

## МОДЕЛЮВАННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ЕЛЕКТРОНІВ В ЕЛІПТИЧНИХ НАНОТРУБКАХ РІЗНОЇ ФОРМИ

**Головацький Володимир Анатолійович, Ярема Валентин Васильович**

*Кафедра термоелектрики та медичної фізики,*

*Чернівецький національний університет, Чернівці, v.holovatsky@chnu.edu.ua*

Квантові нанотрубки з еліптичною симетрією привертають значну увагу завдяки своїм унікальним електронним властивостям та можливості створення наноприладів з анізотропними поляризаційними ефектами. Для проектування таких пристроїв необхідно точно визначити енергетичний спектр квазічастинок, що досягається шляхом розв'язання рівняння Шредінгера. Аналітичні розв'язки цієї задачі можливі лише для окремих геометричних конфігурацій, зокрема для циліндричних або еліптичних квантових дротів [1] і нанотрубок. У випадку нанотрубок, які мають зовнішню еліптичну та внутрішню циліндричну поверхні, отримати точний аналітичний розв'язок неможливо. У таких випадках доцільно використовувати чисельні методи, зокрема метод скінченних елементів. За допомогою цього методу чисельні розв'язки рівняння Шредінгера можуть бути отримані в середовищі COMSOL Multiphysics [1]. У даній роботі виконано розрахунок енергій електрона для кількох найнижчих енергетичних підзон (за умови  $k_z=0$ ) квантових нанотрубок з GaAs, зовнішня поверхня яких має еліптичну форму, а внутрішня — циліндричну (рис. 1). Радіус внутрішньої циліндричної поверхні становить 5 нм, а півосі еліптичної зовнішньої поверхні  $a$  та  $b$  підбирались таким чином, щоб площа еліпса дорівнювала площі кола радіусом 10 нм. При зміні співвідношення  $a/b$  площа еліпса залишалася сталою (рис.1-2). У розрахунках передбачалося, що стінки нанотрубки є непроникними для електрона, тобто утворюють нескінченний потенціальний бар'єр.

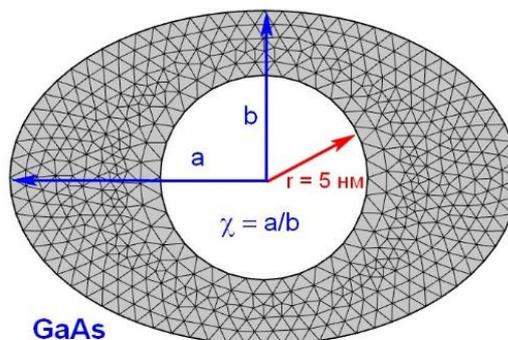


Рис.1. Геометрична схема еліптичної нанотрубки GaAs.

Результати обчислень, наведені на рис. 2 та рис. 3, демонструють, що внаслідок еліптичної симетрії виникає виродження енергетичних рівнів. Наприклад, енергія основного стану електрона збігається з енергією першого збудженого стану, тобто енергія квантового переходу між цими станами прямує до нуля і унеможливує використання його в наноприладах. Така особливість електронного спектру пов'язана з еліптичною симетрією, при якій розподіл електронної густини цих станів збігається (рис.2). Для вирішення цієї проблеми в даній роботі пропонується зруйнувати симетрію нанотрубки шляхом зміщення осі внутрішньої циліндричної поверхні. На рис.4 наведено енергетичний спектр електрона при зміщенні внутрішньої поверхні нанотрубки на 1 нм. У результаті виродження знімається, і енергія квантового переходу між основним та збудженим станами досягає максимального значення при  $a/b=1,4$ . Така

особливість енергетичного спектра може бути використана у напівпровідникових приладах.

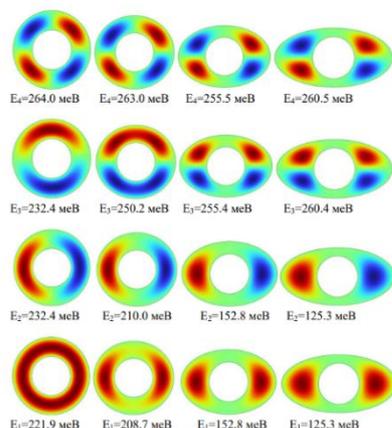


Рис. 2. Вигляд хвильових функцій електрона в еліптичних нанотрубках при різних співвідношеннях півосей еліптичної поверхні:  $\chi = a/b = 1; 1.1; 1.5; 2.0$

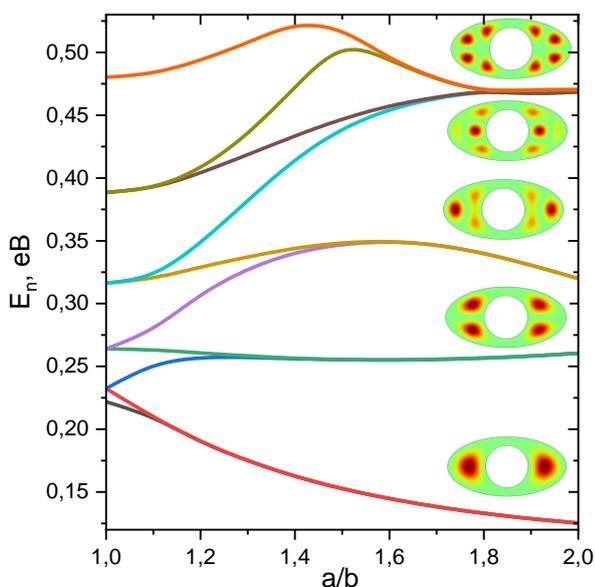
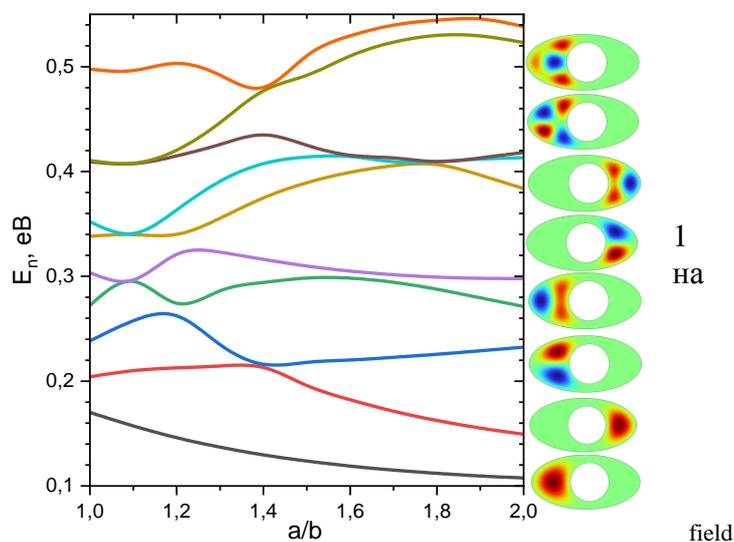


Рис.3. Залежність енергій електрона від співвідношення півосей еліпса. Вставки на графіку: розподіл електронної густини у вироджених квантових станах нанотрубки при  $a/b=2$

Рис.4. Залежність енергій електрона від співвідношення півосей еліпса при зміщенні на нм внутрішнього кола. Вставки графіку: хвильові функції станів електрона у квантових станах нанотрубки при  $a/b=2$

### Список літератури

1. Holovatsky V. A, Yarema V V, Holovatska NH. Theory of electric effect on the optical properties of



## **МІЖПРЕДМЕТНІ ЗВ'ЯЗКИ ФІЗИКИ ТА ХІМІЇ ЯК ІНСТРУМЕНТ ДЛЯ АКТУАЛІЗАЦІЇ ПІЗНАВАЛЬНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ ЗДОБУВАЧІВ ОСВІТИ**

**Головіна Н.А., Назаровець Д.П.<sup>1</sup>, Савіцька Н.В.<sup>1</sup>, Троцюк О.Ю.<sup>1</sup>**

*кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри експериментальної фізики, інформаційних та освітніх технологій, ННФТІ ВНУ імені Лесі Українки, [Holovina.Nina@vnu.edu.ua](mailto:Holovina.Nina@vnu.edu.ua)*

<sup>1</sup>*здобувачі освіти ННФТІ ВНУ імені Лесі Українки*

Активізація пізнавальної діяльності здобувачів освіти при вивченні фізики є ключовим завданням сучасного освітнього процесу. Фізика, як фундаментальна наука про природу, потребує не пасивного запам'ятовування фактів, а глибокого розуміння закономірностей, вміння застосовувати знання на практиці та критично мислити. Активна пізнавальна діяльність сприяє розвитку цих навичок, підвищує інтерес до предмета та забезпечує краще засвоєння матеріалу. Існує безліч педагогічних підходів та методів, спрямованих на активізацію пізнавальної діяльності учнів під час вивчення фізики.

Використання міжпредметних зв'язків фізики та хімії є потужним інструментом для актуалізації пізнавальної діяльності здобувачів освіти. Ці дві природничі науки тісно переплітаються, досліджуючи різні аспекти матерії та її перетворень. Інтеграція знань з фізики та хімії допомагає здобувачам освіти побачити цілісну картину світу, глибше зрозуміти фундаментальні закони природи та розвинути системне мислення.

Актуалізація пізнавальної діяльності через міжпредметні зв'язки фізики та хімії досягається кількома шляхами. По перше, через **поглиблення розуміння фундаментальних понять**, як наприклад, *будова речовини, енергія, електричні явища, рух і взаємодія частинок*. Вивчення атомно-молекулярної теорії у хімії спирається на фізичні уявлення про будову атома, рух електронів, енергетичні рівні. Фізичні методи дослідження (спектроскопія, рентгеноструктурний аналіз) підтверджують хімічні моделі будови речовини. Поняття енергії є ключовим як у фізиці (механічна, теплова, електрична, ядерна), так і в хімії (енергія хімічних зв'язків, теплота реакцій). Розгляд енергетичних перетворень у хімічних реакціях (екзо- та ендотермічні процеси) базується на законах термодинаміки, що вивчаються у фізиці. Розуміння природи хімічного зв'язку (йонний, ковалентний та ін.) неможливе без знань про електричні сили та будову атома. Електроліз як хімічний процес безпосередньо пов'язаний з проходженням електричного струму. Кінетична теорія газів, що вивчається у фізиці, є основою для розуміння швидкості хімічних реакцій та впливу температури на них. Дифузія як фізичне явище пояснює перемішування речовин на молекулярному рівні.

По друге, через **демонстрацію практичного застосування знань**, як то *природні явища, лабораторні дослідження, сучасні технології*. Демонстрація практичного застосування фізичних законів та явищ у повсякденному житті, техніці, природі підвищує мотивацію учнів та допомагає їм усвідомити важливість вивчення фізики. Пояснення багатьох природних явищ потребує інтегрованих знань з фізики та хімії. Наприклад, утворення кислотних дощів (хімічні реакції в атмосфері та фізика