

До питання струмоутворення в наноструктурних об'єктах

З. Готра¹, Б. Яцишин², М. Вісьтак³

¹Національний університет «Львівська політехніка», ²Львівська комерційна Академія
³Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Abstract: Electronic states in W-like potential are investigated. Correlation of obtained results with current in the phenomenon of current generation in nanostructured objects is considered.

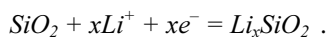
Keywords: nanostructures, electronic states, current generation.

Постановка задачі. Останнім часом спостерігаються інтенсивні як теоретичні, так і експериментальні дослідження в галузі нової технології – нанотехнології. На противагу від традиційної, вона оперує з матеріалами та системами, розміри яких хоч би в одному напрямі були від одного до сотень нанометрів. Створення таких матеріалів супутне зі зміною їхніх фізичних та хімічних властивостей на молекулярному рівні, дуже часто унікальних, привабливих для їх практичного застосування. Прикладом може служити застосування високоемних накопичувачів енергії, суперконденсаторів.

Глибоке розуміння процесів, що мають місце в наноструктурованих об'єктах, вимагає як теоретичних, так і експериментальних досліджень. Важливу роль у досягненні цього належить фізичним дослідженням. Поза сумнівом, нанооб'єкт для свого теоретичного опису потребує квантово-механічного підходу, тобто розв'язку рівняння Шредінгера, який дає вичерпну інформацію про поведінку електрона.

Проблема підвищення енерговіддачі одиниці маси і об'єму речовини є особливо актуальною. Бурхливий розвиток нанотехнологій є ефективним способом розв'язку такої проблеми шляхом переходу до нанорозмірних частинок катодно-активного матеріалу в Li+ інтеркаляційних струмоутворюючих реакціях.

Огляд літератури. В роботі [1] досліджувалась струмоутворююча реакція в нанорозмірному діоксиді кремнію, механізм якої описується рівнянням



Були отримані неординарні результати, зокрема, залежності протікання реакції від розмірів нанодисперсного діоксиду кремнію.

Питання струмоутворюючих реакцій була предметом теоретичного аналізу робіт [2,3]. Розглядалася нанопора з модельним прямокутним потенціалом у вигляді кільця кругового або еліптичного перетину і струмоутворююча реакція ній як явище резонансного тунелювання. Отримані результати виявили неординарну поведінку явища в залежності від як геометричних, так і енергетичних характеристик самої пори і бомбардуючого електрона. Приймаючи роль віртуальних електронних станів в двобар'єрній системі, залишається актуальною задачею дослідження віртуальних станів у випадку інших, більш реальних потенціалів, що моделюють наноструктури.

Основний матеріал. Метою даної роботи є дослідження поведінки основного і першого збудженого станів електрона в наноструктурі з модельним одновимірним W-подібним потенціалом, аналітичний вигляд якого є

$$V(x) = -bx^2 + (x-a)^4. \quad (1)$$

Тут a, b деякі параметри, зміною величин яких можна моделювати як взаємне розташування ям (мінімумів), їхньої ширини, так і амплітуд W-подібного потенціалу. В цьому можна переконатися з Рис. 1, де представлений, з одного боку, потенціал (1) при однакових значеннях параметра b ($b=1$) та різних a ($a = 0$ для $V1(x)$ та $a = 0.1$ для $V2(x)$), а з іншого, при однакових значеннях параметра a ($a = 0.2$) та різних b ($b=1$ для $V1(x)$ та $b=3$ для $V2(x)$).

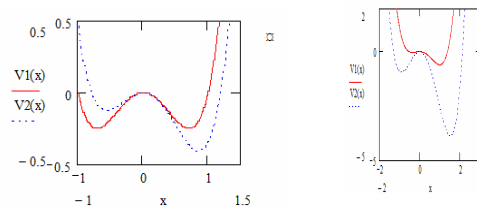


Рис.1. Потенціал (1) при : 1) однакових значеннях параметра b ($b=1$) та різних a ($a = 0$ для $V1(x)$ та $a = 0.1$ для $V2(x)$) і 2) однакових значеннях параметра a ($a = 0.2$) та різних значеннях параметра $b=1$ для $V1(x)$ та $b=3$ для $V2(x)$

Рис.1 представляє поверхню $V(x, a)$ при фіксованому значенні $b = 1$.

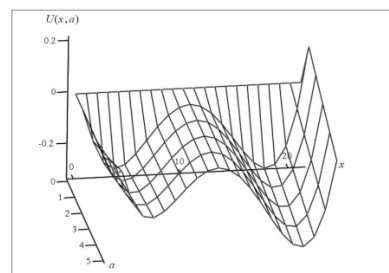


Рис. 2. Модельний потенціал при різних значеннях параметра a та при $b = 1$ (в умовних одиницях)

Для отримання електронних основного E_1 і першого збудженого станів E_2 в нанооб'єкті, що описується потенціалом (1), скористаємося варіаційною процедурою в стаціонарному рівнянні Шредінгера.

а) Основний стан

Виберемо варіаційну функцію у вигляді [4]

$$\psi_1(x, \alpha) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right), \quad (2)$$

де α – варіаційний параметр.

Знаходження основного стану зводиться до використання нерівності

$$E_1 < J_1(\alpha), \text{ де } J_1(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x, \alpha) \hat{H} \psi_1(x, \alpha) dx$$

Відповідно E_1 знаходиться мінімальним значенням $J_1(\alpha)$, яке досягається варіацією $J_1(\alpha)$ по α . Після підстановки (2) в (3) і певних перетворень, обмежившись потенціалом (1) зі значенням параметра $b = 1$, отримаємо вираз, де всі інтеграли можуть бути приведені до елементарних інтегралів або до інтеграла Пуассона. Остаточно отримаємо

$$J_1(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m} + \left(3a^2 + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{\alpha} + \frac{3}{4\alpha^2} + a^4. \quad (4)$$

Умова екстремуму $\partial J_1(\alpha) / \partial \alpha = 0$ приводить до кубічного рівняння відносно α :

$$\alpha^3 - B \left(3a^2 - \frac{1}{2}\right) \alpha - 3B = 0 \quad (5)$$

де $B = 4m / \hbar^2$.

Розв'язки такого рівняння можуть бути представлені формулами Кардано, а саме

$$\alpha_1 = A + C, \quad \alpha_{2,3} = -\frac{A+C}{2} \pm i \frac{A-C}{2} \sqrt{3}$$

$$\text{Тут } A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}, \quad C = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}$$

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{3}\right)^2, \quad p = B \left(\frac{1}{2} - 3a^2\right), \quad q = -3B$$

б) Перший збуджений стан

Скористаємося найпростішою пробною хвильовою функцією [4]

$$\psi_2(x, \beta) = R x \exp\left(-\frac{\beta x^2}{2}\right) \quad (6)$$

де константа R може бути визначена з умови ортогональності такої функції і хвильової функції основного стану. При цьому.

Порахуємо інтеграл

$$J_2(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(x, \beta) \hat{H} \psi_2(x, \beta) dx,$$

який є верхньою межею 1-го збудженого стану.

В результаті отримаємо

$$J_2(\beta) = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \beta}{2m} + \left(3a^2 + \frac{1}{2}\right) \frac{3}{\beta} + \frac{15}{4\beta^2} + a^4$$

Рівняння на визначення підозрілих на екстремум точок у позначеннях, прийнятих вище, має вигляд:

$$\beta^3 - B \left(3a^2 - \frac{1}{2}\right) \beta - \frac{5}{2} B = 0$$

тобто, як і вище, це кубічне рівняння.

Проаналізуємо ці два найнижчих електронних рівні залежно від параметра потенційної ями при фіксованих значеннях параметра

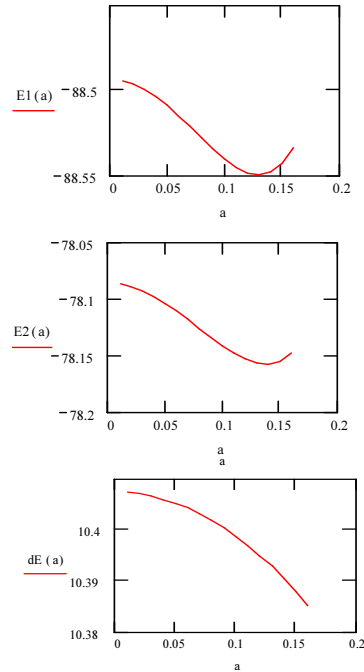


Рис.3. Залежності основного, першого збудженого станів та різниці між ними від параметра a при фіксованому параметрі b ($b=1$)

Висновки. З аналізу кривих на рис.3 можна зробити наступні висновки:

- E_1, E_2 як функції a в інтервалі $a \in [0, 0.16]$ E_1, E_2 володіють немонотонною залежністю. Єдині їх екстремальні значення α – E_1 мінімуми – досягаються при різних α – E_1 та при менших значеннях E_2 .

- З іншого боку різниця між $E_2 - E_1$, в досліджуваній області α є монотонно падаючою функцією. З немонотонного характеру як функції впливає висновок, що зближення мінімумів потенціалу системи та їх поглиблення, супроводжуючі збільшення, мають протилежний характер. Тому, якщо розглядати систему наночасток, що характеризуються різними α , то така поведінка рівнів буде по різному, інколи полярно протилежно, проявлятися на струмоутворенні.

[1]. Миронюк І. Ф., Лобанов В. В., Остафійчук Б. К., Мандзюк В. І., Григорчак І. І., Яблонь Л. С. Про можливість проникнення літію у структурні канали кристалічних модифікацій диоксиду кремнію // Фіз. і хімія тв. тіла. – 2001. – Т. 2. – № 4. – С. 653 – 660

[2]. B.A. Lukiyants, D.V. Matulka, I.I. Grygorchak. Quantum mechanic tunnelling and efficiency of faraday current-generating process in porous nanostructures// Condensed Matter Physics. – 2010. - Vol. 13, No 1. - P. 1–13.

[3]. Bogdan Lukiyants, Dariya Matulka and Ivan Grygorchak. Current Generation in Double-Matrix Structure: A Theoretical Simulation // Nanotechnology and Nanomaterials. – 2013. – Vol. 3. – Art. 8. – P. 1 – 8.

[4]. Давыдов А. С. Квантовая механика. – М.: "Наука", 1973. – 648 с.