне РШ**.

Якщо координатну частину можна представити як  $\Psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ , тоді РШ прийме такий вигляд:

$$\frac{d^2X(x)}{dx^2} Y(y)Z(z) + \frac{d^2Y(y)}{dy^2} X(x)Z(z) + \frac{d^2Z(z)}{dz^2} X(x)Y(y) + k^2 X(x)Y(y)Z(z) = 0.$$

Розділимо обидві частини рівняння на  $X(x)Y(y)Z(z)$  і отримаємо:

$$\frac{1}{X(x)} \cdot \frac{d^2X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)} \cdot \frac{d^2Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{Z(z)} \cdot \frac{d^2Z(z)}{dz^2} = -k^2$$

Якщо сума незалежних доданків стала, то і кожний доданок – стале значення, а отже другі похідні будуть незалежними.

$$\text{Введемо заміну змінних } \frac{1}{X(x)} \cdot \frac{d^2X(x)}{dx^2} = -k_x^2; \frac{1}{Y(y)} \cdot \frac{d^2Y(y)}{dy^2} = -k_y^2; \frac{1}{Z(z)} \cdot \frac{d^2Z(z)}{dz^2} = -k_z^2.$$

Тоді  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2$ .

Отже, маємо систему незалежних рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + k^2 X(x) = 0 \\ \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + k^2 Y(y) = 0 \\ \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + k^2 Z(z) = 0 \end{cases}$$

Розгляд рівняння Шредінгера дозволяє нам глибше зрозуміти квантово-механічні властивості мікроскопічних систем. Хвильова функція, що задовольняє це рівняння, є основою для визначення ймовірностей виявлення частинок у різних точках простору. Розв'язання рівняння Шредінгера для різних потенціальних енергій показує, як система мікрочастинок переходить між енергетичними рівнями.

Стаціонарні розв'язки рівняння Шредінгера дозволяють визначити енергетичні стани систем, які є дискретними. Це підтверджує основні принципи квантової механіки, згідно з якими частинка в обмеженій області простору може мати лише певні дозволені значення енергії. Приклади, такі як гармонічний осцилятор і електрон у воднеподібній системі, демонструють практичне застосування рівняння Шредінгера у фізиці. Розуміння і застосування рівняння Шредінгера має важливе значення для подальших досліджень у фізиці твердого тіла, нанотехнологіях та інших галузях науки і техніки.

### Задачі для самостійного розв'язку:

- Розв'язок рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора:** Розв'яжіть стаціонарне рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора з потенціальною енергією  $U(x) = \frac{1}{2} k_x^2 x^2$ . Визначте власні значення енергії та хвильові функції.
- Розрахунок енергетичних рівнів для електрона у воднеподібній системі:** Використовуючи стаціонарне рівняння Шредінгера, знайдіть енергетичні рівні для електрона у воднеподібній системі з потенціальною енергією  $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ .
- Граничні умови для хвильової функції:** Поясніть, як застосування граничних умов неперервності, гладкості, однозначності, лімітованості та нормованості впливає на розв'язки рівняння Шредінгера для потенційної ями кінцевої глибини.
- Аналіз розв'язків для вільної частинки:** Розв'яжіть рівняння Шредінгера для вільної частинки і поясніть фізичний зміст отриманих розв'язків. Як ці розв'язки змінюються при введенні потенціальної енергії?
- Розрахунок хвильових функцій для заданого потенціалу:** Визначте хвильові функції для частинки, що знаходиться в потенціальній ямі з нескінченно високими стінками, розташованій між  $x = 0$  і  $x = L$ . Визначте дискретні енергетичні рівні для цієї системи.
- Практичне застосування рівняння Шредінгера:** Обговоріть застосування рівняння Шредінгера для опису квантових точок у нанотехнологіях. Як розв'язки цього рівняння використовуються для визначення оптичних і електронних властивостей квантових точок?

### Контрольні питання:

- Що таке хвильова функція і який фізичний зміст має квадрат її амплітуди?
- Поясніть, чому не існує вільних мікрооб'єктів і як це впливає на опис їх руху.
- Як залежить хвильова функція мікрооб'єкта від його потенціальної енергії?
- Що таке рівняння Шредінгера і які його основні компоненти?
- Які умови накладаються на хвильову функцію для існування розв'язків рівняння Шредінгера?
- Поясніть принципи розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора.
- Як визначається координатна і часова частини хвильової функції в стаціонарному полі?

8. Які фізичні системи можуть бути описані стаціонарним рівнянням Шредінгера?

## 2. РУХ МІКРООБ'ЄКТА У ОДНОВИМІРНІЙ НЕСКІНЧЕННО ГЛИБОКІЙ ПОТЕНЦІАЛЬНІЙ ЯМІ

Дослідження руху мікрооб'єкта у одновимірній нескінченно глибокій потенціальній ямі є важливим для розуміння квантово-механічних властивостей частинок. У такій ямі потенціальна енергія частинки є значно меншою в межах ями, ніж за її межами. Метою цієї роботи є розрахунок хвильової функції (ХФ) та енергетичних рівнів частинки у потенціальній ямі, а також аналіз впливу розмірів ями на дискретизацію енергетичних рівнів.

Для досягнення цієї мети розглянемо наступні задачі:

1. Знайти значення хвильової функції у нескінченно глибокій потенціальній ямі та забезпечити безперервність ХФ на границях ями.
2. Визначити енергетичні рівні частинки в ямі та їх залежність від ширини ями.
3. Розрахувати різницю між першими двома енергетичними станами електрона у потенціальних ямах різної ширини (1 см та 10 ангстрем).
4. Побудувати графіки хвильової функції та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у потенціальній ямі для перших чотирьох станів.

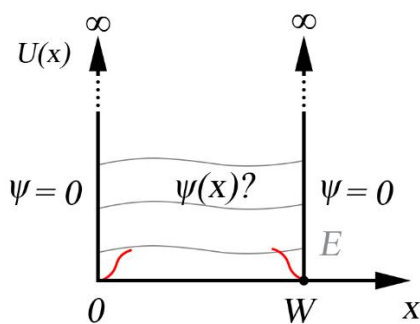
Перш за все з'ясуємо:

**Що таке потенціальна яма?** Це скінченна область простору, в якій потенціальна енергія частинки менша ніж за її межами.

**Що таке одновимірна яма?** Це модель, де частинка обмежена у русі лише по одному виміру.

Вивчення такої системи дозволяє зрозуміти, як квантові ефекти впливають на енергетичні рівні частинки та її хвильову функцію.

Розглянемо приклад: Частинка знаходиться у нескінченно глибокій потенціальній ямі. ХФ за межами ями не існує [2]. Треба знайти значення ХФ у потенціальній ямі та зшити розв'язки на границях потенціальної ями, див. рис. 1.



Потенціальна енергія

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq W \\ \infty, & x > W \end{cases}$$

Хвильова функція

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ ?, & 0 \leq x \leq W \\ 0, & x > W \end{cases}$$

**λ – «зшити» рішення**

Рисунок 1 – Частинка у нескінченно глибокій потенціальній ямі.

Запишемо стаціонарне РШ у загальному вигляді:

$$\nabla^2 \Psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \Psi(r) = 0$$

Ми маємо справу з одновимірною задачею –  $\psi = f(x)$ .

Тоді  $\nabla^2\Psi = \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \Psi''$ , а РШ прийме такий вигляд:

$$\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - 0]\Psi = 0$$

$$\Psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0.$$

Введемо заміну змінних  $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ , (1)

отримаємо рівняння типу:  $\Psi'' + k^2\Psi = 0$ .

Знайдемо розв'язок отриманого рівняння, для цього складаємо характеристичне рівняння:

$$\lambda^2 + a^2 = 0; \lambda_{1,2} = \pm ia.$$

Розв'язок рівняння  $\psi(x) = C_1 \cdot e^{iax} + C_2 \cdot e^{-iax}$ , де  $C_1$  і  $C_2$  – сталі.

Із формули Ейлера  $e^{\pm iax} = \cos(ax) \pm i \sin(ax)$ , тоді

$$\psi(x) = C_1 \cdot e^{iax} + C_2 \cdot e^{-iax} = C_1 \sin(ax) + C_2 \cos(ax) = E_{\cos}^{\sin}(ax + \varphi_0)$$

Для випадку  $\Psi'' - k^2\Psi = 0$ ;  $\lambda_{1,2} = \pm a$ .

Із формули Ейлера  $e^{\pm iax} = \text{ch}(ax) \pm \text{sh}(ax)$

$$\psi(x) = C_1 \cdot e^{iax} + C_2 \cdot e^{-iax} = E_{\text{ch}}^{\text{sh}}(ax + \varphi_0)$$

Для  $2D$  структур електрони затиснуті у нескінченно глибокій потенціальній ямі за одним виміром, за двома іншими вимірами електрон рухається вільно.

З рис. 1 видно, що за координатою  $x$  на границях ями  $x = 0$  та  $x = W$  ХФ дорівнює нулю ( $\psi = 0$ ), тому, для зручності, за розв'язок ХФ приймемо наступний вираз  $E \sin(ax)$  або  $E \cos(ax + \varphi_0)$ .

$$\psi(x) = C \cos(kx + \varphi_0).$$

Знайдемо сталі  $C$ ,  $k$ ,  $\varphi_0$ .

Пред'являємо до ХФ стандартні вимоги:

2) **Неперервність:** ХФ повинна бути неперервною у точках  $x = 0$   $\psi(0) = 0$  і  $x = W$ ,  $\psi(W) = 0$ . Треба «зшити» ХФ на границях (див. рис. 1).

У точці  $x = 0$   $\psi(0) = C \cos(k \cdot 0 + \varphi_0) = 0$ .

ХФ буде дорівнювати нулю або коли стала  $C$  буде дорівнювати нулю, або коли  $\cos(k \cdot 0 + \varphi_0)$  буде дорівнювати нулю.

$C \neq 0$ , бо якщо  $C = 0$ , тоді  $\psi \equiv 0$ .

Тоді  $\cos(\varphi_0) = 0$ , а  $\cos(\varphi_0) = 0$  коли  $\varphi_0 = \frac{\pi}{2}$ ;  $-\frac{\pi}{2}$ .

Нехай  $\varphi_0 = -\frac{\pi}{2}$ , тоді  $\psi(0) = C \cos\left(kx - \frac{\pi}{2}\right) = C \cos\left(\frac{\pi}{2} - kx\right) = C \sin(kx)$ .

Отримали  $\psi(x) = C \sin(kx)$

У точці  $x = W$   $\psi(W) = C \sin(kW) = 0$ .

Знов  $C \neq 0$ , тоді  $\sin(kW) = 0$ , коли  $kW = \pi n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$

З останнього виразу:  $k = \frac{\pi n}{W}$

(2)

Підставивши вираз (2) у вираз (1), отримаємо  $\frac{\pi^2 n^2}{W^2} = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$ .

Знайдемо вираз для  $E_n$ :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 \cdot n^2,$$

де  $n$  – квантове число, нумерує стани в ямі.

Енергія частинки набуває певних дискретних значень. Зазвичай кажуть, що частинка знаходиться у певних енергетичних станах.

Розглянемо дві задачі:

ЗАДАЧА 1 Електрон знаходиться в ямі шириною 1 см.

Знайти різницю між першими двома станами електрона – ?

Дано:	$\Delta E_{12} = E_2 - E_1.$
$W = 1$ см;	$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 \cdot n^2$
$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг;	
$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ (Дж·с)	
$\Delta E_{12} - ?$	$E_1 = \frac{(1,05)^2 10^{-68} (\text{Дж}\cdot\text{с})^2 \cdot (3,14)^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (10^{-2})^2 \text{ м}^2} = 6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} =$ $= \frac{6 \cdot 10^{-34}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \text{ еВ} \approx 3,7 \cdot 10^{-15} \text{ еВ}.$

$$E_2 = 4 \cdot E_1 = 4 \cdot 3,7 \cdot 10^{-15} \text{ еВ}$$

$$\Delta E_{12} = E_2 - E_1 = 4 \cdot E_1 - E_1 = 3 \cdot E_1 = 4 \cdot 3,7 \cdot 10^{-15} \text{ еВ} \approx 10^{-14} \text{ еВ}.$$

Висновок: Різницю енергій ми сприймаємо НЕПЕРЕРВНО (квазі), так як відстань між рівнями складає  $10^{-14}$  еВ. У макросвіті все сприймається НЕПЕРЕРВНО!

ЗАДАЧА 2 Електрон знаходиться в ямі шириною 10 Å

Знайти різницю між першими двома станами електрона – ?

Дано:	$\Delta E_{12} = E_2 - E_1.$
-------	------------------------------

$$W = 10 \text{ \AA} = 10^{-9} \text{ м} = 10^{-7} \text{ см}$$

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг};$$

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ (Дж}\cdot\text{с)}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{W} \right)^2 \cdot n^2$$

$\Delta E_{12} = ?$

$$E_1 = \frac{(1,05)^2 10^{-68} (\text{Дж}\cdot\text{с})^2 \cdot (3,14)^2}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot (10^{-9})^2 \text{ м}^2} \approx 6 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} =$$

$$= \frac{6 \cdot 10^{-18}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \text{ eВ} \approx 1 \text{ eВ}.$$

**Висновок:** Як тільки мікрооб'єкт «затиснутий» у потенціальній ямі його енергетичні рівні стають дискретними, а енергія в ямі квантується.

Побудуємо залежності ХФ ( $\psi(x)$ ) та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у даній точці простору  $|\psi(x)|^2$  для двох цих прикладів для перших чотирьох станів.

На рис. 2 наведено графіки ХФ (ліворуч) та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у даній точці простору (праворуч) для потенціальної ями розміром 1 см (задача 1).

3) Щоб знайти параметр  $C$ , необхідно застосувати умови **нормування** ХФ:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2(x) dx = 1$$

десь у просторі електрон обов'язково знаходиться.

$$\psi_n(x) = C \sin\left(\frac{\pi n x}{W}\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

$$|\psi_n(x)|^2$$

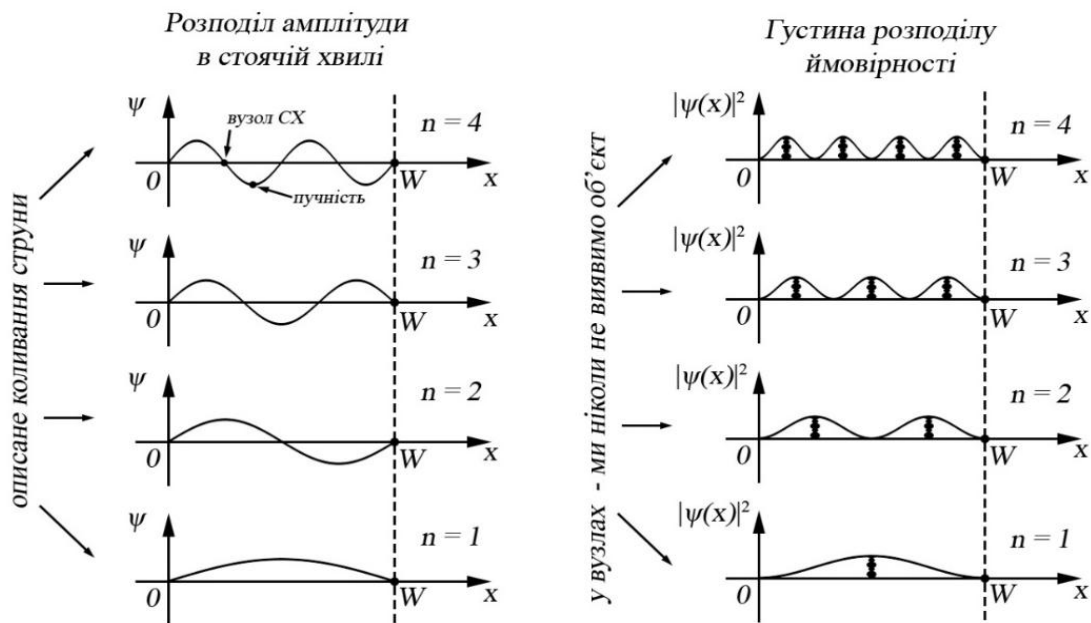
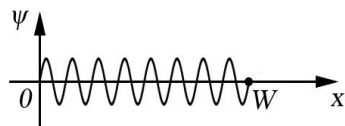
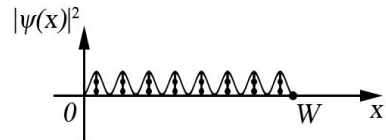


Рисунок 2 – Розподіл амплітуд ХФ та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у потенціальній ямі шириною 1 см.

Побудуємо також залежності для потенціальної ями шириною  $10 \text{ \AA}$  (див. рис. 3).



більша кількість періодів



спектр стане неперервним як ми і звикли в макросвіті

При  $n \rightarrow \infty$  нам буде здаватися, що  $\bar{e}$  з рівною ймовірністю може знаходитися в будь-якій точці простору з рівною ймовірністю. З ростом розмірів квантова механіка переходить в класичну механіку.

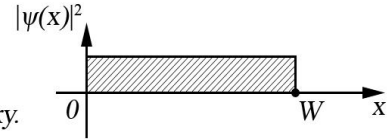


Рисунок 3 – Розподіл амплітуд ХФ та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у потенціальній ямі шириною  $10 \text{ \AA}$  (задача 2).

Ширина ями  $W$ , інтеграл прийме вид:

$$\int_0^W \psi^2(x) dx = \int_0^W C^2 \sin^2(kx) dx.$$

Інтеграл  $\int_0^W \sin^2(kx) dx$  – табличний і дорівнює  $W/2$ .

Підставивши це значення, отримаємо:

$$\int_0^W C^2 \sin^2(kx) dx = C^2 \int_0^W \sin^2(kx) dx = \frac{C^2 W}{2}.$$

Звідси  $C = \sqrt{\frac{2}{W}}$ .

ХФ в ямі:  $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{\pi n x}{W}\right), n = 1, 2, 3, \dots$

Ми розглянули яму тільки вздовж одного напрямку. У ній формується так званий двовимірний електронний газ (2D).

Однак дані обчислення можна поширити також для двох та трьох напрямків, якщо у них будуть існувати однотипні прямокутні ями зі стінками нескінченної висоти. У першому випадку отримуємо **одновимірний електронний газ (1D)**, а у другому – **нульвимірний електронний газ (0D)**.

А проте ширина ями у кожному напрямку квантування може бути різною.

Для 1D газу, виходячи з формули (2) можна записати:

$k_x^n = \frac{\pi n}{W_x}; k_y^l = \frac{\pi l}{W_y}$ , де  $n, l$  – квантові числа ( $= 1, 2, 3, \dots$ )

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W_x}\right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W_y}\right)^2 l^2;$$

$$\Psi_{nl} = \sqrt{\frac{2}{W_x}} \sqrt{\frac{2}{W_y}} \sin\left(\frac{\pi nx}{W_x}\right) \sin\left(\frac{\pi ly}{W_y}\right), \quad \text{де } n, l = 1, 2, 3, \dots$$

Для 0D газу ці вирази набудуть наступного вигляду, с урахуванням трьох напрямків:

$$k_x^n = \frac{\pi n}{W_x}; k_y^l = \frac{\pi l}{W_y}; k_z^p = \frac{\pi p}{W_z}, \quad \text{де } n, l, p - \text{квантовані числа } (= 1, 2, 3, \dots)$$

$$E_{nlp} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W_x}\right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W_y}\right)^2 l^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W_z}\right)^2 p^2;$$

$$\Psi_{nlp} = \sqrt{\frac{2}{W_x}} \sqrt{\frac{2}{W_y}} \sqrt{\frac{2}{W_z}} \sin\left(\frac{\pi nx}{W_x}\right) \sin\left(\frac{\pi ly}{W_y}\right) \sin\left(\frac{\pi pz}{W_z}\right), \quad \text{де } n, l, p = 1, 2, 3, \dots \text{ незалежні}$$

Для 1D- та 0D- газу енергетичні спектри стануть достатньо складними.

Для різних величин  $W_x$ ,  $W_y$ ,  $W_z$  індекси у визначенні рівня квантування стануть нерівноправні, і, наприклад, рівень  $E_{123} \neq E_{321}$ .

Результати дослідження показали, що у нескінченно глибокій потенціальній ямі хвильова функція частинки набуває синусоїдальної форми з врахуванням умов на границях ями. Енергетичні рівні частинки в такій ямі є дискретними і визначаються квантовим числом. Розрахунки для електрона в ямі шириною 1 см показали, що різниця між першими двома енергетичними станами становить приблизно  $10^{-14}$  еВ, що є дуже малою величиною і сприймається як неперервна у макросвіті. Для ями шириною 10 ангстрем різниця між першими двома станами становить близько 1 еВ, що значно більше і показує дискретність енергетичних рівнів.

Графіки хвильової функції та густини розподілу ймовірності виявлення частинки у потенціальній ямі підтвердили теоретичні передбачення про стоячі хвилі і дискретні енергетичні рівні. Виявлено, що зменшення розмірів ями призводить до збільшення різниці між енергетичними рівнями, що свідчить про посилення квантових ефектів у мікросвіті.

### Завдання для самостійного опрацювання:

- Розрахунок енергетичних рівнів для інших ширин потенціальної ями.** Повторіть розрахунки, наведені у прикладах, для ями шириною 0.5 см та 5 ангстрем. Порівняйте отримані результати з наведеними у тексті.
- Аналіз поведінки хвильової функції.** Побудуйте графіки хвильової функції для різних квантових чисел ( $n = 1, 2, 3, 4$ ) у потенціальній ямі шириною 1 см. Проаналізуйте зміну форми ХФ зі збільшенням квантового числа.
- Вплив зміни маси частинки.** Дослідіть, як змінюються енергетичні рівні у нескінченно глибокій потенціальній ямі при зміні маси частинки. Розрахуйте енергетичні рівні для частинки масою в 2 рази більшою та в 2 рази меншою за масу електрона.
- Розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера для інших потенціальних ям.** Розгляньте випадок скінченної потенціальної ями та порівняйте розв'язки для нескінченної та скінченної ям однакової ширини.

### Контрольні питання:

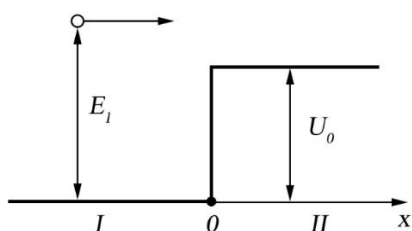
- Що таке хвильова функція і який фізичний зміст має квадрат її модуля?

2. Як записується рівняння Шредінгера для одновимірної потенціальної ями?
3. Які умови накладаються на хвильову функцію для знаходження розв'язку рівняння Шредінгера?
4. Що таке квантові числа і як вони впливають на енергетичні рівні частинки в потенціальній ямі?
5. Чому енергетичні рівні в потенціальній ямі дискретні?

### 3. РУХ МІКРООБ'ЄКТА НАД ЯМАМИ І БАР'ЄРАМИ

Рух мікрооб'єктів через потенційні ями та бар'єри є однією з важливих проблем квантової механіки, яка знаходить застосування в багатьох галузях науки та техніки. Це дослідження спрямоване на аналіз поведінки мікрочастинок, коли вони взаємодіють з потенційними перешкодами, що мають різну енергетичну висоту. Використовуючи хвильову теорію, ми можемо визначити коефіцієнти відбиття та проходження частинок, а також зрозуміти фізичні процеси, що відбуваються на квантовому рівні.

Дослідимо рух мікрооб'єкта над бар'єром скінченної висоти (див. рис. 4). Досліджувану структуру розб'ємо на дві частини: I і II, запишемо значення хвильових векторів для цих двох областей:



$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

Рисунок 4 – Енергетична діаграма.

Хвильові функції набудуть наступного вигляду:

$$I \rightarrow \Psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) \quad (4)$$

$$II \rightarrow \Psi_2(x) = A_2 \exp(ik_2x) \quad (5)$$

де  $\Psi_1$  – суперпозиція падаючої  $\Psi_1^+$  і відбитої  $\Psi_1^-$  хвилі де Бройля, а  $\Psi_2$  – складається тільки з падаючої хвилі  $\Psi_2^+$ .

Тоді,  $A_1$  – амплітуда хвилі, яка поширюється від джерела до бар'єра;

$B_1$  – амплітуда хвилі, яка відбилася від джерела до бар'єра;

$A_2$  – амплітуда хвилі, яка пройшла і поширюється над сходиною.

**У МАКРОСВІТІ:** якщо  $E_1 < U_2$  – мікрооб'єкт відбився б від сходинок;

якщо  $E_1 > U_2$  – мікрооб'єкт вільно пролетів би над нею.

**У МІКРОСВІТІ:** Через наявність хвильових властивостей у мікрооб'єкту аналогом його механічного руху над сходиною є густина потоку ймовірності  $j_i = |\Psi_i|^2$ .

Тоді,  $|\Psi_1^+|^2$  – еквівалент кількості мікрочастинок, що підлетіли до сходинок;

$|\Psi_1^-|^2$  – еквівалент кількості мікрочастинок, що відбилися від сходинок;

$|\Psi_2^+|^2$  – еквівалент кількості мікрочастинок, що пролетіли над сходиною.

Фізичний інтерес являють коефіцієнти відбивання  $R$  та проходження  $D$ , які визначаються відношенням щільності потоків частинок, які пройшли і які відбилися, до щільності потоку частинок, які падають.

$D = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \left( \frac{j_2^+}{j_1^+} \right) = \frac{|\Psi_2^+|^2}{|\Psi_1^+|^2}$  – коефіцієнт проходження мікрочастинок з енергією  $E_1$  потенційний бар'єр  $U_2$ ;

$R = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \left( \frac{j_1^-}{j_1^+} \right) = \frac{|\Psi_1^-|^2}{|\Psi_1^+|^2}$  – коефіцієнт відбиття мікрочастинок з енергією  $E_1$  від потенційного бар'єру

$U_2$ .

**ВОЧЕВИДЬ:** У випадку, коли  $|\Psi_1^-|^2$  буде дорівнювати 0, хвильовими властивостями мікрочастинок можна знехтувати і розглядати їх як корпускули.

У квантовій механіці: щільність потоку ймовірності хвилі описується співвідношенням:  $j_i =$

$$|\Psi_i|^2 = \frac{i\hbar}{m} \left( \Psi_i \frac{d\Psi_i^*}{dx} - \Psi_i^* \frac{d\Psi_i}{dx} \right).$$

Отже,

$$D = \frac{|\Psi_2^+|^2}{|\Psi_1^+|^2} = \frac{\Psi_2^+ \frac{d\Psi_2^{+*}}{dx} - \Psi_2^{+*} \frac{d\Psi_2^+}{dx}}{\Psi_1^+ \frac{d\Psi_1^{+*}}{dx} - \Psi_1^{+*} \frac{d\Psi_1^+}{dx}}, \quad (6)$$

а

$$R = \frac{|\Psi_1^-|^2}{|\Psi_1^+|^2} = \frac{\Psi_1^- \frac{d\Psi_1^{-*}}{dx} - \Psi_1^{-*} \frac{d\Psi_1^-}{dx}}{\Psi_1^+ \frac{d\Psi_1^{+*}}{dx} - \Psi_1^{+*} \frac{d\Psi_1^+}{dx}}. \quad (7)$$

Розглянемо умови коли  $R = 0$ , коефіцієнт відбиття буде дорівнювати нулю, коли чисельник дробу буде дорівнювати нулю ( $|\Psi_1^-|^2 = 0$ ). Це можливо коли  $\Psi_1^- \frac{d\Psi_1^{-*}}{dx} = \Psi_1^{-*} \frac{d\Psi_1^-}{dx}$ .

Підставимо (3) і (4) у вирази (5) і (6):

$$D = \frac{A_2 \exp(ik_2x) \frac{d(A_2 \exp(-ik_2x))}{dx} - A_2 \exp(-ik_2x) \frac{d(A_2 \exp(ik_2x))}{dx}}{A_1 \exp(ik_1x) \frac{d(A_1 \exp(-ik_1x))}{dx} - A_1 \exp(-ik_1x) \frac{d(A_1 \exp(ik_1x))}{dx}}$$

$$R = \frac{B_1 \exp(-ik_1x) \frac{d(B_1 \exp(ik_1x))}{dx} - B_1 \exp(ik_1x) \frac{d(B_1 \exp(-ik_1x))}{dx}}{A_1 \exp(ik_1x) \frac{d(A_1 \exp(-ik_1x))}{dx} - A_1 \exp(-ik_1x) \frac{d(A_1 \exp(ik_1x))}{dx}}$$

Візьмемо перші похідні, враховуючи, що  $\frac{d(\exp(\alpha x))}{dx} = \alpha \cdot \exp(\alpha x)$ ;

$$\frac{d(\exp(-\alpha x))}{dx} = -\alpha \cdot \exp(\alpha x);$$

$$\exp(\alpha x) \cdot \exp(-\alpha x) = 1;$$

$$(i)^2 = -1.$$

$$D = \frac{A_2 \exp(ik_2x) \cdot (-ik_2) A_2 \exp(-ik_2x) - A_2 \exp(-ik_2x) \cdot (ik_2) A_2 \exp(ik_2x)}{A_1 \exp(ik_1x) \cdot (-ik_1) A_1 \exp(-ik_1x) - A_1 \exp(-ik_1x) \cdot (ik_1) A_1 \exp(ik_1x)} = \frac{-2A_2^2 k_2 i}{-2A_1^2 k_1 i} = \frac{k_2}{k_1} \cdot \left( \frac{A_2}{A_1} \right)^2. \quad (8)$$

$$R = \frac{B_1 \exp(-ik_1 x) \cdot (ik_1) B_1 \exp(-ik_1 x) - B_1 \exp(ik_1 x) \cdot (-ik_1) B_1 \exp(-ik_1 x)}{A_1 \exp(ik_1 x) \cdot (-ik_1) A_1 \exp(-ik_1 x) - A_1 \exp(-ik_1 x) \cdot (ik_1) A_1 \exp(ik_1 x)} = \frac{-2B_1^2 k_1 \cdot i}{-2A_1^2 k_1 \cdot i} = \left(\frac{B_1}{A_1}\right)^2. \quad (9)$$

Точні значення амплітуд  $A_1$ ,  $B_1$  і  $A_2$  можна знайти зі спеціальних умов, які накладаються на ХФ у кожному певному випадку. Зазвичай ці умови пов'язані з граничними умовами або із законом збереження енергії:

1) граничні умови:  $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$ ;

2) закон збереження енергії електронного потоку:  $|\Psi_1^+|^2 = |\Psi_1^-|^2 + |\Psi_2^+|^2$

«число електронів, які долетіли до сходинок = число електронів відбитих від неї + число електронів, що пройшли над нею».

Складемо систему рівнянь:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ -2A_1^2 ik_1 = -2B_1^2 ik_1 + (-2A_2^2 ik_2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ A_1^2 k_1 = B_1^2 k_1 + A_2^2 k_2 \end{cases}$$

Маємо два рівняння і три невідомих. Щоб розв'язати таке рівняння треба, наприклад,  $A_1$  вибрати в якості параметра.

Тоді отримаємо наступне:

$$A_1^2 k_1 = B_1^2 k_1 + (A_1 + B_1)^2 k_2.$$

$$A_1^2 k_1 - B_1^2 k_1 - A_1^2 k_2 - 2A_1 B_1 k_2 - B_1^2 k_2 = 0.$$

$$(k_1 + k_2) B_1^2 + 2k_2 A_1 B_1 - (k_1 - k_2) A_1^2 = 0.$$

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{-2k_2 A_1 + \sqrt{4A_1^2 k_2^2 + 4(k_1 + k_2)(k_1 - k_2) A_1^2}}{2(k_1 + k_2)} = \frac{-2k_2 A_1 + \sqrt{4k_2^2 A_1^2 + 4k_1^2 A_1^2 - 4k_2^2 A_1^2}}{2(k_1 + k_2)} = \\ &= \frac{-2k_2 A_1 + 2k_1 A_1}{2(k_1 + k_2)} = \frac{A_1(k_1 - k_2)}{k_1 + k_2}. \end{aligned}$$

Підставляємо отриманий вираз у перше рівняння:

$$A_1 + \frac{A_1(k_1 - k_2)}{k_1 + k_2} = A_2, \text{ звідси}$$

$$A_2 = \frac{A_1(k_1 - k_2) + A_1(k_1 + k_2)}{k_1 + k_2} = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2}.$$

$$\text{Тоді отримуємо } \frac{A_2}{A_1} = \frac{B_1}{A_1}, \text{ а } D = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \text{ і } R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}.$$

Отже  $R = 0$  коли  $k_1 = k_2$ , це виконується якщо сходинок немає. Якщо сходинок існує, хоча б найменшої висоти, ймовірність того, що електрон може від неї відбитися, відмінна від нуля.

Підставимо у вирази для коефіцієнтів відбиття та проходження відповідні вирази для ХВ  $k_1$  і  $k_2$ :

$$\begin{aligned}
D &= \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4 \frac{\sqrt{2mE}\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}}{\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\right)^2} = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{(E-U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{(E-U_0)})^2} = \\
&= \left| \frac{3}{3} \frac{\sqrt{U_0}}{\alpha = \frac{E}{U_0}} \right| = \frac{4 \sqrt{\frac{E}{U_0}} \sqrt{\frac{E-U_0}{U_0}}}{\left(\sqrt{\frac{E}{U_0}} + \sqrt{\frac{E-U_0}{U_0}}\right)^2} = \frac{4\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1}}{(\sqrt{\alpha} + \sqrt{\alpha-1})^2} = \\
&= \left| \sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1} \right| = \frac{4}{\frac{(\sqrt{\alpha})^2}{\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1}} + \frac{(\sqrt{\alpha-1})^2}{\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1}} + 2\frac{\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1}}{\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha-1}}} = \frac{4}{\sqrt{\alpha/\alpha-1} + 2 + \sqrt{\alpha-1/\alpha}} \\
R &= \frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\right)^2}{\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}\right)^2} = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{(E-U_0)})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{(E-U_0)})^2} \\
&= \frac{(\sqrt{E})^2 + (\sqrt{(E-U_0)})^2 - 2\sqrt{E}\sqrt{(E-U_0)}}{(\sqrt{E})^2 + (\sqrt{(E-U_0)})^2 + 2\sqrt{E}\sqrt{(E-U_0)}} = \\
&= \left| : U_0 \right| = \frac{(\sqrt{\alpha})^2 + (\sqrt{(\alpha-1)})^2 - 2\sqrt{\alpha}\sqrt{(\alpha-1)}}{(\sqrt{\alpha})^2 + (\sqrt{(\alpha-1)})^2 + 2\sqrt{\alpha}\sqrt{(\alpha-1)}} = \frac{(\sqrt{\alpha}-\sqrt{\alpha-1})^2}{(\sqrt{\alpha}+\sqrt{\alpha-1})^2} = (\sqrt{\alpha} - \sqrt{\alpha-1})^4.
\end{aligned}$$

Отримані результати сильно відрізняються від класичних. Згідно із законами класичної механіки частинка, що має енергію  $E > U_0$ , завжди проникає в область 2 (за умови повної втрати кінетичної енергії у разі  $E = U_0$ ) [3].

Згідно із законами класичної механіки за умови  $E > U_0$  є скінченна ймовірність відбиття частинки від потенційного бар'єру, так що в області I є зустрічний потік відбитих частинок  $j_1^{(-)} = j_1^{(+)} - j_2^{(+)}$ , причому відбиття буде повне, якщо  $E = U_0$ . У будь-якому випадку  $D + R = 1$ .

Ймовірність проходження та відбиття визначається співвідношенням:  $E / U_0$ . Зміна руху призводить до зміни фази відбитої хвилі.

Коли  $E < U_0$ , характер розв'язку ХР радикально змінюється, а саме стає уявним і загальний розв'язок ХР буде не комбінацією двох хвиль, що поширюються у протилежних напрямках, а сукупністю двох монотонних функцій.

$$\Psi_2(x) = C_1 \exp(\beta x) + C_2 \exp(-\beta x), \text{ де } \beta = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}.$$

$$\text{Коли } E < U_0, \Psi_2(x) = C_2 \exp(-\beta x)$$

«Зшиваючи» ХФ і їх похідні при  $x = 0$ , отримаємо:

$$B_1 = \frac{A_1(k_1 - i\beta)}{k_1 + i\beta}, C_2 = \frac{2k_1 A_1}{k_1 + i\beta}$$

У випадку  $E < U_0$  амплітуди  $B_1$  і  $C_2$  – комплексні числа, а коефіцієнт відбиття дорівнює одиниці

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{k_1 - i\beta}{k_1 + i\beta} \right|^2 = 1$$

У класичній механіці: У випадку  $E < U_0$  всі частинки відбиваються від потенціальної сходи так, що в області 2 потік частинок відсутній [4].

Не дивлячись на це, в області 2 ХФ відмінна від нуля, тобто є певна, хоча і мала ймовірність проникнення частинки всередину потенційного бар'єру

$$|\Psi_2^-|^2 = |C_2|^2 \exp(-2\beta x) = 4\alpha \exp(-2\beta x) \cdot |A_1|^2 \neq 0.$$

Частинка як би проходить всередину потенціального бар'єру і повертається назад (потік частинок в області 2 відсутній).

А проте між падаючою та відбито хвилями з'являється фазовий зсув  $\Delta\varphi = \arctg\left(\frac{2k\beta}{k^2 - \beta^2}\right)$

Ефективна глибина проникнення під бар'єр, на якій ймовірність виявлення частинки ще помітно відмінна від нуля, має порядок величини  $1/\beta$

Залежність коефіцієнта  $R$  від відношення  $E / U_0$  наведена на рис. 5.

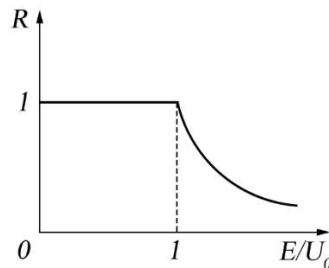


Рисунок 5 – Енергетична діаграма.

У підсумку, аналіз руху мікрооб'єктів над потенційними ямами і бар'єрами показав важливість квантово-механічних ефектів, які значно відрізняються від класичних уявлень. Результати досліджень підтверджують, що хвильові властивості мікрочастинок значно впливають на їхню поведінку при взаємодії з потенційними перешкодами. Отримані коефіцієнти відбиття та проходження дозволяють точніше передбачити результати експериментів і можуть бути використані для розробки нових технологій в галузі нанofізики та квантових комп'ютерів.

#### Завдання для самостійного опрацювання:

- Задача на розрахунок хвильових функцій:** Розрахуйте хвильові функції для мікрочастинки в областях I та II, якщо енергія частинки  $E$  дорівнює 10 еВ, а висота потенційного бар'єру  $U_0$  становить 15 еВ. Запишіть аналітичні вирази для хвильових функцій в обох областях.
- Задача на визначення коефіцієнтів відбиття та проходження:** Визначте коефіцієнти відбиття  $R$  та проходження  $D$  для мікрочастинки з енергією  $E = 8$  еВ, яка взаємодіє з потенційним бар'єром висотою  $U_0 = 10$  еВ.
- Задача на фазовий зсув:** Обчисліть фазовий зсув між падаючою та відбитою хвилями для мікрочастинки з енергією  $E = 12$  еВ, яка взаємодіє з потенційним бар'єром висотою  $U_0 = 15$  еВ.
- Задача на ефективну глибину проникнення:** Визначте ефективну глибину проникнення мікрочастинки під потенційний бар'єр, якщо енергія частинки  $E$  дорівнює 5 еВ, а висота бар'єру  $U_0$  становить 8 еВ.

5. **Задача на залежність коефіцієнтів від енергії частинки:** Побудуйте графік залежності коефіцієнтів відбиття  $R$  та проходження  $D$  від енергії частинки  $E$  для потенційного бар'єру з висотою  $U_0 = 10$  еВ. На основі графіка поясніть, як змінюються ймовірності відбиття та проходження частинки при збільшенні її енергії.
6. **Задача на збереження енергії:** Доведіть, що закон збереження енергії виконується для системи мікрочастинок, яка взаємодіє з потенційним бар'єром, використовуючи рівняння  $\Psi^{1+} = \Psi^{1-} + \Psi^{2+}$ .

**Контрольні питання:**

1. Що таке хвильовий вектор і як він визначається для різних областей потенційної ями?
2. Як виглядають хвильові функції для мікрочастинок у двох різних областях потенційної ями?
3. Що таке коефіцієнти відбиття та проходження, і як вони визначаються для мікрочастинок?
4. Поясніть умови, за яких коефіцієнт відбиття дорівнює нулю.
5. Яка різниця між поведінкою мікрочастинок у макросвіті та мікросвіті при взаємодії з потенційною ямою?
6. Як змінюється хвильова функція мікрочастинок при енергії, меншій за потенційний бар'єр?
7. Що означає фазовий зсув між падаючою та відбитою хвилями, і як він визначається?
8. Як змінюється ефективна глибина проникнення частинки під потенційний бар'єр?

## 4. ПОТЕНЦІЙНИЙ БАР'ЄР СКІНЧЕНОЇ ШИРИНИ

У цьому розділі ми дослідимо рух мікрочастинок через потенційний бар'єр скінченної ширини та висоти. Це питання є ключовим для розуміння таких явищ, як тунелювання, яке має велике значення в сучасній нанотехнології, електроніці та інших галузях науки і техніки.

Основною метою цього розділу є визначення коефіцієнтів відбиття та проходження мікрочастинок через потенційний бар'єр, аналіз хвильових функцій у різних областях, а також вивчення умов, за яких відбувається повне або часткове проходження частинок через бар'єр. Ми розглянемо як класичні підходи, так і квантово-механічні аспекти руху частинок, що дозволить глибше зрозуміти фізичну природу цих процесів.

У реальних фізичних умовах ми завжди маємо справу з бар'єром скінченної ширини [5]. Ми знайдемо коефіцієнти відбиття та проходження частинки через прямокутний потенційний бар'єр шириною  $W$  і висотою  $U_1$ , за умови, що енергія частинки  $U_2 < E < U_1$  (див. рис. 6).

Досліджувану структуру розбиваємо на три частини. Вважається, що у третій області немає джерел частинок і центрів, які розсіюють енергію, тобто буде поширюватися тільки хвиля, що пройшла.

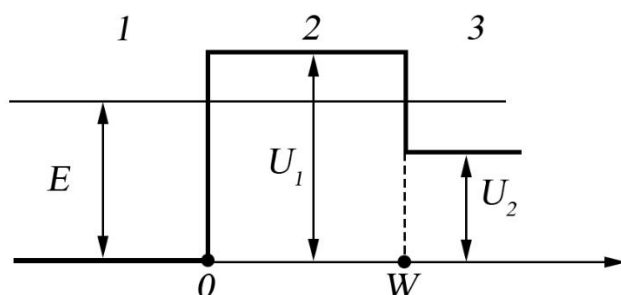


Рисунок 6 – Енергетична діаграма.

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

$$\beta = \frac{\sqrt{2m(U_1 - E)}}{\hbar}$$

$$k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - U_2)}}{\hbar}$$

Запишемо значення хвильових векторів для цих областей.

$$\text{I} \rightarrow \Psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x)$$

$$\text{II} \rightarrow \Psi_2(x) = A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x)$$

$$\text{III} \rightarrow \Psi_3(x) = A_3 \exp(ik_3x)$$

Знайдемо коефіцієнти проходження та відбиття:

$$D = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \left( \frac{j_3^+}{j_1^+} \right) \quad R = \lim_{|x| \rightarrow \infty} \left( \frac{j_1^-}{j_1^+} \right)$$

Використовуючи результати попередньої задачі (рівняння (7) і (8)) отримаємо такі вирази:  $D = \frac{k_3 \cdot |A_3|^2}{k_1 \cdot |A_1|^2}$ ;  $R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$ .

Коефіцієнти  $A_1$ ,  $A_2$  і  $B_1$  знайдемо з системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР), застосовуючи умову неперервності ХВ ті її першої похідної на межі двох областей.

За  $x = 0$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = \beta(A_2 - B_2) \end{cases}$$

За  $x = W$

$$\begin{cases} A_2 \exp(\beta W) + B_2 \exp(-\beta W) = A_3 \exp(ik_3 W) \\ \beta A_2 \exp(\beta W) - \beta B_2 \exp(-\beta W) = ik_3 A_3 \exp(ik_3 W) \end{cases}$$

Розв'язав СЛАР отримаємо:

$$D = \frac{4k_1 k_3 \beta^2}{Z} \quad R = 1 - \frac{4k_1 k_3 \beta^2}{Z} \quad (D + R = 1)?$$

$$\text{де } Z = (k_1^2 + \beta^2)(k_3^2 + \beta^2) \text{sh}(\beta W) + (k_1^2 + k_3^2)^2 \beta^2.$$

Для випадку симетричного бар'єру (див. рис. 7):  $k_1 = k_3$

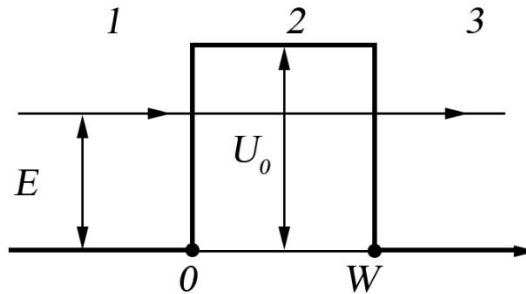


Рисунок 7 – Енергетична діаграма.

$$D = \left(1 + \frac{\text{sh}^2(\beta W)}{4\alpha(1-\alpha)}\right)^{-1},$$

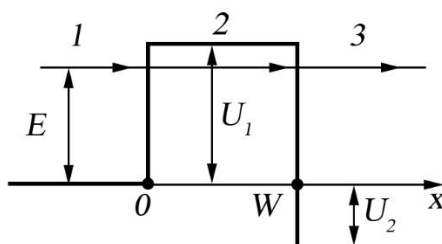
$$R = \left(1 + \frac{4\alpha(1-\alpha)}{\text{sh}^2(\beta W)}\right)^{-1},$$

де  $\alpha = E/U_0$

**ВИСНОВОК:** У разі бар'єру скінченної ширини і висоти з'являється ймовірність проходження частинок крізь потенційний бар'єр, що абсолютно неможливо у класичній теорії, так як при  $E < U_0$  формально значення кінетичної енергії стає від'ємним. Проникнення частинки з енергією  $E < U_0$  крізь потенційний бар'єр – *чисто квантово-механічний ефект*. Це явище має назву – *тунельного ефекту*.

Коефіцієнти відбиття і проходження виявляються симетричними за індексами 1 і 3. **Це означає, що проникність бар'єру однакова для потоків, що падають зліва і справа.**

У випадку бар'єру наведеного на рис. 8:



формули для  $D$  і  $R$  зміняться,  
а  $U_2$  заміниться на  $-U_2$ .

**ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНІ ЕФЕКТИ ЗА НАДБАР'ЄРНОГО ПРОХОДЖЕННЯ ЧАСТИНОК (див. рис. 9)**

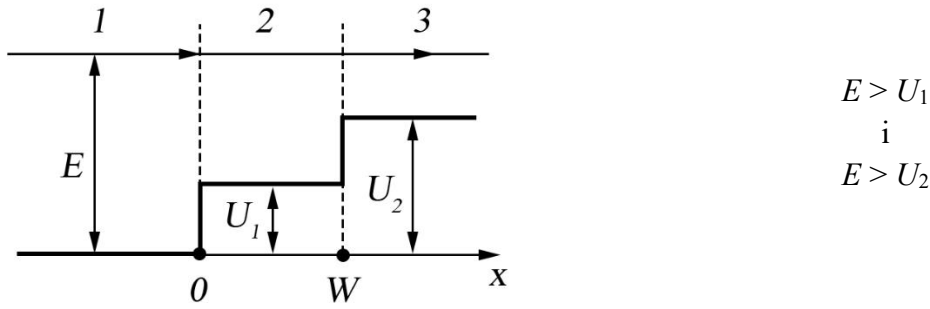


Рисунок 9 – Енергетична діаграма.

Надбар'єрне проходження частинок може слугувати одним з найпростіших прикладів прояву квантово-розмірних ефектів. Квантово-розмірні ефекти призводять до квазіперіодичної осциляції коефіцієнта проходження частинок за зміни їх енергії  $E$  [6].

Розв'язок РШ для всіх трьох областей:

$$\psi_j(x) = A_j \exp(ik_j x) + B_j \exp(-ik_j x),$$

де  $j$  – номер області;  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ;  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_1)}}{\hbar}$ ;  $k_3 = \frac{\sqrt{2m(E-U_2)}}{\hbar}$ .

Вважаючи, що частинки рухаються зліва направо за відсутності розсіювання можна отримати:

$$D = \frac{4k_1 k_2^2 k_3}{Z}; \quad R = 1 - \frac{4k_1 k_2^2 k_3}{Z};$$

де  $Z = (k_1^2 - k_2^2)(k_3^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 W) + k_2^2(k_1^2 + k_3^2)^2$ .

У випадку симетричного бар'єру, коли  $k_1 = k_3$ :

$$D = \left[ 1 + \left( U_0^2 \sin(k_2 W) \right) / 4EE_2 \right]^{-1},$$

$$R = \left[ 1 + 4EE_2 / \left( U_0^2 \sin(k_2 W) \right) \right]^{-1}.$$

**За зміни енергії частинки будуть спостерігатися осциляції коефіцієнтів проходження та відбиття.**

А проте, коли  $D = D_{\max}$ , то  $R = R_{\min}$  і навпаки.

Період осциляцій відповідає умові:  $\sin^2(k_2 W) = 0$ . Ця умова виконується коли  $k_{2,n} \cdot W = \pi n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

Тоді коефіцієнт проходження  $D$  для частинок з хвильовим вектором  $k_{2,n}$  перетворюється на одиницю. У цьому випадку для частинок з енергією  $E_{2,n} = E - U_0$  на ширині бар'єру  $W$  укладається ціле число напівхвиль де Бройля і коефіцієнт відбиття дорівнює нулю.

Квазікласично це можна трактувати як результат інтерференції хвиль, відбитих від стрибків потенціалу на межах бар'єру

$$E_{2,n} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\pi}{W}\right)^2 n^2 = V_n,$$

де  $V_n$  – енергія  $n$ -го рівня частинки, локалізована всередині потенціальної ями шириною  $W$  з нескінченно високими стінками, тобто **резонансні значення енергії  $E_{2,n}$  співпадають з енергією  $n$ -го рівня такої ями.**

За зміни енергії частинки коефіцієнт проходження ( $D$ ) осцилює. Мінімальне значення  $D = D_{\min}$  і відповідає їм значення  $E'_{2,n}$  («антирезонансні» стани) можна приблизно оцінити із умови:  $\sin^2(k_2 W) = 1$ . Ця умова виконується коли  $k_{2,n} \cdot W = \frac{\pi}{2} + \pi n = \pi n(n + 0.5)$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\text{Тоді } E'_{2,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+0.5)^2}{2mW^2}, n = 1, 2, 3, \dots, \text{ а } D = \left[1 + \frac{U_0^2}{4 \cdot E'_{2,n} \cdot (U_0 + E'_{2,n})}\right]^{-1}$$

На рис. 10 наведено залежність коефіцієнту проходження від співвідношення  $E_2/U_0$ .

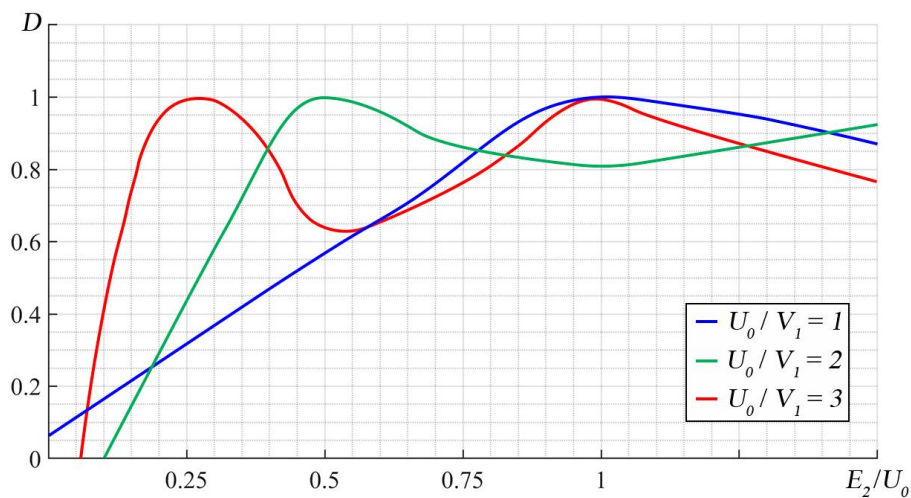


Рисунок 10 – Залежність коефіцієнту проходження від енергії частинки.

**ВИСНОВОК:** Чим більше  $n$  та  $L$ , тим більше  $D_{\min, n}$ , як наслідок осциляції менш виражені.

З іншого боку, чим більше, тим менше  $D_{\min, n}$ , як наслідок осциляції більш виражені.

В результаті аналізу руху мікрочастинок через потенційний бар'єр скінченної ширини ми прийшли до важливих висновків. Коефіцієнти відбиття та проходження є ключовими параметрами, що характеризують ймовірність взаємодії частинок з бар'єром. На основі квантово-механічних розрахунків ми показали, що навіть при енергії частинки меншій за висоту бар'єру, існує ненульова ймовірність її проходження через бар'єр, що є яскравим проявом тунельного ефекту.

Ці результати мають значне практичне значення для розробки нових технологій у галузі квантової електроніки, нанотехнологій та інших передових напрямів науки і техніки. Розуміння квантових явищ на мікрорівні дозволяє створювати пристрої з унікальними властивостями, що недоступні у класичній фізиці. Таким чином, дослідження квантово-механічних процесів є фундаментом для подальших наукових та технологічних проривів.

### Задачі для самостійного розв'язку:

- Задача на визначення хвильових функцій:** Розрахуйте хвильові функції для частинки в областях I, II та III потенційного бар'єру, якщо енергія частинки  $E = 12$  еВ, висота потенційного бар'єру  $U_1 = 15$  еВ, а ширина бар'єру  $W = 1$  нм. Запишіть аналітичні вирази для хвильових функцій в обох областях.
- Задача на розрахунок коефіцієнтів відбиття і проходження:** Визначте коефіцієнти відбиття  $R$  та проходження  $D$  для частинки з енергією  $E = 8$  еВ, яка проходить через потенційний бар'єр висотою  $U_1 = 05$  еВ і шириною  $W = 0.5$  нм. Використайте умови неперервності хвильової функції та її похідної.
- Задача на інтерференційні ефекти:** Обчисліть умови для інтерференційних ефектів при надбар'єрному проходженні частинок, якщо енергія частинки  $E = 20$  еВ, висота бар'єру  $U_1 = 15$  еВ, а ширина бар'єру  $W = 1.5$  нм. Поясніть, як ці умови впливають на коефіцієнти відбиття та проходження.
- Задача на ефективну глибину проникнення:** Визначте ефективну глибину проникнення частинки під потенційний бар'єр, якщо енергія частинки  $E = 5$  еВ, а висота бар'єру  $U_1 = 8$  еВ. Обчисліть значення глибини проникнення.
- Задача на залежність коефіцієнтів від енергії частинки:** Побудуйте графік залежності коефіцієнтів відбиття  $R$  та проходження  $D$  від енергії частинки  $E$  для потенційного бар'єру з висотою  $U_1 = 10$  еВ і шириною  $W = 1$  нм. Проаналізуйте отримані результати.
- Задача на квантово-механічні умови:** Доведіть, що для потенційного бар'єру скінченної ширини і висоти при енергії частинки  $E < U_1$  існує ймовірність проходження частинки через бар'єр. Використайте відповідні рівняння для хвильових функцій та коефіцієнтів відбиття і проходження.

### Контрольні питання:

- Що таке потенційний бар'єр скінченної ширини і як він відрізняється від потенційного бар'єру нескінченної ширини?
- Як визначаються хвильові функції для різних областей потенційного бар'єру скінченної ширини?
- Що таке коефіцієнти відбиття і проходження, і як вони обчислюються для частинки, що проходить через потенційний бар'єр?
- Поясніть явище тунелювання та його фізичний сенс у контексті потенційного бар'єру.
- Як змінюється ймовірність проходження частинки через потенційний бар'єр зі збільшенням ширини бар'єру?
- Що означає умова неперервності хвильової функції та її похідної на межі двох областей?
- Як впливає енергія частинки на коефіцієнти відбиття і проходження через потенційний бар'єр?
- Поясніть, що таке інтерференційні ефекти у контексті надбар'єрного проходження частинок.

## 5. ПОТЕНЦІЙНА ЯМА КІНЦЕВОЇ ШИРИНИ

У цьому розділі ми дослідимо поведінку мікрочастинок у потенційній ямі кінцевої ширини. Це питання є ключовим для розуміння багатьох явищ у нанoeлектроніці, таких як квантові ями, що використовуються в сучасній нанотехнології та електроніці [6]. Основною метою цього розділу є аналіз стаціонарного рівняння Шредінгера для потенційної ями кінцевої ширини, визначення енергетичних рівнів та хвильових функцій, а також вивчення умов, за яких відбувається повне або часткове знаходження частинки в різних областях ями.

Ми розглянемо класичні підходи та квантово-механічні аспекти, що дозволить глибше зрозуміти фізичну природу цих процесів. Використання граничних умов та моделювання дозволить визначити дискретні енергетичні рівні та побудувати хвильові функції, що задовольняють умови безперервності.

Розглянемо потенційну яму кінцевої ширини (рис. 11)

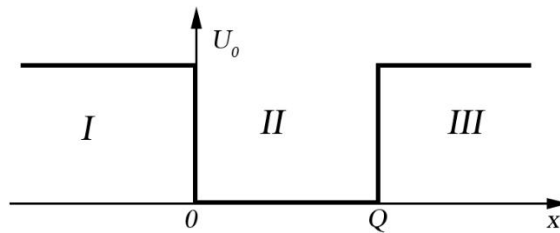


Рисунок 11 – Енергетична діаграма.

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x \leq Q \\ U_0, & x > Q \end{cases}$$

Запишемо стаціонарне рівняння Шредінгера:

$$\frac{d^2}{dx^2} \cdot \psi(x) + \left[ \frac{2 \cdot m}{\hbar^2} \cdot (E - U(x)) \right] \cdot \psi(x) = 0$$

Для кожної області рівняння прийме вигляд:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A^+ \cdot e^{ik_1x} + A^- \cdot e^{-ik_1x} \\ \psi_2(x) = C \cdot \sin(k_2x + \Delta) \\ \psi_3(x) = B^+ \cdot e^{ik_3x} + B^- \cdot e^{-ik_3x} \end{cases},$$

де  $k_1 = \sqrt{\frac{2 \cdot m^*_1}{\hbar^2} \cdot (E - U_0)}, k_2 = \sqrt{\frac{2 \cdot m^*_2 \cdot E}{\hbar^2}}, k_3 = \sqrt{\frac{2 \cdot m^*_3}{\hbar^2} \cdot (E - U_0)}$

Тоді

$$k = k_2 = \sqrt{\frac{2 \cdot m^*_2 \cdot E}{\hbar^2}},$$

$$\sqrt{\frac{2 \cdot m^*_1}{\hbar^2} \cdot (E - U_0)} = i \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot m^*_1 \cdot U_0}{\hbar^2} - \frac{2 \cdot m^*_1 \cdot E}{\hbar^2}} = i \cdot \beta$$

$$\frac{2 \cdot m^*_1 \cdot U_0}{\hbar^2} = k_4^2; \quad \frac{2 \cdot m^*_1 \cdot E}{\hbar^2} = k_5^2$$

$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} (\psi(x)) \rightarrow 0$  – хвильова функція скінченна.

Тоді:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A^+ \cdot e^{\beta x}, & \text{при } x \rightarrow -\infty, A^- \cdot e^{\beta x} = 0; \\ \psi_2(x) = C \cdot \sin(kx + \Delta), \\ \psi_3(x) = B^- \cdot e^{-\beta x}, & \text{при } x \rightarrow +\infty, B^+ \cdot e^{\beta x} = 0. \end{cases}$$

Запишемо граничні умови:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \frac{1}{m_1^*} \cdot \psi_1'(0) = \frac{1}{m_2^*} \cdot \psi_2'(0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_1(Q) = \psi_2(Q) \\ \frac{1}{m_1^*} \cdot \psi_1'(Q) = \frac{1}{m_2^*} \cdot \psi_2'(Q) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A^+ = C \cdot \sin(\Delta) \\ \frac{1}{m_1^*} \cdot A^+ \cdot \beta = \frac{1}{m_2^*} \cdot C \cdot k \cdot \cos(\Delta) \end{cases} \quad (10)$$

$$(11)$$

$$\begin{cases} C \cdot \sin(k \cdot Q + \Delta) = B^- \cdot e^{-\beta Q} \\ \frac{1}{m_2^*} \cdot C \cdot k \cdot \cos(k \cdot Q + \Delta) = \frac{1}{m_1^*} \cdot (-\beta) \cdot B^- \cdot e^{-\beta Q} \end{cases} \quad (12)$$

$$(13)$$

Поділимо (11) на (10) та (12) на (13)

$$\begin{cases} \frac{1}{m_1^*} \cdot \beta = \frac{1}{m_2^*} \cdot k \cdot \text{ctg}(\Delta) \\ \frac{1}{m_2^*} \cdot k \cdot \text{ctg}(k \cdot Q + \Delta) = -\frac{1}{m_1^*} \cdot \beta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{ctg}(\Delta) = \frac{\beta \cdot m_2^*}{k \cdot m_1^*} \\ \text{ctg}(k \cdot Q + \Delta) = -\frac{\beta \cdot m_2^*}{k \cdot m_1^*} \end{cases}$$

$$\sin(\Delta) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \cdot k^2}}}$$

$$\sin(k \cdot Q + \Delta) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \left(-\frac{\beta}{\alpha \cdot k}\right)^2}}$$

$$\text{arcctg}\left(\frac{\beta}{\alpha \cdot k}\right) = \Delta$$

$$\text{arcctg}\left(-\frac{\beta}{\alpha \cdot k}\right) = k \cdot Q + \Delta$$

$$\pi - \text{arcctg}\left(\frac{\beta}{\alpha \cdot k}\right) = k \cdot Q + \Delta$$

$$\pi - \Delta = k \cdot Q + \Delta$$

$$\Delta = \frac{\pi - k \cdot Q}{2}$$

$$\sin\left(\frac{\pi}{2} \cdot n - \frac{k \cdot Q}{2}\right) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \cdot k^2}}}$$

$$\frac{\beta^2}{\alpha^2 \cdot k^2} = \frac{k_4^2}{k^2 \cdot \alpha^2} - \frac{k_5^2}{k^2 \cdot \alpha^2} = \frac{k_4^2}{k^2 \cdot \alpha^2} - \frac{1}{\alpha}$$

$$\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2 \cdot k^2}}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{k_4^2}{k^2 \cdot \alpha^2} - \frac{1}{\alpha}}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha^2} \cdot \left(\frac{k_4^2}{k^2} - \alpha\right)}} =$$

$$= \left| \begin{array}{l} \frac{k \cdot Q}{2} = \xi; \quad \frac{2}{k_4 \cdot Q} = \gamma \\ \xi \cdot \gamma = \frac{k}{k_4} \end{array} \right| = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha^2} \cdot \left(\frac{1}{\xi^2 \cdot \gamma^2} - \alpha\right)}}$$

$$\sin\left(\frac{\pi}{2} \cdot n - \xi\right) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha^2} \cdot \left(\frac{1}{\xi^2 \cdot \gamma^2} - \alpha\right)}}$$

Для  $n$  – непарне число

$$\cos(\xi) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha^2} \cdot \left(\frac{1}{\xi^2 \cdot \gamma^2} - \alpha\right)}}$$

Для  $n$  – парне число

$$\sin(\xi) = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha^2} \cdot \left(\frac{1}{\xi^2 \cdot \gamma^2} - \alpha\right)}}$$

На рис. 12 наведено результати моделювання.

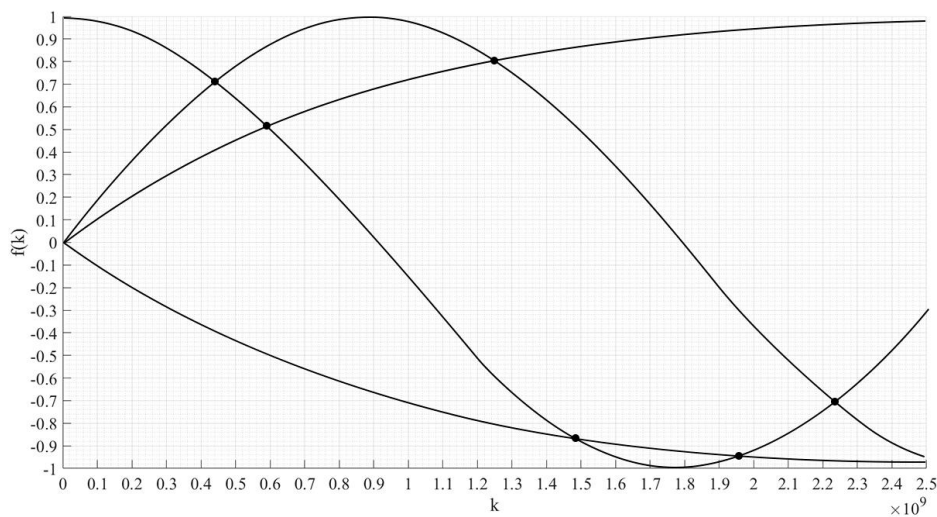


Рисунок 12 – Залежність розв’язків рівняння від хвильового вектора.

У цьому розділі розглянуто поведінку електронів у потенційній ямі кінцевої ширини та визначено енергетичні рівні для таких систем. Проведено аналіз стаціонарного рівняння Шредінгера з урахуванням граничних умов, що дозволило отримати дискретні значення енергій для електронів.

Дослідження поведінки мікрочастинок у потенційній ямі кінцевої ширини показало, що енергетичні рівні таких систем є дискретними. Це відповідає основним принципам квантової механіки, згідно з якими частинка в обмеженій області простору може мати лише певні дозволені значення енергії. Побудова хвильових функцій для різних областей потенційної ями показала, що вони є скінченними і задовольняють граничні умови.

Використання граничних умов дозволило отримати конкретні вирази для хвильових функцій та їхніх похідних, забезпечуючи безперервність функцій на межах областей. Результати моделювання показали залежність розв’язків рівняння від хвильового вектора, що дозволяє краще зрозуміти поведінку електронів у потенційних ямах різної ширини. Проведений аналіз підтверджує квантово-механічні принципи та дозволяє отримати важливі характеристики для систем з потенційними ямами кінцевої ширини. Це має значення для подальших досліджень та практичних застосувань у фізиці твердого тіла та нанотехнологіях.

#### **Задачі для самостійного розв’язку:**

- Задача на визначення хвильових функцій:** Розрахуйте хвильові функції для електрона в потенційній ямі шириною  $W = 1$  нм і глибиною  $U_0 = 10$  еВ, використовуючи стаціонарне рівняння Шредінгера. Запишіть аналітичні вирази для хвильових функцій у кожній області ями.
- Задача на розрахунок енергетичних рівнів:** Визначте дискретні енергетичні рівні для електрона в потенційній ямі шириною  $W = 2$  нм і глибиною  $U_0 = 15$  еВ. Покажіть розрахунки і результати у вигляді графіка залежності енергетичних рівнів від ширини ями.
- Задача на граничні умови:** Поясніть, як граничні умови впливають на хвильові функції та їх похідні на межах областей у потенційній ямі шириною  $W = 1.5$  нм і глибиною  $U_0 = 12$  еВ.
- Задача на залежність хвильового вектора:** Побудуйте графік залежності хвильового вектора від енергетичних рівнів для потенційної ями шириною  $W = 1$  нм і глибиною  $U_0 = 10$  еВ. Проаналізуйте отримані результати.

5. **Задача на квантово-механічні умови:** Доведіть, що для потенційної ями кінцевої ширини існує дискретний набір енергетичних рівнів. Використайте відповідні рівняння для хвильових функцій та граничні умови.
6. **Задача на практичне застосування:** Обговоріть практичні застосування квантових ям у сучасній науці та техніці, зокрема у квантових комп'ютерах та нанотехнологіях. Наведіть приклади конкретних пристроїв або технологій, що використовують квантові ями.

**Контрольні питання:**

1. Що таке потенційна яма кінцевої ширини і як вона відрізняється від потенційної ями нескінченної ширини?
2. Як визначаються хвильові функції для різних областей потенційної ями кінцевої ширини?
3. Що таке стаціонарне рівняння Шредінгера і як його використовують для аналізу потенційної ями?
4. Що таке дискретні енергетичні рівні і як вони виникають у потенційній ямі?
5. Як граничні умови впливають на розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера для потенційної ями?
6. Поясніть значення хвильового вектора і його залежність від енергетичних рівнів у потенційній ямі.
7. Які практичні застосування квантових ям у сучасній науці та техніці?

## 6. КВАНТОВІ СТАНИ У НИЗЬКОРОЗМІРНИХ УМОВАХ

У цьому розділі ми розглянемо квантові стани у низькорозмірних умовах. Усі макропараметри будь-якої електронної системи, приладу, пристрою (струм, опір, провідність) зумовлені мікропараметрами, що характеризують електронне перенесення у них (рухливістю, дрейфовою швидкістю, часом і довжиною вільного пробігу та низкою інших).

Ці мікропараметри визначають або точніше самі задаються кінетикою електронів. Кінетика, або просторовий рух електронів, – це насамперед рух під дією електричних і магнітних полів у речовині, безперервно переривчастий різними актами розсіювання. Під час розсіювання напрямок руху електронів змінюється. Найчастіше ці зміни напряму руху хаотичні, проте деякі механізми розсіювання, наприклад, на іонах домішки та електронів один на одному, підпорядковуються певним закономірностям [7].

Загалом розсіювання електрона визначається кутом розсіювання  $\theta$ . Однак для точного визначення його просторового розташування необхідно знати низку інших кутів. На рис. 13 задано ці кути. Хвильовий вектор  $\vec{k}$  визначає напрямок руху електрона до розсіювання, вектор  $\vec{k}'$  – після розсіювання. Між векторами  $\vec{k}$  і  $\vec{v}$  існує очевидний зв'язок  $\hbar\vec{k} = m\vec{v}$ .

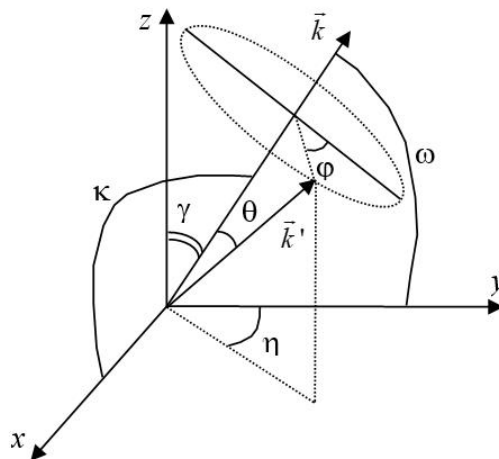


Рисунок 13. – Просторова орієнтація хвильових векторів електрона під час розсіювання.

Кути  $\gamma$ ,  $\omega$ ,  $\kappa$ ,  $\eta$  – відомі до розсіювання (вони задають напрямок руху електрона до розсіювання), кути  $\theta$  та  $\phi$  називаються кутами розсіювання. У кожного механізму розсіювання вони свої. Знаючи кути  $\theta$ ,  $\phi$ ,  $\gamma$ ,  $\omega$ ,  $\kappa$  та  $\eta$  можна визначити напрямок руху електрона після розсіювання за допомогою таких співвідношень:

$$k'_z = k'(\cos\theta \cos\gamma + \sin\theta \cos\phi \sin\gamma),$$

$$k'_y = k'(\cos\theta \cos\omega - \sin\theta \cos\phi \cos\gamma \cos\eta - \sin\theta \sin\phi \sin\eta),$$

$$k'_x = k'(\cos\theta \cos\kappa - \sin\theta \cos\phi \cos\gamma \sin\eta + \sin\theta \sin\phi \cos\eta).$$

Розсіювання може бути пружним, тоді  $\vec{k} = \vec{k}'$ , і непружним, тоді  $\vec{k} \neq \vec{k}'$ . Закон, що визначає відповідність між  $k'$  і  $k$ , встановлюється характером кожного механізму розсіювання.

3D-стан – це коли електрон вільний у своєму русі за всіма трьома напрямками (під час розсіювання всі компоненти вектора  $\vec{k}$  змінюються), 2D-стан – це коли електрон вільний у своєму русі лише за двома напрямками (змінюються лише дві компоненти вектора  $\vec{k}$  – зазвичай її обирають  $k_x$  і  $k_y$ ), 1D-стан – це коли електрон вільний у своєму русі лише за одним напрямком (змінюються лише одна компонента вектора  $\vec{k}$  – зазвичай її обирають  $k_x$ ).

Щільність станів  $n(E)$  є параметр, що визначає скільки енергетичних станів, які можуть займати електрони, припадає на одиничний інтервал енергії. Ця величина має дуже важливий фізичний сенс, оскільки вона визначає концентрацію електронів у конкретній ділянці будь-якого матеріалу або приладу, а також інтенсивність розсіювання електронів у цій ділянці (кількість розсіювань за одиницю часу).

Візьмемо об'ємний прямокутної форми зразок, з розмірами  $L_x$ ,  $L_y$  і  $L_z$ , що перевищують де Бройлевську довжину хвилі електрона (див. рис. 14).

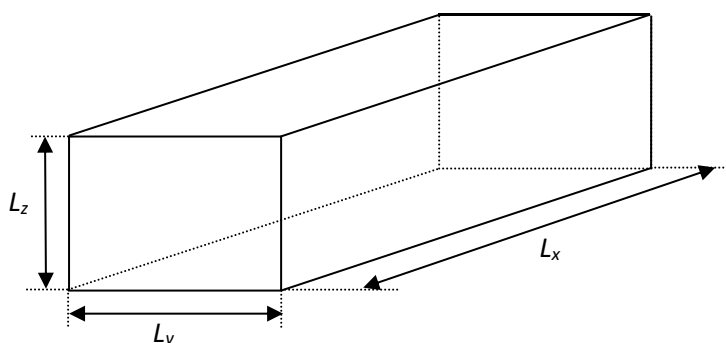


Рисунок 14. – Зразок прямокутної форми.

Модуль хвильового вектора електрона за визначенням розраховується як  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ . Мінімальні зміни його проекцій  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$  в об'ємному зразку дорівнюватимуть  $\Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x}$ ,  $\Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y}$ ,  $\Delta k_z = \frac{2\pi}{L_z}$  (згідно з одним із ключових положень зонної теорії напівпровідників – періодичності ґратки). Оцінимо, як ці зміни співвідносяться із середнім значенням величин  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$ .

Середнє значення будь-якої з проекцій приблизно відповідає одній третині теплової енергії електрона ( $k_j \rightarrow \frac{1}{3} E_{\text{тепл}} = \frac{1}{3} \cdot \frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} k_B T$ ), тобто  $\frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} \approx \frac{1}{2} k_B T$ . Для арсеніду галію за кімнатної температури отримаємо  $k_j \approx 1,5 \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$ . Мінімальні ж зміни цієї величини для зразка, наприклад, з  $L_x = L_y = L_z = 1 \text{ мкм}$  будуть  $\Delta k_j \approx 0,063 \cdot 10^8 \text{ м}^{-1}$ , тобто майже у 25 разів меншими.

Визначимо розміри у просторі  $k$ -векторів, що припадають на один стан. Вони мають дорівнювати відношенню величини об'єму обсягу мінімальної зміни вектора  $k$  електрона до об'єму простору, в якому ця зміна спостерігається, тобто  $\frac{\Delta k_x \cdot \Delta k_y \cdot \Delta k_z}{L_x \cdot L_y \cdot L_z}$ . Підставивши значення  $\Delta k_x$ ,  $\Delta k_y$ ,  $\Delta k_z$ , і враховуючи, що на кожному стані можуть перебувати два електрони з різними спінами, для густини станів у  $k$ -просторі отримаємо  $V_{\text{одинич.}}^k = \frac{\Delta k_x \cdot \Delta k_y \cdot \Delta k_z}{L_x \cdot L_y \cdot L_z} = \frac{1}{(2\pi)^3}$  і  $n(k) = 2V_{\text{одинич.}}^k = \frac{2}{(2\pi)^3}$ .

У практичних цілях більш цікавим є значення густини станів у просторі енергій  $n(E)$ . Ця величина пов'язана з  $n(k)$  за допомогою виразу  $n(E) = n(k) \cdot \frac{dV_k}{dE}$ . Знайдемо значення  $n(E)$ .

Як відомо, енергія залежить від хвильового вектора згідно з  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , тобто значення енергії фактично можна представити у вигляді сфери з радіусом  $k$ . Найдрібніша зміна об'єму в просторі

енергій  $dV_E$  вочевидь пов'язана з найдрібнішою зміною хвильового вектора  $dk$  як поверхня сфери помножена на величину  $dk$ :  $dV_E = 4\pi k^2 dk$ . Перейдемо в  $dV_E$  від  $dk$  до  $dE$ . Для цього продиференціюємо вираз:  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk$ . Звідси  $dk = \frac{m}{\hbar^2 k} dE$ . Підставивши це у вираз для  $dV_E$ , отримаємо

$$dV_E = \frac{4\pi k m}{\hbar^2} dE. \text{ Але за визначенням енергії } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \text{ Отже, остаточно отримаємо } dV_E = \frac{4\pi\sqrt{2m^2 E}}{\hbar^3} dE.$$

$$\text{Звідси } \frac{dV_E}{dE} = \frac{4\pi\sqrt{2m^2 E}}{\hbar^3}.$$

Підставивши значення  $n(k)$  і  $\frac{dV_E}{dE}$  у вираз для  $n(E)$ , отримаємо значення густини станів у звичайному об'ємному випадку у вигляді

$$n_{3D}(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{\hbar^3 \pi^2} \sqrt{E}.$$

На рис. 15 наведена залежність щільності станів від енергії.



Рисунок 15. – Щільність станів у 3D-умовах.

У двовимірному електронному газі вільним для руху є лише два напрямки – наприклад, за довжинами  $L_x$  та  $L_y$ . У цьому випадку для енергії матимемо [8]:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m},$$

а для густини станів у  $k$ -просторі  $V_{\text{одинич.}}^k = \frac{\Delta k_x \Delta k_y}{L_x L_y L_z} = \frac{1}{(2\pi)^3 L_z}$  і  $n(k) = \frac{2}{(2\pi)^2 L_z}$ . Як і в об'ємному випадку знайдемо вираз для  $\frac{dV_E}{dE}$ . Для 2D-електронного газу залежність енергії від вектора  $k$  має залежність у вигляді кола, і отже, елементарна зміна  $dV_E$  від  $dk$  буде являти собою площу обода  $dV_E = dS_E = 2\pi k dk$ .  $dE$  з  $dk$  будуть пов'язані тим самим співвідношенням  $dk = \frac{m}{\hbar^2 k} dE$ . Підставивши в  $dV_E$  або точніше  $dS_E$ , отримаємо  $dS_E = \frac{2\pi m}{\hbar^2} dE$ . Звідси  $\frac{dS_E}{dE} = \frac{2\pi m}{\hbar^2}$ . Однак у цьому виразі потрібно мати на увазі, що  $dE$  має розрив у точці  $E = E_n$ . Цей розрив можна врахувати шляхом додавання суми за всіма можливими  $E_n$  множника  $\Theta(E - E_n) = \begin{cases} 1 & E \geq E_n \\ 0 & E < E_n \end{cases}$ , тоді  $\frac{dS_E}{dE} = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n)$ . Якщо енергія менша за енергію найпершого рівня розмірного квантування ( $E < E_1$ ), то величина  $\frac{dS_E}{dE}$  узагалі дорівнюватиме 0, і також нулю дорівнюватиме і густина станів. За досягнення  $E = E_1$  величина  $\frac{dS_E}{dE}$  стрибком набуває значення  $\frac{2\pi m}{\hbar^2}$ . За досягнення наступного рівня розмірного квантування ця величина подвоюється і так далі.

Перемноживши  $n(k)$  і  $\frac{dS_E}{dE}$ , отримаємо вираз для густини станів у двовимірному випадку [9]:

$$n_{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2 L_z} \sum_n \Theta(E - E_n).$$

Аналогічні, ще простіші розрахунки, для густини станів в одновимірному випадку дають таке

$$\text{співвідношення: } n_{1D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar L_y L_z} \sum_n \sum_m \frac{\Theta(E - E_{nm})}{\sqrt{E - E_{nm}}}.$$

Аналіз квантових станів у низькорозмірних умовах показав, що густина станів залежить від розмірності системи та її параметрів. Для тривимірних, двовимірних і одновимірних систем густина станів розраховується по-різному, що визначає їхні фізичні властивості.

Результати показали, що в тривимірному випадку густина станів зростає з енергією пропорційно до кореня квадратного з енергії. Для двовимірних систем густина станів є постійною і має розриви при досягненні енергії розмірного квантування. В одновимірному випадку густина станів зростає з енергією інверсно пропорційно до кореня квадратного з енергії.

Ці результати підтверджують основні принципи квантової механіки та мають важливе значення для розробки нових матеріалів і технологій у фізиці твердого тіла та нанотехнологіях. Розуміння квантових станів у низькорозмірних умовах дозволяє створювати прилади з унікальними властивостями, що використовуються в сучасній електроніці.

### Задачі для самостійного розв'язку:

- Задача на розрахунок густини станів у 3D-системі:** Розрахуйте густина станів у тривимірній системі для електрона з енергією  $E = 1$  еВ, використовуючи формулу  $n_{3D}(E) = \frac{2m^3}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$ . Поясніть фізичний сенс отриманого результату.
- Задача на розрахунок густини станів у 2D-системі:** Розрахуйте густина станів у двовимірній системі для електрона при енергії, що відповідає першому рівню розмірного квантування  $E_1 = 0.1$  еВ, використовуючи формулу  $n_{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum n \Theta(E - E_n)$ .
- Задача на розрахунок густини станів у 1D-системі:** Визначте густина станів у одновимірній системі для електрона з енергією  $E = 0.5$  еВ, використовуючи формулу 
$$n_{1D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar L_x L_y} \sum n \Theta(E - E_n) \sqrt{\frac{E - E_n}{E}}.$$
- Задача на моделювання поведінки електронів:** Змоделюйте поведінку електронів у тривимірній системі з розмірами  $L_x = L_y = L_z = 1$  мкм. Визначте, як змінюються проєкції хвильового вектора  $k_x, k_y, k_z$  для електронів при кімнатній температурі.
- Задача на вплив розмірного квантування:** Поясніть, як розмірне квантування впливає на електронні властивості двовимірних матеріалів, таких як графен. Розрахуйте густина станів для графену при енергії, що відповідає другому рівню розмірного квантування.
- Задача на практичне застосування:** Обговоріть практичні застосування низькорозмірних систем у сучасній електроніці. Наведіть приклади пристроїв, що використовують квантові ями, дрони або точки, та поясніть, як густина станів впливає на їх роботу.

### Контрольні питання:

- Що таке низькорозмірні умови і як вони впливають на поведінку електронів у системах?
- Як розсіювання електронів впливає на їх просторовий рух та електричні властивості матеріалів?
- Що таке хвильовий вектор і як він змінюється під час розсіювання?
- Як визначається густина станів у тривимірних (3D), двовимірних (2D) та одновимірних (1D) системах?

5. Яка залежність густини станів від енергії у тривимірних, двовимірних та одновимірних системах?
6. Що таке розмірне квантування і як воно впливає на густину станів?
7. Як змінюється густина станів у двовимірному електронному газі при досягненні енергії розмірного квантування?

## ВИСНОВКИ

У даному методичному посібнику представлено глибоке дослідження квантових властивостей електронів у потенціальних ямах різної ширини. Розглянуто приклади розрахунку енергетичних рівнів для електронів у ямах шириною 1 см та  $10 \text{ \AA}$ , що дозволило зрозуміти, як змінюється енергія електронів за зменшення розмірів квантової ями до нанорівня. Це дослідження підтвердило, що енергія у таких системах стає дискретною, що є фундаментальним аспектом квантової механіки.

Порівняння енергетичних рівнів для різних розмірів ям продемонструвало важливий результат: за зменшення ширини ями до нанорозмірів, різниця між енергетичними рівнями значно збільшується. Це явище пояснює, чому на нанорівні квантові властивості стають домінуючими. Водночас, у макроскопічних системах, енергетичні рівні настільки близькі один до одного, що їх можна сприймати як неперервні.

Практичні задачі, наведені у посібнику, допомагають студентам зрозуміти квантову природу частинок на прикладі конкретних розрахунків. Зокрема, задачі з розрахунку різниці між першими двома енергетичними рівнями електрона у потенціальних ямах різної ширини демонструють, як змінюється квантова поведінка електронів залежно від геометричних параметрів системи.

Посібник також містить важливі методологічні рекомендації щодо побудови залежностей розподілу амплітуд хвильових функцій та густини ймовірності виявлення частинки у даній точці простору. Ці графічні залежності наочно ілюструють квантові властивості частинок у потенціальних ямах і є цінним інструментом для розуміння поведінки мікрооб'єктів у квантових системах.

## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Поплавко Ю. М. Нанофізика, наноматеріали, наноелектроніка: навчальний посібник / Ю. М. Поплавко, О. В. Борисов, Ю. І. Якименко. – Вінниця: ВНТУ, 2016. – 199 с.
2. Осадчук, В. С. Фізична наноелектроніка: навчальний посібник / В. С. Осадчук, О. В. Осадчук. – Вінниця: ВНТУ, 2015. – 146 с.
3. Находкін М. Г. Фізичні основи мікро- та наноелектроніки в задачах: навч. посіб./ М. Г. Находкін, П. В. Мельник, А. О. Голобородько. – К. : Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2014. – 350 с.
4. Заячук Д.М., Якименко Ю.І., Орлов А.Т., Співак В.М., Богдан О.В. Основи наноелектроніки : Підручник у 2-х книгах, Книга 1. Квантово-механічні засади, структури, фізичні властивості – Вид. «Кафедра», Київ 2014 – 479 с.
5. Наноматеріали і нанотехнології : навчальний посібник / М. О. Азаренков, І. М. Неклюдов, В. М. Береснєв та ін. – Харків : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2014. – 316 с.
6. Субмікронні та нанорозмірні структури електроніки : підручник / З. Ю. Готра, І. І. Григорчак, Б. А. Лукіянець та ін. – Чернівці: Видавництво та друкарня «Технологічний центр», 2014. – 839 с.
7. Carbon nanotubes, science and technology part (I) structure, synthesis and characterization / A. Aqel, K. M. M. El-Nour, R. A. A. Ammar, A. Al-Warthan Arabian // Journal of Chemistry. – 2012. – Vol. 5. – P. 1–23.
8. Заячук Д. М. Нанотехнології і наноструктури: Навчальний посібник. Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2009. –580 с.
9. V.V.Mitin, V.A.Kochelap, M.A.Stroscio Introduction to nanoelectronics//Cambridge university press 2008 – 347 p.

## ДОДАТОК А

### Розрахункові домашні роботи

*Вибір варіанту завдання: XY* – останні цифри у номері залікової книжки (списку групи). Якщо **X** непарне розглядати електрон в зоні провідності, **X** парне розглядати дірку в валентній зоні. **Y** – позначає номер сполуки у Таблиці 1. За **Y = 0п** – розглядати задачу про дірку у валентній зоні за парному **X**, за **Y = 0н** – непарному **X**

#### Завдання 1.

Розрахувати значення «поперечних» енергій електрона у квантовій потенціальній ямі, що утворена у зоні провідності (валентній зоні) вузькозонного напівпровідника, що оточений масивним широкозонним напівпровідником. Знайти діапазон зміни ширини ями (у моношарах), за яких у ній буде існувати не більше, ніж один енергетичний рівень. Товщина вузькозонного напівпровідника дорівнює десятиєм періодам ґратки. Якщо виявилось, що у ямі знаходиться менше двох рівнів, розширити її в 1.5 рази.

Таблиця 1. *Параметри напівпровідникових гетероструктур*

Y	Сполуки	Розрив зони провідності, eВ	Розрив валентної зони, eВ	Ефективна маса електрона в ЗП	Ефективна маса дірки в ВЗ
1	InN/AlN	2.7	1.8	$0.11m_0/0.85m_0$	$1.63m_0/0.53m_0$
2	GaN/AlN	2.1	0.7	$0.13m_0/0.85m_0$	$1.4m_0/0.53m_0$
3	AlAs/GaAs	0.77	0.43	$0.71m_0/0.85m_0$	$0.76m_0/0.53m_0$
4	Al <sub>0.33</sub> Ga <sub>0.67</sub> As/GaAs	0.25	0.15	$0.09m_0/0.85m_0$	$0.6m_0/0.53m_0$
5	Al <sub>0.66</sub> Ga <sub>0.34</sub> As/GaAs	0.51	0.3	$0.94m_0/0.85m_0$	$0.64m_0/0.53m_0$
6	AlSb/GaSb	0.487	0.4	$0.12m_0/0.042m_0$	$0.98m_0/0.4m_0$
7	InP/Ga <sub>0.47</sub> In <sub>0.53</sub> As	0.2	0.4	$0.077m_0/0.043m_0$	$0.64m_0/0.5m_0$
8	Si <sub>0.7</sub> Ge <sub>0.3</sub> /Si	0.056	0.22	$0.55m_0/1.06m_0$	$0.34m_0/0.81m_0$
9	InN/GaN	0.45	1.05	$0.11m_0/0.13m_0$	$1.63m_0/1.4m_0$
0п	GaAs/GaN	-	1.84	$0.85m_0/0.13m_0$	$0.53m_0/1.4m_0$
0н	SiC/AlN	-	2.5	$0.72m_0/0.85m_0$	$0.6m_0/0.53m_0$

Таблиця 2. *Сталі ґраток деяких напівпровідників*

П/п	InN	GaN	GaAs	GaSb	Ga <sub>0.47</sub> In <sub>0.53</sub> As	Si <sub>0.7</sub> Ge <sub>0.3</sub>	SiC
a, Å	3.53	3.16	5.65	6.10	5.87	5.44	4.36

## Завдання 2.

Розрахувати опір провідника з матеріалу вузькозонного напівпровідника поперечним перетином розмірами  $10 \times 10$  та довжиною 100 періодів кристалічної ґратки.

## Завдання 3.

*Тема:* Дослідження квантово-розмірних ефектів та електронного транспорту в резонансно-тунельному діоді (РТД).

*Мета:* Користуючись запропонованою моделлю:

- вивчити принцип роботи РТД,
- визначити залежність параметрів квантових ефектів та ВАХ від фізико-топологічних параметрів РТД,
- набути навичок програмної реалізації пристроїв наноелектроніки

*Умова:* Активна частина резонансно-тунельного діоду являє собою два бар'єри та яму, які описані в РГР2 (далі – двобар'єрна квантова система, ДБКС). ДБКС оточена достатньо товстими шарами того ж матеріалу, з якого виготовлена квантова яма. Цей матеріал леговано домішкою  $n$ -типу (якщо варіанту відповідає зона провідності) та  $p$ -типу (якщо валентна зона). Рівень легування:  $N_d = 10^{24} \text{ м}^{-3}$ . Температура кристалічної ґратки  $T = 300 \text{ К}$ . Вважати, що всі атоми однозарядної домішки іонізовані.

*Завдання:* У рамках прийнятих нижче припущень:

а) розробити алгоритм розрахунку:

- а.1) кількості метастабільних рівнів у квантовій ямі РТД  $N$ ;
- а.2) енергії рівнів у квантовій ямі РТД  $E_1, \dots, E_N$ ;
- а.3) ширину «природного» розширення рівнів у квантовій ямі  $\Delta E_1, \dots, \Delta E_N$ ;
- а.4) функції проходження  $T(E_z)$ ,  $E_z$  – «поперечна» енергія електрона;
- а.5) вольт-амперної характеристики  $J(V)$ ,  $J$  – густина струму.

б) побудувати залежність положення енергетичних рівнів у ямі від ширини квантової ями. Ширину квантової ями змінювати у межах  $[0.5 \cdot a_0; 5a_0]$ , де  $a_0$  – ширина ями для вашого варіанту.

в) побудувати залежність природного розширення енергетичних рівнів у ямі від ширини потенціальних бар'єрів. Ширину бар'єрів змінювати у межах  $[0.5 \cdot b_0; 5b_0]$ , де  $b_0$  – ширина бар'єру для вашого варіанту.

г) порівняти функцію  $T(E_z)$ , розраховану за нульової напруги у даній РГР з цією ж функцією, розрахованою в РГР2.

д) побудувати графік функції  $T(E_z)$  для величини прикладеної напруги,  $V_1 = E_1/2e$ . Порівняти

е) за допомогою розробленої програми розрахувати ВАХ РТД у діапазоні від 0 В до  $V = U_b/e$ , де  $U_b$  – висота потенціального бар'єру,  $e$  – заряд електрона.

є) У висновках пояснити форму отриманих залежностей на основі моделі РТД, яка описана нижче.

Відповісти на питання, як можна підвищити густина струму через РТД та регулювати напругу, за якої з'являється перший пік струму. Пояснити, виходячи з моделі, інші спостережувані феномени та закономірності.

Звітність

а) заповнити таблицю

	Лівий резервуар	Лівий бар'єр	Квантова яма	Правий бар'єр	Правий резервуар
$m^*/m_0$					
$U_0$ , eВ					
$\Delta z$ , нм	–				–

Позначення:

$m^*/m_0$  – відношення ефективної маси електрона до маси спокою електрона;

$U_0$  – розрив зони провідності або валентної зони (у залежності від варіанту);

$\Delta z$  – товщина відповідного шару.

б) лістинг розробленої програми. Алгоритм, що пояснює роботу програми, складений у довільній формі, наприклад блок-схема.

в) заповнити таблицю:

Кількість рівнів у ямі, $N$	
Енергії рівнів, $E_1, \dots, E_N$ , eВ,	
«Природне розширення рівнів», $E_1, \dots, E_N$ , meВ	
Густина струму за першого піку, $A/m^2$	
Перша пікова напруга, В	

в) графіки розрахованих залежностей. г) висновки.

## ЗМІСТ ЗВІТУ

Звіт слід оформляти в електронному вигляді.

Він повинен містити наступні пункти:

1. Мета роботи.
2. Схема дослідження.
3. Графіки результатів розрахунку і їх аналіз.

Графіки наводяться на кожен вид аналізу у вигляді скріншоту.

4. Висновки – індивідуальні і які відображають сутність виконаної роботи.