

Львівський національний університет імені Івана Франка

Фізичний факультет

Кафедра теоретичної фізики

УДК 530.145

МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

на тему:

“Обчислення квантової ємності системи трикутних потенціальних ям за допомогою квантово-механічного імпедансу”

Виконав студент групи ФзФм-61

Спеціальності 104

«Фізика та астрономія»

Колесник Р. О.

Керівник: доц. Григорчак О. І.

Рецензент: доц. Бовгира О. В.

.

м. Львів — 2021 р.

АНОТАЦІЯ

Знайдено власні значення енергії для системи подвійних трикутних потенціальних ям за допомогою квантово-механічного імпедансу. Обчислено квантову ємність для такої системи для різних параметрів потенціальних ям. Побудовано графіки залежності квантової ємності від логарифма концентрації носіїв заряду. Результати роботи можуть бути використані для опису властивостей нанорозмірних об'єктів і встановлення параметрів наносистем, які дозволять оптимізувати вплив квантової ємності.

Ключові слова: квантово-механічний імпеданс, квантова ємність, потенціали зі складною геометрією.

ABSTRACT

The eigenvalues of energy for a system of double triangular potential wells are found with the help of quantum mechanical impedance. Quantum capacitance for such a system is calculated for different parameters of potential wells. Graphs of the dependence of quantum capacity on the logarithm of the charge carrier concentration are constructed. The results can be used to describe the properties of nanoscale objects and to set the parameters of nanosystems that will optimize the effect of quantum capacity.

Keywords: quantum mechanical impedance, quantum capacitance, potentials with complex geometry.

ЗМІСТ

ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. Загальні поняття про імпеданс	7
1.1 Нелінійне диференціальне рівняння квантово-механічного імпедансу.....	7
1.2 Розв’язок для сталого значення потенціальної енергії	8
1.3 Підхід квантово-механічного імпедансу до пошуку власних значень енергії та власних функцій в потенціальній ямі.	9
РОЗДІЛ 2. Обчислення квантово-хвильового імпедансу та квантової ємності для довільного потенціалу	11
2.1 Обчислення квантово-механічного імпедансу для потенціалу зі складною просторовою структурою	11
2.2 Квантова ємність	12
РОЗДІЛ 3. Результати обчислення квантової ємності для подвійної системи трикутних потенціальних ям	14
3.1 Знаходження власних значень енергії.	14
3.2 Обчислення квантової ємності	16
ВИСНОВКИ	21
Список використаних джерел	22

ВСТУП

Теоретичний опис наногетероструктур має велике значення, оскільки дозволяє прогнозувати умови виготовлення наноматеріалів із необхідними властивостями. Першочерговим завданням для такого випадку є пошук енергій резонансних рівнів та зв'язаних станів, а також відповідних власних функцій. Дуже часто можна передбачити основні властивості розглянутих наноматеріалів, навіть якщо ми маємо лише одночастинкові стани. Крім того, маючи ці стани, ми можемо використовувати теорію збурень для врахування взаємодії між частинками. Те саме стосується теоретичного розгляду впливу зовнішніх полів на досліджувану систему.

Розв'язуючи це завдання, ми стикаємось із потенціалами всередині наноструктур, які зазвичай мають досить складну просторову структуру. Це означає, що неможливо отримати точні розв'язки рівняння Шредінгера. І навіть якщо ми апроксимуємо реальний потенціал прямокутними потенціалами, прямий розв'язок рівняння Шредінгера є надто складним. Ось чому було розроблено багато різних методик для чисельного дослідження квантово-механічних систем, а саме підхід трансфер-матриці [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7], різницевий метод [8, 9], підхід квантово-механічного імпедансу [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] та інші [18, 19, 20, 21, 22].

Чисельні розрахунки - це потужний інструмент для теоретичного дослідження багатьох квантово-механічних систем. Зокрема, дуже активно чисельно вивчалися багато-бар'єрні (ямкові) системи. Наприклад, у роботі [23] розглядалися симетричні, асиметричні одно- та дво-бар'єрні структури, а також двоямні потенціали. Особлива увага була приділена їх характеристикам в області резонансного тунелювання електронів. У роботі [24] розглядаються особливості чисельного перетворення Гільберта для кристалоподібних структур та пропонується алгоритм, що враховує ці особливості.

Говорячи про чисельні обчислення на основі підходу квантово-механічного імпедансу, слід зазначити, що робота [25] була першою статтею, в якій розглядалося застосування квантово-механічного імпедансу для розв'язку

рівняння Шредінгера в квантових ямах. Виявилось, що методика, заснована на квантово-механічному імпедансі, накладає менші обмеження на форму потенціальної ями в порівнянні з іншими відомими методами. Розроблений у цій роботі метод застосовувався до параболічної потенціальної ями разом з її поетапним наближенням. Кількість кроків було обрано таким чином, щоб розміри кроків розбиття були набагато меншими, ніж довжина хвилі електрона. Отримані власні значення та власні функції виявились дуже близькими до аналітично обчислених власних значень та власних функцій. Питання використання квантово-механічного імпедансу для чисельних розрахунків характеристик квантових систем також було предметом уваги [26, 27]

Коли ми говоримо про нано-масштаб як про точку, яка сигналізує про те, що властивості матеріалів змінюються, то ми маємо на увазі, що з однієї сторони цієї точки ми маємо субатомний рівень, для опису якого ми безпосередньо використовуємо рівняння Шредінгера, а з іншого боку, маємо макрорівень, коли ефекти “об’єму” суттєво домінують. Для опису цього рівня ми використовуємо методи статистичної фізики, де застосовується термодинамічна межа. На нано рівні обидва ці світи зустрічаються між собою, і тому виникають абсолютно унікальні явища, коли геометрія матеріалу починає відігравати значну роль у поведінці та властивостях системи. Ця унікальність наносвіту дозволяє створювати мініатюрні прототипи макроскопічних об’єктів, які можна назвати нанороботами. Зокрема, в роботі [28] розглядаються дві прості наномоделі, а саме квантові шестерні та квантовий човник, і вони (за твердженням автора) служать модельними системами для широкого кола інших нанопристроїв. Ще одним перспективним напрямком нанотехнологій є створення квантових логічних елементів [29].

Одне з явищ, що виникає на межі розділу цих двох світів, - це квантова ємність. Вперше це поняття було введено Сержем Лурієм [30] в 1988 р. для опису зміни хімічного потенціалу в низькорозмірних квантових системах. У цій статті він розраховував квантову ємність для 2DEG (двовимірного електронного газу). Через три роки Лурій застосував цю концепцію для вивчення

резонансних тунельних діодів [31]. У [32, 33] при моделюванні пристроїв з вуглецевих нанотрубок також був використаний термін квантової ємності. Стаття [34] присвячена квантовій ємності при моделюванні нанорозмірних пристроїв. Автори дійшли висновку, що досліджувані моделі пристроїв повинні «містити» квантову ємність, щоб правильно описувати поведінку пристрою. Також виявлено взаємозв'язок між провідністю польового транзистора з вуглецевих нанотрубок (CNFET) та квантовою ємністю.

Метою цієї роботи є побудова залежності квантової ємності від концентрації носіїв заряду для подвійної квантової системи трикутних потенціальних ям. Для цього необхідно знайти власні значення енергій квантової системи. Тому додатково розглянемо підхід квантово-механічного імпедансу для знаходження власних станів і власних енергій. В залежності від параметрів потенціальних ям, будемо мати справу з різними видами потенціалів, які бувають у гетероструктурах, а отже зможемо прогнозувати їх поведінку.

РОЗДІЛ 1. Загальні поняття про імпеданс

1.1 Нелінійне диференціальне рівняння квантово-механічного імпедансу

Вперше рівняння Шредінгера було отримане Ервіном Шредінгером у 1926 році. Це рівняння показує закон еволюції квантової системи. Ми будемо розглядати стаціонарне рівняння Шредінгера.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.1)$$

Ми перепишемо його у наступній формі:

$$\left(\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \right)' + \left(\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \right)^2 = \frac{2m(U(x) - E)}{\hbar^2} \quad (1.2)$$

Помножимо з обох сторін це рівняння на $\frac{\hbar}{im}$ та введемо наступне позначення:

$$Z(x) = \frac{\hbar}{im} \left(\frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \right) \quad (1.3)$$

Тоді ми отримуємо диференціальне рівняння першого порядку для квантово-хвильового імпедансу:

$$\frac{dZ(x)}{dx} + \frac{im}{\hbar} Z^2(x) = i \frac{2}{\hbar} (E - U(x)) \quad (1.4)$$

Це рівняння є нелінійним рівнянням Рікатті. $Z(x)$ називається квантово-механічним імпедансом.

У чому перевага нелінійного диференціального рівняння першого порядку (рівняння Рікатті для квантово-хвильового імпедансу) над лінійним диференціальним рівнянням другого порядку (рівняння Шредінгера)? Річ у тому, що розв'язок диференціального рівняння першого порядку містить лише одну невідому константу, тоді як розв'язок рівняння другого порядку має дві невизначені константи. Тому методика послідовного обчислення квантово-механічного імпедансу набагато простіша в порівнянні з обчисленням хвильової функції, оскільки замість двох умов зшивання ми можемо

використати лише одну. Особливо це ефективно використовувати для багатобар'єрних структур.

Якщо ми визначемо значення для функції квантового імпедансу $Z(x)$ у довільній точці $x=x_0$, тоді її значення в інших точках можна буде визначити за допомогою рівняння (1.4) та відповідної умови зшивання.

1.2 Розв'язок для сталого значення потенціальної енергії

Припустимо, що потенціальна енергія дорівнює U_0 , а загальна енергія частинки дорівнює E . Це один з найпростіших випадків, але в той же час він є дуже важливим і має багато застосувань, особливо в області чисельних розрахунків.

Якщо $U(x)=U_0$, тоді ми можемо розділити змінні у рівнянні (1.4) і отримати наступне рівняння:

$$\frac{i\hbar}{m} \frac{dZ}{Z^2 - z_0^2} = dx \quad (1.5)$$

Де $z_0 = \sqrt{2(E - U_0)/m}$ є характеристичним імпедансом області з сталою потенціальною енергією U_0 . Після інтегрування обох частин попереднього співвідношення отримаємо:

$$\frac{\hbar}{imz_0} \operatorname{arcth} \left(\frac{Z(x)}{z_0} \right) = x + x_0 \quad (1.6)$$

або

$$Z(x) = z_0 \operatorname{th}(\gamma_0 x + \varphi) \quad (1.7)$$

де $\gamma_0 = \frac{imz_0}{\hbar}$ це величина, яка характеризує хвилю, що поширюється в середовищі з характерним імпедансом z_0 , φ – постійна фаза, яка залежить від граничних умов для квантово-механічного імпедансу. Зазвичай γ_0 є комплексною величиною, і тому вводять позначення $k_0 (k_0 = i\gamma_0)$, коли γ_0 є повністю уявним і $\chi_0 (\chi_0 = \gamma_0)$ у випадку, коли γ_0 повністю дійсне.

1.3 Підхід квантово-механічного імпедансу до пошуку власних значень енергії та власних функцій в потенціальній ямі.

Нехай, ми маємо несиметричну потенціальну яму [15] скінченної глибини:

$$U(x) = \begin{cases} U_1 > 0, & x \leq 0 \\ U_2 < 0, & 0 < x < a \\ U_3 > 0, & x > a \end{cases} \quad (1.8)$$

Ми шукатимемо енергії та хвильові функції зв'язаних станів з енергією: $E < \max(U_1, U_3)$

Характеристичні імпеданси для кожної з областей: $z_1 = \frac{\hbar\chi_1}{m}$, $z_2 = \frac{i\hbar k_2}{m}$, $z_3 = \frac{\hbar\chi_3}{m}$. Імпеданс навантаження збігається з характеристичним імпедансом третьої області z_3 . Тоді ми можемо записати вхідний імпеданс в точці $x=0$, на основі добре відомої формули. Далі прирівнюючи його до $-z_1$, легко можна отримати рівняння для визначення енергії зв'язаних станів:

$$-z_1 = z_2 \frac{z_3 \cos(k_2 a) - z_2 \sin(k_2 a)}{z_2 \cos(k_2 a) - z_3 \sin(k_2 a)} = z_2 \frac{z_3 - z_2 \tan(k_2 a)}{z_2 - z_3 \tan(k_2 a)} \quad (1.9)$$

Використавши співвідношення між z_m і k_m , $m=1,2,3$ отримуємо наступну формулу:

$$\tan(k_2 a) = \frac{k_2(\chi_1 + \chi_3)}{\chi_1 \chi_3 - k_2^2} \quad (1.10)$$

Це і є рівняння на власні значення енергії.

Щоб знайти хвильові функції зв'язаних станів у цій системі, потрібно знайти значення $Z^+(x,0,E)$ та $Z^-(x,a,E)$ у другій області потенціалу (1.8). Це легко робиться, оскільки у цій області сталі значення потенціальної енергії.

$$Z^-(x,a,E) = z_2 \tan(ik_2 x + \varphi_R) \quad (1.11)$$

$$Z^+(x,0,E) = z_2 \tan(ik_2 x + \varphi_L) \quad (1.12)$$

$$\begin{aligned}\varphi_R &= -\frac{1}{2} \ln \left(\exp(2ik_2 a) \frac{z_2 - z_3}{z_2 + z_3} \right) = -\frac{1}{2} \ln \left(\exp(2ik_2 a) \frac{k_2 - ik_3}{k_2 + ik_3} \right) \\ \varphi_L &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{z_1 + z_2}{z_2 - z_1} \right) = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{ik_1 + k_2}{k_2 - ik_1} \right)\end{aligned}\quad (1.13)$$

Розклавши в ряд Тейлора $Z^+(x, 0, E_n - i\varepsilon)$, $Z^-(x, a, E_n - i\varepsilon)$ і використавши умову $\varphi_L = \varphi_R = \varphi$ отримуємо квадрат модуля власної функції:

$$|\psi_2(x)|^2 = 2 \left(a + \frac{\chi_1 + \chi_3}{\chi_1 \chi_3} \right)^{-1} \cos^2(k_2 x + \varphi) \quad (1.14)$$

РОЗДІЛ 2.

Обчислення квантово-хвильового імпедансу та квантової ємності для довільного потенціалу

2.1 Обчислення квантово-механічного імпедансу для потенціалу зі складною просторовою структурою

Нехай ми маємо потенціал наступної форми:

$$U(x) = U_0 \theta(x_0 - x) + \sum_{i=1}^N U_i(x) [\theta(x - x_i) - \theta(x - x_{i+1})] + U_{N+1} \theta(x - x_{N+1}) \quad (2.1)$$

де, $\theta(x)$ функція Гевісайда.

Вираз для квантово-механічного імпедансу у загальному випадку в інтервалі $x \in (x_i \dots x_{i+1})$ є наступним:

$$Z_i(x) = \frac{\hbar}{im} \frac{A_i \psi_i'(x) + \varphi_i'(x)}{A_i \psi_i(x) + \varphi_i(x)} \quad (2.2)$$

де, $\psi_i(x)$ і $\varphi_i(x)$ – два лінійно незалежні розв'язки (в інтервалі $x \in (x_i \dots x_{i+1})$) рівняння Шредінгера з Гамільтоніаном:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_i(x) \quad (2.3)$$

Розглянемо перший інтервал $x \in (x_0 \dots x_1)$ з потенціальною енергією $U_1(x)$ і з двома лінійно незалежними розв'язками $\psi_1(x)$ та $\varphi_1(x)$. Тоді:

$$Z(x_1) = \frac{\hbar}{im} \frac{A_1 \psi_1'(x) + \varphi_1'(x)}{A_1 \psi_1(x) + \varphi_1(x)} \quad (2.4)$$

В точці $x = x_0$ ми маємо імпеданс навантаження $Z(x_0) = z_L$:

$$z_L = \frac{\hbar}{im} \frac{A_1 \psi_1'(x_0) + \varphi_1'(x_0)}{A_1 \psi_1(x_0) + \varphi_1(x_0)} \quad (2.5)$$

$$A_1 = \frac{\varphi_1'(x_0) - \gamma_L \varphi_1(x_0)}{\gamma_L \psi_1(x_0) - \psi_1'(x_0)} \quad (2.6)$$

де, $\gamma_L = \frac{im}{\hbar} z_L$. Підставивши останнє рівняння у (2.4) ми отримаємо:

$$Z(x_1) = \frac{\hbar}{im} \frac{f_1^{(x_0, x_1)}(x_0, x_1) - \gamma_L f_1^{(x_1)}(x_0, x_1)}{f_1^{(x_0)}(x_0, x_1) - \gamma_L f_1(x_0, x_1)} \quad (2.7)$$

де $f_1(x_0, x_1) = \varphi_1(x_0) \psi_1(x_1) - \varphi_1(x_1) \psi_1(x_0)$,

$$f_1^{(x_1)}(x_0, x_1) = \frac{\partial}{\partial x_1} f_1(x_0, x_1), \quad f_1^{(x_0)}(x_0, x_1) = \frac{\partial}{\partial x_0} f_1(x_0, x_1),$$

$$f_1^{(x_0, x_1)}(x_0, x_1) = \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{\partial}{\partial x_1} f_1(x_0, x_1) \quad (2.8)$$

Тепер розглянемо другий інтервал $x \in (x_1 \dots x_2)$ з потенціальною енергією $U_2(x)$ і з двома лінійно незалежними розв'язками $\psi_2(x)$ і $\varphi_2(x)$ рівняння Шредінгера. Повторивши попередню процедуру, отримаємо:

$$Z(x_2) = \frac{\hbar}{im} \frac{f_1^{(x_0)} f_2^{(x_1, x_2)} - f_1^{(x_0, x_1)} f_2^{(x_2)} - \gamma_L (f_1 f_2^{(x_1, x_2)} - f_1^{(x_1)} f_2^{(x_2)})}{f_1^{(x_0)} f_2^{(x_1)} - f_1^{(x_0, x_1)} f_2 - \gamma_L (f_1 f_2^{(x_1)} - f_1^{(x_1)} f_2)} \quad (2.9)$$

де

$$f_2(x_1, x_2) = \varphi_2(x_1) \psi_2(x_2) - \varphi_2(x_2) \psi_2(x_1), \quad (2.10)$$

Введемо функцію $F(x_0, x_1, x_2) = \tilde{f}_1(x_0, x_1) \tilde{f}_2(x_1, x_2)$, де $\tilde{f}_j(x_{j-1}, x_j)$ визначається наступним чином:

$$\tilde{f}_j(x_{j-1}, x_j) = f_j(x_{j-1}, x_j) - 2f_j(x_{j-1}, \tilde{x}_j) \Big|_{\tilde{x}_j=x_j}$$

для якої: $\tilde{f}_j^{(x_{j-1})}(x_{j-1}, x_j) = -f_j^{(x_{j-1})}(x_{j-1}, x_j)$, $\tilde{f}_j^{(x_j)}(x_{j-1}, x_j) = f_j^{(x_j)}(x_{j-1}, x_j)$

$$\tilde{f}_j^{(x_{j-1}, x_j)}(x_{j-1}, x_j) = -f_j^{(x_{j-1}, x_j)}(x_{j-1}, x_j) \quad (2.11)$$

Тоді ми отримаємо:

$$Z(x_2) = \frac{\hbar}{im} \frac{F^{(x_0, x_1, x_2)}(x_0, x_1, x_2) + \gamma_L F^{(x_1, x_2)}(x_0, x_1, x_2)}{F^{(x_0, x_1)}(x_0, x_1, x_2) + \gamma_L F^{(x_1)}(x_0, x_1, x_2)} \quad (2.12)$$

Якщо ми повторимо цю процедуру ще N разів, то отримаємо вираз [16] для імпедансу в точці $x = x_N$:

$$Z(x_N) = \frac{\hbar}{im} \frac{F^{(x_0, \dots, x_N)}(x_0, \dots, x_N) + \gamma_L F^{(x_1, \dots, x_N)}(x_0, \dots, x_N)}{F^{(x_0, \dots, x_{N-1})}(x_0, \dots, x_N) + \gamma_L F^{(x_1, \dots, x_{N-1})}(x_0, \dots, x_N)}$$

де $F^{(x_0, \dots, x_N)}(x_0, \dots, x_N) = \tilde{f}_1(x_0, x_1) \dots \tilde{f}_N(x_{N-1}, x_N)$

2.2 Квантова ємність

Згідно з визначенням, квантова ємність обчислюється за такою формулою:

$$C_q = e^2 \frac{\partial n}{\partial \mu} \quad (2.13)$$

де n – 2D концентрація електронів, μ – електрохімічний потенціал і e заряд електрона. Розглянемо лише випадок температур рівних нулю ($T=0$).

$$n = \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{j=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x \int_{-\infty}^{+\infty} dk_y \theta \left(\mu - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} - E_j \right)$$

де k_x і k_y компоненти хвильового вектора \bar{k} , які є у x - y площині, m^* – ефективна маса електрона, E_j – значення енергій зв'язаних станів електрона у системі, яка розглядається. Виконавши перехід до полярної системи координат, отримаємо:

$$n = \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^N \int_0^{\sqrt{2m^*(\mu-E_j)/\hbar}} k dk \theta \left(\mu - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} - E_j \right) \quad (2.14)$$

Після інтегрування будемо мати:

$$n = \sum_{j=1}^N \frac{m^*(\mu - E_j)}{\pi \hbar^2} \theta(\mu - E_j) \quad (2.15)$$

Тоді квантову ємність будемо обчислювати за такою формулою:

$$C_q = e^2 \frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{m^* e^2}{\pi \hbar^2} \sum_{j=1}^N \theta(\mu - E_j) \quad (2.16)$$

РОЗДІЛ 3.

Результати обчислення квантової ємності для подвійної системи трикутних потенціальних ям

3.1 Знаходження власних значень енергії.

Для виконання цього завдання ми скористаємось результатами які отримали раніше.

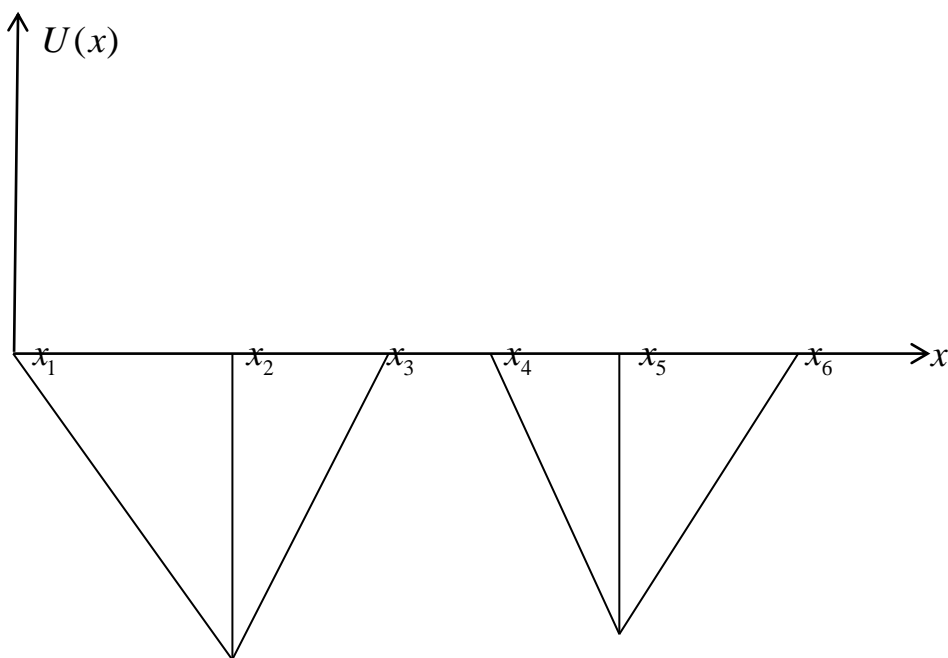
Нехай ми маємо потенціальний бар'єр наступного вигляду:

$$U(x) = U_1(x)[\theta(x_2) - \theta(x_1)] + U_2(x)[\theta(x_3) - \theta(x_2)] + U_3(x)[\theta(x_4) - \theta(x_3)] + U_4(x)[\theta(x_5) - \theta(x_4)] + U_5(x)[\theta(x_6) - \theta(x_5)] \quad (3.1)$$

де $U_1(x) = C_1(x - x_1)$, $U_2(x) = C_2(x - x_3)$, $U_3(x) = C_3 = 0$

$$U_4(x) = C_4(x - x_4), \quad U_5(x) = C_5(x - x_6),$$

$$U_4(x) = C_4(x - x_4), \quad U_5(x) = C_5(x - x_6), \quad (3.2)$$



Умови зшивання потенціалів в точках: x_2 і x_5 :

$$U_1(x_2) = U_2(x_2) \Rightarrow C_1(x_2 - x_1) = C_2(x_2 - x_3) \Rightarrow x_2 = \frac{C_1 x_1 - C_2 x_3}{C_1 - C_2},$$

$$U_4(x_5) = U_5(x_5) \Rightarrow C_4(x_5 - x_4) = C_5(x_5 - x_6) \Rightarrow x_5 = \frac{C_4 x_4 - C_5 x_6}{C_4 - C_5}$$

Запишемо по два лінійних незалежних розв'язки рівняння Шредінгера для кожної з областей потенціалу:

$$\psi_i = Ai(k_i(x - x_j) + b_i), \quad \varphi_i = Bi(k_i(x - x_j) + b_i),$$

$$k_i = \sqrt[3]{C_i}, \quad b_i = -\frac{E}{\sqrt[3]{C_i}}, \quad i = 1, 2, 4, 5$$

$$\psi_3 = A_3 \exp(ik(x - x_3)), \quad \varphi_3 = B_3 \exp(-ik(x - x_3)),$$

$Ai(x)$ і $Bi(x)$ – функції Ейрі. Далі запишемо перші похідні цих розв'язків:

$$\psi'_i(x) = \frac{k_i(x - x_j) + b_i}{3} \left\{ I_{2/3} \left(\frac{2}{3} (k_i(x - x_j) + b_i)^{\frac{3}{2}} \right) - I_{-2/3} \left(\frac{2}{3} (k_i(x - x_j) + b_i)^{\frac{3}{2}} \right) \right\} \quad (3.3)$$

$$\varphi'_i(x) = \frac{k_i(x - x_j) + b_i}{\sqrt{3}} \left\{ I_{2/3} \left(\frac{2}{3} (k_i(x - x_j) + b_i)^{\frac{3}{2}} \right) + I_{-2/3} \left(\frac{2}{3} (k_i(x - x_j) + b_i)^{\frac{3}{2}} \right) \right\} \quad (3.4)$$

де $i=1,2,4,5$; $j=1-6$; $I_{2/3}(x)$ і $I_{-2/3}(x)$ – модифіковані функції Бесселя.

$$\psi'_3 = A_3 ik \exp(ik(x - x_3)), \quad \varphi'_3 = -B_3 ik \exp(-ik(x - x_3)), \quad (3.5)$$

Тепер на основі результатів отриманих у попередньому розділі сконструюємо наступну функцію:

$$F(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = \tilde{f}_1(x_1, x_2) \tilde{f}_2(x_2, x_3) \tilde{f}_3(x_3, x_4) \tilde{f}_4(x_4, x_5) \tilde{f}_5(x_5, x_6) \quad (3.6)$$

Зв'язок між функціями $\tilde{f}_j(x_j, x_{j+1})$ і $f_j(x_j, x_{j+1})$ задається співвідношеннями (2.11), також потрібно врахувати, що

$$f_j^{(x_i)}(x_j, x_{j+1}) = 0, \quad (i \neq j) \wedge (i \neq j+1),$$

$$\text{де } f_j(x_j, x_{j+1}) = \varphi_j(x_j) \psi_j(x_{j+1}) - \varphi_j(x_{j+1}) \psi_j(x_j)$$

Наступним кроком запишемо квантово-механічний імпеданс у точці $x = x_6$, аналогічно формулі (2.12)

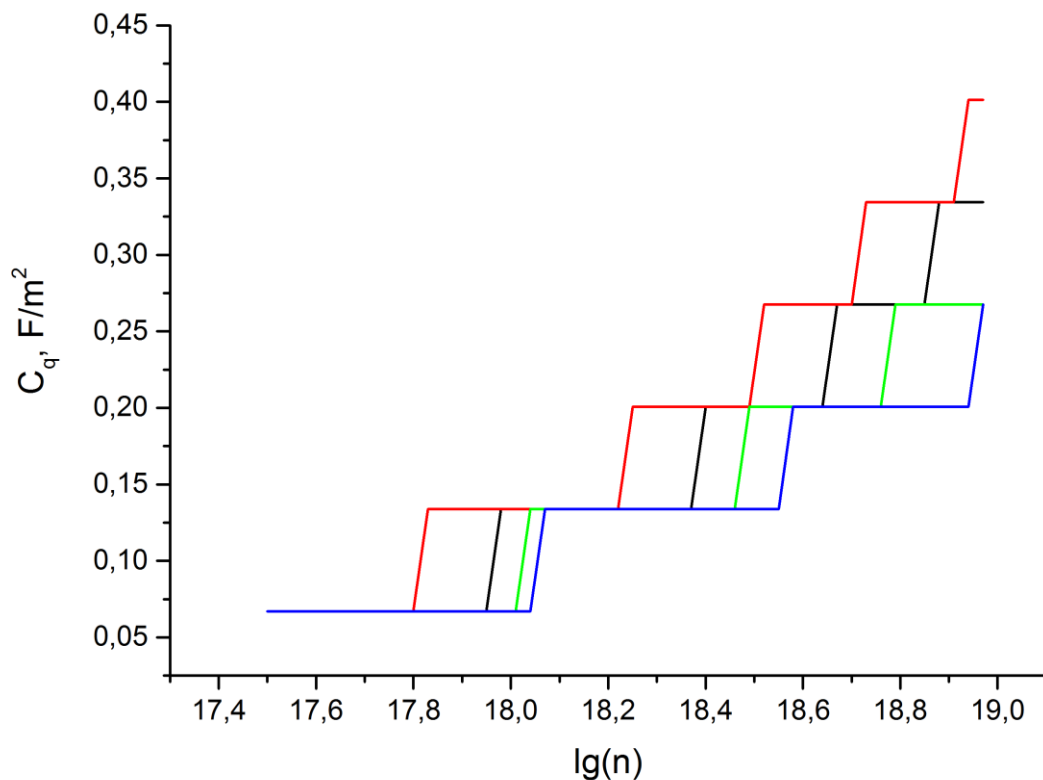
$$Z(x_6) = \frac{\hbar}{im} \frac{F^{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) + \gamma_L F^{(x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)}{F^{(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) + \gamma_L F^{(x_2, x_3, x_4, x_5)}(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)}$$

Для знаходження власних значень енергії необхідно прирівняти квантово-механічний імпеданс у точці $x = x_6$ до характеристичного імпедансу останньої області: z_6 .

3.2 Обчислення квантової ємності

Формула $n = \sum_{j=1}^N \frac{m^*(\mu - E_j)}{\pi \hbar^2} \theta(\mu - E_j)$ є умовою для визначення хімічного

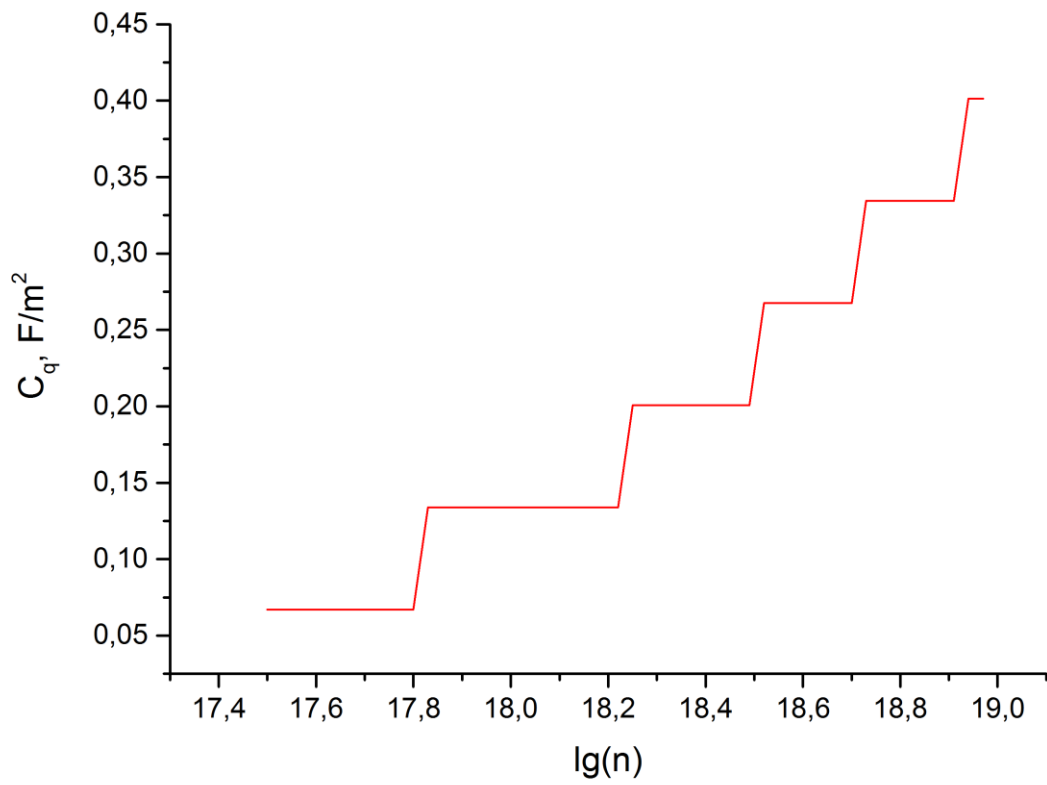
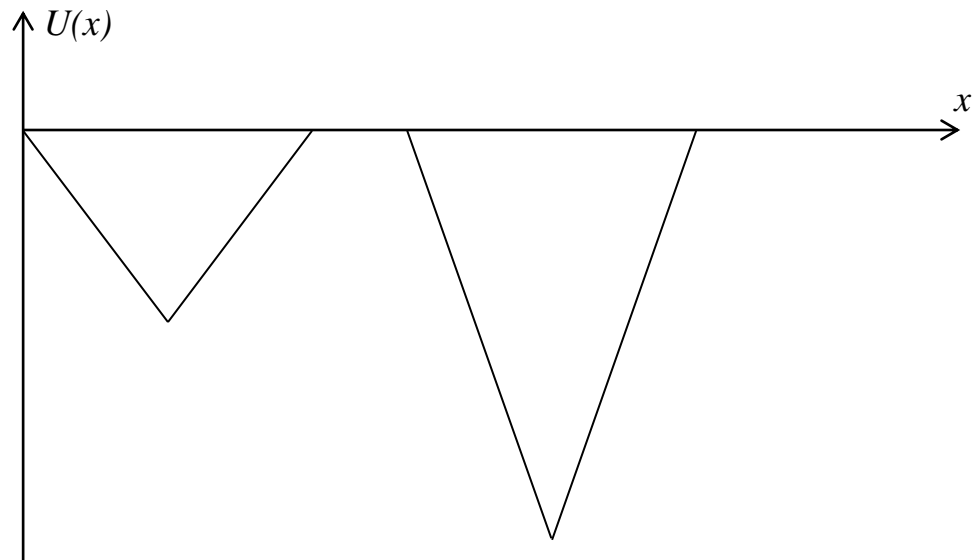
потенціалу. Після знаходження власних енергій потенціалу за формулами попереднього пункту ми можемо за допомогою формули (2.16) визначити квантову ємність для подвійної системи трикутних потенціальних ям з різними характеристиками.



1) Червоний графік:

$$C_1 = -1 \cdot 10^{-9}, C_2 = 1 \cdot 10^{-9}, C_3 = -2 \cdot 10^{-9}, C_4 = 2 \cdot 10^{-9}$$

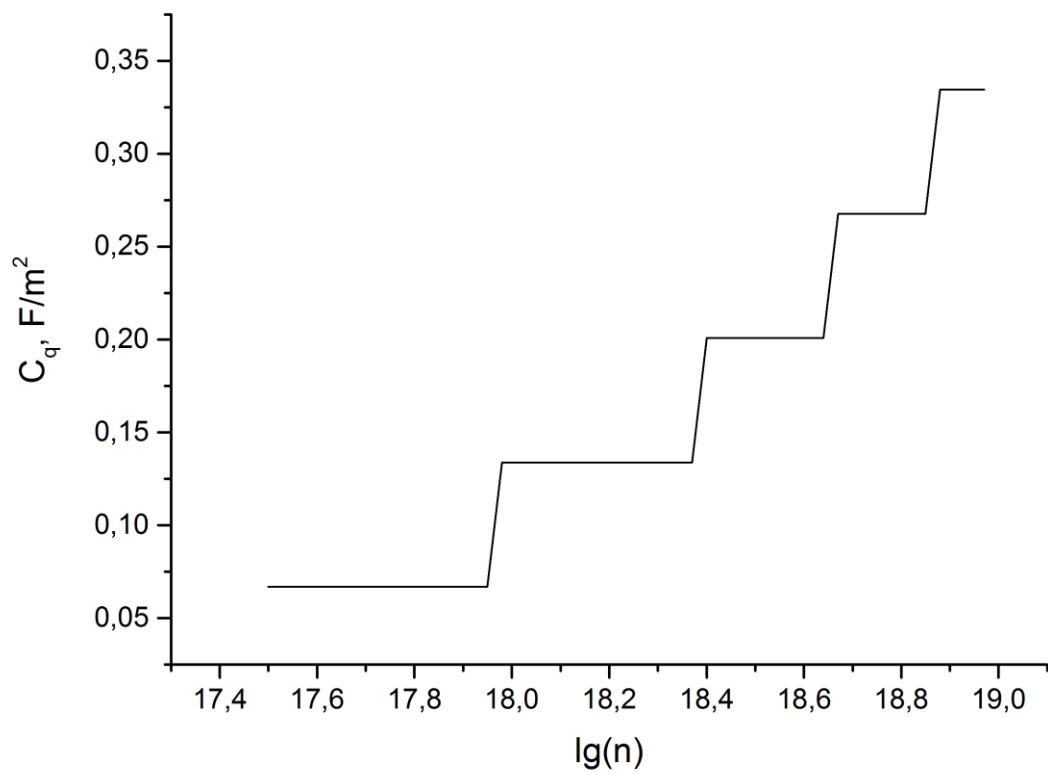
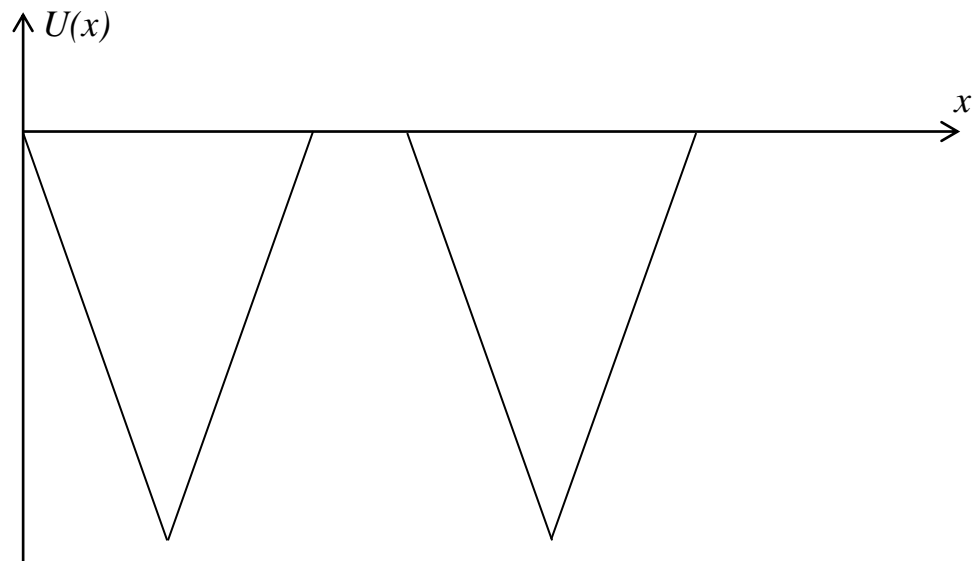
$$x_1 = 0 \text{ nm}, x_3 = 10 \text{ nm}, x_4 = 12 \text{ nm}, x_2 = 22 \text{ nm}$$



2) Чорний графік

$$C_1 = -2 \cdot 10^{-9}, C_2 = 2 \cdot 10^{-9}, C_3 = -2 \cdot 10^{-9}, C_4 = 2 \cdot 10^{-9}$$

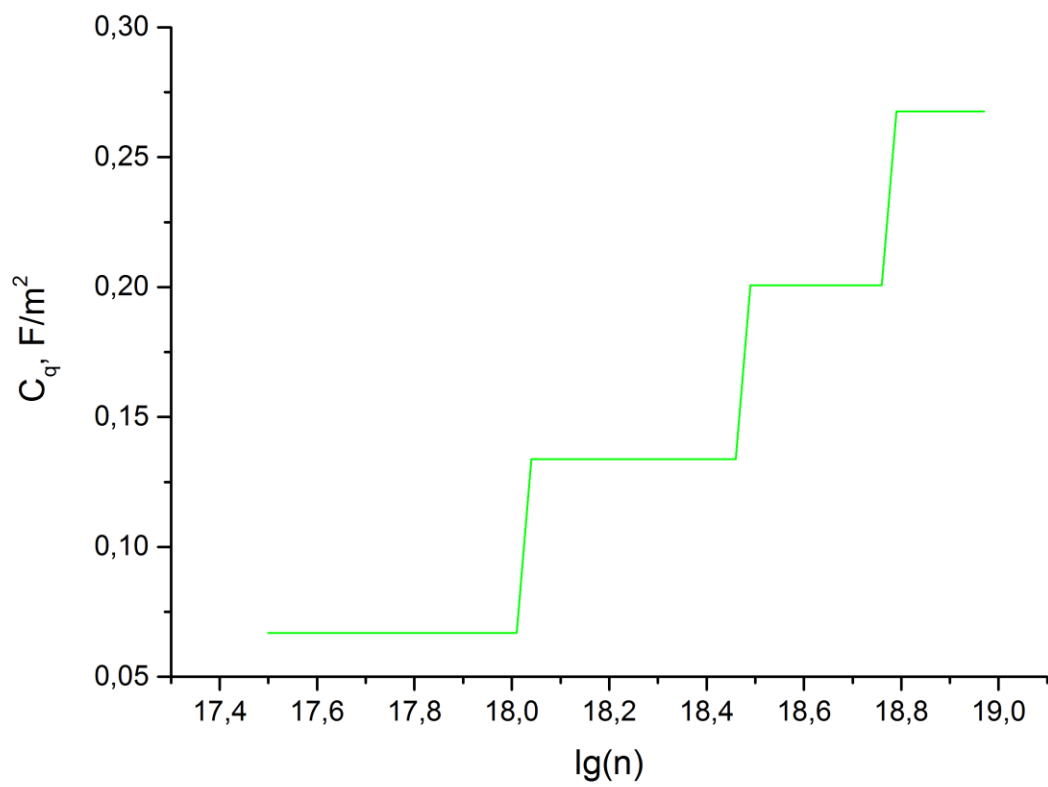
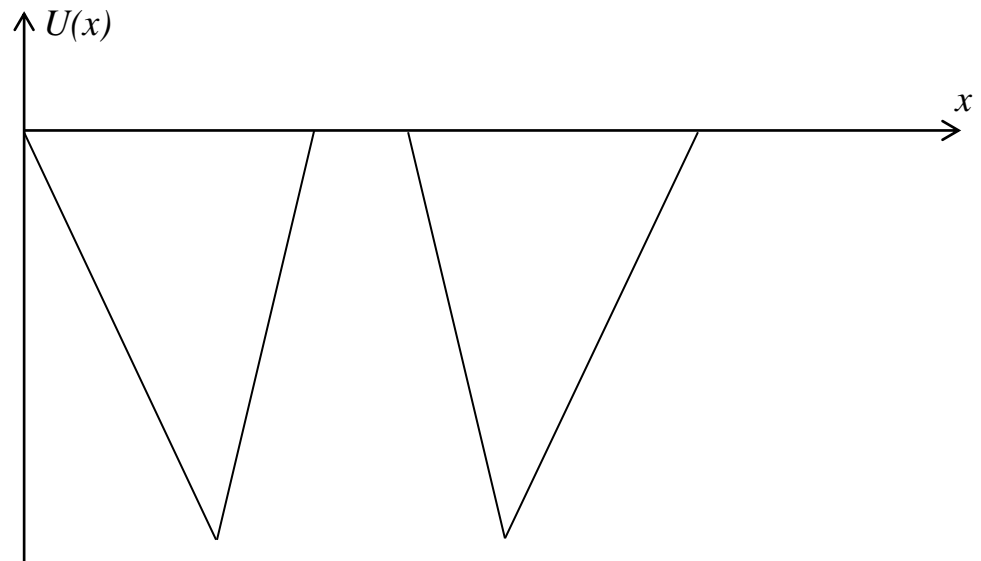
$$x_1 = 0 \text{ nm}, x_3 = 10 \text{ nm}, x_4 = 12 \text{ nm}, x_2 = 22 \text{ nm}$$



3) Зелений графік

$$C_1 = -1 \cdot 10^{-9}, C_2 = 2 \cdot 10^{-9}, C_3 = -2 \cdot 10^{-9}, C_4 = 1 \cdot 10^{-9}$$

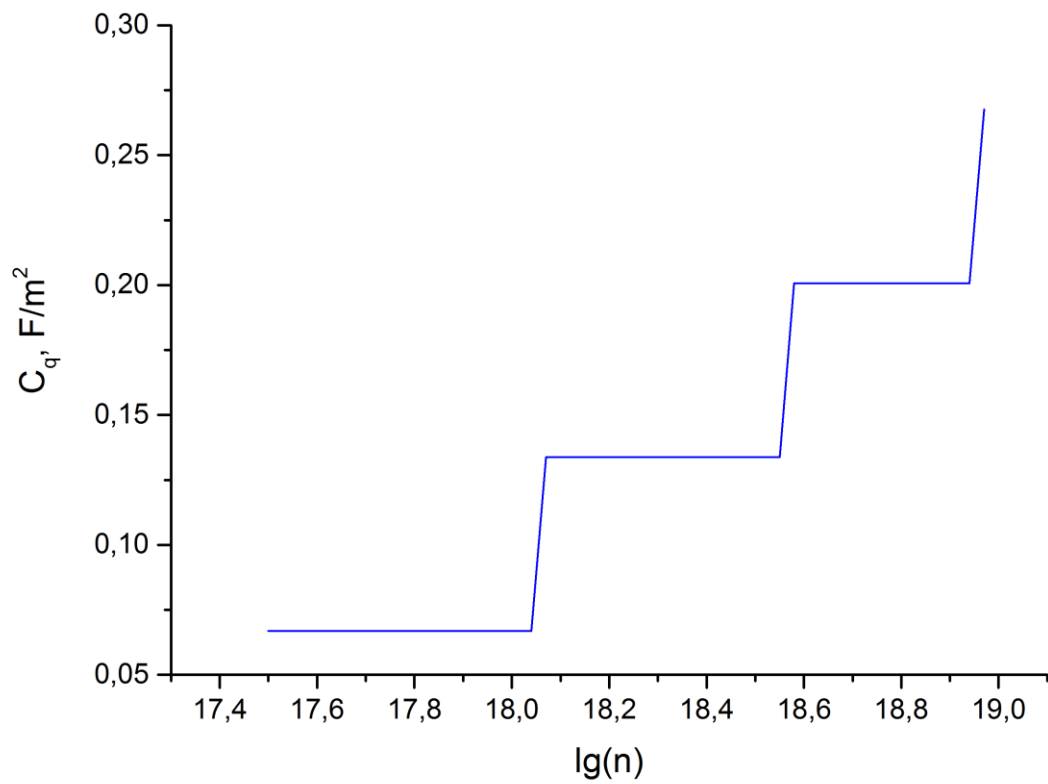
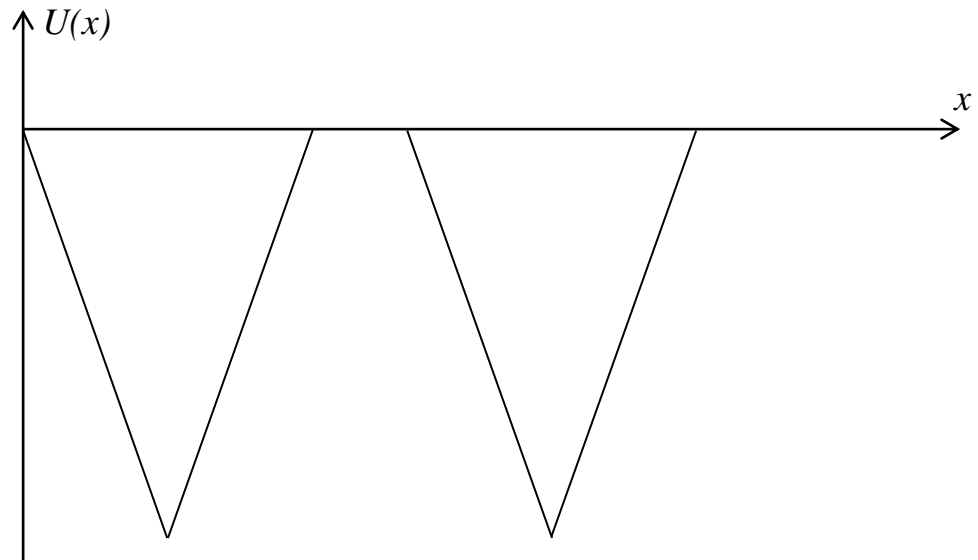
$$x_1 = 0 \text{ nm}, x_3 = 10 \text{ nm}, x_4 = 12 \text{ nm}, x_2 = 22 \text{ nm}$$



4) Синій графік

$$C_1 = -2 \cdot 10^{-9}, C_2 = 2 \cdot 10^{-9}, C_3 = -2 \cdot 10^{-9}, C_4 = 2 \cdot 10^{-9}$$

$$x_1 = 0 \text{ nm}, x_3 = 5 \text{ nm}, x_4 = 6 \text{ nm}, x_2 = 11 \text{ nm}$$



ВИСНОВКИ

Стационарне рівняння Шредінгера для потенціалів зі складною геометрією чисельно можна розв'язувати різними способами, але одним із найбільш ефективних є підхід квантово-механічного імпедансу, зокрема тому, що він зменшує кількість умов зшивання вдвічі.

В цій роботі ми розглянули поетапний метод знаходження власних значень енергій для системи подвійних трикутних потенціальних ям методом квантово-механічного імпедансу. Знайдені власні значення енергії були використані для обчислення квантової ємності.

За допомогою комп'ютерного забезпечення була встановлена залежність квантової ємності від логарифма концентрації електронів для подвійної системи трикутних потенціальних ям при температурі абсолютного нуля ($T=0$), при різних параметрах цих ям.

Потенціали зі складною просторовою структурою зустрічаються у наногетероструктурах. У таких системах зазвичай ми стикаємось з різними формами потенціальних ям, які впливають на значення квантової ємності і як результат, на загальну поведінку наносистем. Маючи ефективний метод прогнозування квантової ємності для структур зі складною геометрією потенціалу, ми можемо проектувати структури нанометрового розміру такі, щоб квантова ємність була максимальною, оскільки вона включена послідовно до геометричної (Гельмгольцівської) ємності системи і спричинює її шунтування.

Список використаних джерел

- [1] Ando Yu. Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers / Yu. Ando, T. Itoh // *J. Appl. Phys.* ”— 1987. ”— Vol. 61. ”— P. 1497–1502.
- [2] Griffiths David J. Waves in locally periodic media / David J. Griffiths, Carl A. Steinke // *Am. J. Phys.* ”— 2001. ”— Vol. 69. ”— P. 137–154.
- [3] Pereyra Pedro. Theory of finite periodic systems: General expressions and various simple and illustrative examples / Pedro Pereyra, Edith Castillo // *Phys. Rev. B.* ”— 2002. ”— Vol. 65. ”— P. 205120(1)–205120(26).
- [4] The transfer matrix: A geometrical perspective / Luis L. S´anchez-Soto, Juan J. Monz´on, Alberto G. Barriuso, Jos´e F. Cariñena // *Phys. Rep.* ”— 2012. ”— Vol. 513. ”— P. 191–227.
- [5] Harwit A. Harris J. S. Calculated quasieigenstates and quasieigenenergies of quantum well superlattices in an applied electric field / J. S. Harwit, A. Harris, A. Kapitulnik // *J. Appl. Phys.* ”— 1986. ”— Vol. 60. ”— P. 3211–3213.
- [6] Capasso F. Sequential resonant tunneling through a multiquantum well superlattice / F. Capasso, K. Mohammed, A. Y. Cho // *Appl. Phys. Lett.* ”— 1986. ”— Vol. 48. ”— P. 478–480.
- [7] Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures / D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen [et al.] // *Phys. Rev. B.* ”— 1985. ”— Vol. 32, No. 2. ”— P. 1043–1060.
- [8] Zhou P. Finite Difference Method / P. Zhou // *Numerical Analysis of Electromagnetic Fields. Electric Energy Systems and Engineering Series.* ”— Heidelberg : Springer, 1993. ”— P. 427.
- [9] Grossmann C. Finite Difference Method / C. Grossmann, H.-G. Roos, M. Stynes // *Numerical Treatment Equations.* ”— Heidelberg : Springer, 2007. ”— P. 601.
- [10] Kabir S. M. F. Application of quantum mechanical wave impedance in the solution of Schrodinger’s equation in quantum wells / S. M. F. Kabir, M. R. Khan, Alam M. A. // *Appl. Phys. Lett.* ”— 1991. ”— Vol. 34, No. 12. ”— P. 1466–1468.
- [11] Nelin E. A. Numeral Hilbert transform for crystal-like structures / E. A. Nelin, V. O. Imamov // *Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud.* ”— 2010. ”— Vol. 41. ”— P. 80–82.
- [12] Babushkin A.M. Computer simulation of quantum-size structures in the matlab environment / A.M. Babushkin, E.A. Nelin // *Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud.* ”— 2011. ”— Vol. 46. ”— P. 159–163.
- [13] Ashby A. The study of modeled atomtronic barrier potentials through the impedance method : Master of science / Faculty of the Graduate School of the University of Colorado. ”— Colorado, 2016. ”— 190 p.

- [14] Hryhorchak O. I. Quantum wave impedance calculation for an arbitrary piecewise constant potential / O. I. Hryhorchak // arXiv:2010.06263. ”— 2020. ”— P. 1–11.
- [15] Hryhorchak O. I. An application of a quantum wave impedance approach for solving a nonsymmetric single well problem / O. I. Hryhorchak // arXiv:2010.05583. ”— 2020. ”— P. 1–10.
- [16] Hryhorchak O. I. Effective technique of numerical investigation of systems with complicated geometry of a potential / O. I. Hryhorchak // arXiv:2010.09372. ”— 2020. ”— P. 1–11.
- [17] Hryhorchak O. I. Application of a quantum wave impedance approach for a quantum capacitance calculation / O. I. Hryhorchak // arXiv:2010.11480. ”— 2020. ”— P. 1–11.
- [18] Calecki D. Palmier J. F. Hopping conduction in multiquantum well structures / J. F. Calecki, D. Palmier, A. Chomette // Journ.of Phys. C: Sol. Stat. Phys. ”— 1984. ”— Vol. 17, No. 28. ”— P. 5017–5030.
- [19] Tsu R. Hopping conduction in a “superlattice” / R. Tsu, G. Döhler // Phys. Rev. B. ”— 1975. ”— Vol. 12, No. 2. ”— P. 680–686.
- [20] Lui W. W. Exact solution of the Schrodinger equation across an arbitrary one-dimensional piecewise-linear potential barrier / W. W. Lui, M. Fukuma // Journ. of Appl. Phys. ”— 1986. ”— Vol. 60. ”— P. 1555–1559.
- [21] Vodolazka M. V. Resonance filtration by two-phase resonators / M. V. Vodolazka, A. P. Tolstenkova, Nelin E. A. // Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud. ”— 2014. ”— Vol. 57. ”— P. 113–120.
- [22] Hryhorchak O. I. Numerical study of quantum mechanical systems using a quantum wave impedance approach / O. I. Hryhorchak // arXiv:2010.08247. ”— 2020. ”— P. 1–18.
- [23] Vodolazka M. V. Resonance filtration by two-phase resonators / M. V. Vodolazka, A. P. Tolstenkova, Nelin E. A. // Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud. ”— 2014. ”— Vol. 57. ”— P. 113–120.
- [24] Nelin E. A. Numeral Hilbert transform for crystal-like structures / E. A. Nelin, V. O. Imamov // Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud. ”— 2010. ”— Vol. 41. ”— P. 80–82.
- [25] Kabir S. M. F. Application of quantum mechanical wave impedance in the solution of Schrodinger’s equation in quantum wells / S. M. F. Kabir, M. R. Khan, Alam M. A. // Appl. Phys. Lett. ”— 1991. ”— Vol. 34, No. 12. ”— P. 1466–1468.
- [26] Babushkin A.M. Computer simulation of quantum-size structures in the matlab environment / A.M. Babushkin, E.A. Nelin // Visn. NTUU KPI Ser. - Radiotekh. Radioaparotobud. ”— 2011. ”— Vol. 46. ”— P. 159–163.

- [27] Ashby A. The study of modeled atomtronic barrier potentials through the impedance method : Master of science / Faculty of the Graduate School of the University of Colorado. ”— Colorado, 2016. ”— 190 p.
- [28] MacKinnon A. Theory of some nano-electro-mechanical systems / A. MacKinnon // Phys. E. ”— 2005. ”— Vol. 29. ”— P. 399–410.
- [29] Quantum logic gates based on coherent electron transport in quantum wires / A. Bertoni, P. Bordone, R. Brunetti [et al.] // Phys. Rev. Lett. ”— 2000. ”— Vol. 84, No. 25. ”— P. 5912–5915.
- [30] Luryi S. Quantum capacitance devices / S. Luryi // Sol.-Stat. Electr. ”— 1988. ”— Vol. 52, No. 6. ”— P. 501–503.
- [31] Luryi S. Comment on “quantum capacitance of resonant tunneling diodes” / S. Luryi // Appl. Phys. Lett. ”— 1991. ”— Vol. 59, No. 18. ”— P. 2335–2356.
- [32] Theory of ballistic nanotransistors / Anisur Rahman, Jing Guo, Supriyo Datta, Mark S. Lundstrom // IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES. ”— 2003. ”— Vol. 50, No. 9. ”— P. 1853–1864.
- [33] Burke P. J. An rf circuit model for carbon nanotubes / P. J. Burke // IEEE TRANSACTIONS ON NANOTECHNOLOGY. ”— 2003. ”— Vol. 2, No. 1. ”— P. 55–58.
- [34] Johna D. L. Quantum capacitance in nanoscale device modeling / D. L. Johna, L. C. Castro, D. L. Pulfrey // J. Appl. Phys. ”— 2004. ”— Vol. 96, No. 9. ”— P. 5180–5184.