

Список литературы

1. Кундас, С. П. Математическая модель миграции радионуклидов в почве / С. П. Кундас, Н. Н. Гринчик, И. А. Гишкелюк // Вестник Полоцкого государственного университета. Фундаментальные науки. – 2005. – № 3. – С. 56–60.
2. Bürmann, W. Migration of cesium radionuclides in the soil of spruce forest / W.°Bürmann [et al.] // The Fourt Int. Conf. on the Chemistry and migration Behaviour of the Actinides and Fission Product in the Geosphere, USA, December 12–17 1993, Charleston. – P. 122–129.
3. Кушнер, Т. Л. Изучение моделей миграции радионуклидов в курсе «Сельскохозяйственная радиология» / Т. Л. Кушнер // Вестник БрГТУ. – 2004. – № 5 (29) : Физика, математика, химия. – С. 61–67.
4. Кундас, С. П. Архитектура гибридных экспертных систем для прогнозирования миграции радионуклидов в почве / С. П. Кундас, В. И. Коваленко, И.°А. Гишкелюк // Инженерный вестник. – 2006. – № 1 (21). – С. 206–209.

УДК 539.2:621.3.049.77

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОПРОВОЛОКИ GaAs В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ COMSOL MULTIPHYSICS

А.С. Чугунов, А.В. Матиевская

Брестский государственный технический университет, Брест

Научный руководитель: С.В. Чугунов

Мультифизический интерфейс уравнения Шредингера-Пуассона моделирует системы с квантово-ограниченными носителями заряда, такими как квантовые ямы, провода и точки. В данной работе мы исследуем эталонную модель нанопроволоки GaAs, реализованную в модуле Semiconductor Module программного продукта COMSOL Multiphysics.

Мультифизический интерфейс уравнения Шредингера-Пуассона, доступный в COMSOL Multiphysics, создает двунаправленную связь между интерфейсом электростатики и уравнением Шредингера для моделирования носителей заряда в квантово-ограниченных системах. Электрический потенциал от электростатики вносит вклад в член потенциальной энергии в уравнении Шредингера. Статистически взвешенная сумма плотностей вероятностей из собственных состояний уравнения Шредингера вносит вклад в плотность пространственного заряда в электростатике.

Система Шредингера-Пуассона является особенной в том, что стационарное исследование необходимо для электростатики, а исследование собственных значений необходимо для уравнения Шредингера. Для решения двусторонней связанной системы уравнение Шредингера и уравнение Пуассона решаются итеративно до тех пор, пока не будет получено самосогласованное решение. Итерационная процедура состоит из следующих шагов:

Шаг 1. Чтобы обеспечить хорошее начальное условие для итераций, мы решаем уравнение Пуассона

$$-\nabla(\varepsilon\nabla V) = \rho, \quad (1)$$

для электрического потенциала V , в котором ε – диэлектрическая проницаемость, ρ – плотность объемного заряда.

На этом этапе инициализации ρ дается наилучшая начальная оценка, основанная на физических аргументах; например, используя приближение Томаса-Ферми.

Шаг 2. Электрический потенциал V из предыдущего шага вносит вклад в член потенциальной энергии V_e в уравнении Шредингера

$$V_e = q \circ V, \quad (2)$$

где $-q$ заряд частицы-носителя, который определяется выражением

$$q = z_q e, \quad (3)$$

где $-z_q$ номер заряда, $-e$ - элементарный заряд.

Шаг 3. С обновленным термином потенциальной энергии V_e , данным уравнением 2 уравнение Шредингера решается с получением набора собственных энергий E_i , и соответствующего набора нормированных волновых функций, Ψ_i .

Шаг 4. Профиль плотности частиц n_{sum} рассчитывается с использованием статистически взвешенной суммы плотностей вероятностей:

$$n_{sum} = \sum_i N_i |\Psi_i|^2, \quad (4)$$

где вес N_i , дается интегрированием распределения Ферми-Дирака для состояний континуума вне плоскости (таким образом, в зависимости от пространственного измерения модели).

$$N_i = g_i \frac{m_d}{\pi \hbar^2} k_B T F_0 \left(\frac{E_f - E_i}{k_B T} \right), \quad (5)$$

где $-g_i$ коэффициент вырождения ямы, E_f – уровень Ферми, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, m_d – эффективная масса плотности состояния, F_0 – интеграл Ферми-Дирака.

Для простоты взвешенная сумма в формуле 4 показывает только один индекс i , для суммирования. Конечно, в суммировании может быть более одного индекса. Например, в обсуждаемой здесь модели нанопроволоки суммирование ведется как по азимутальному квантовому числу, так и по уровням собственной энергии (для каждого азимутального квантового числа).

Шаг 5. Учитывая профиль плотности частиц n_{sum} , мы переоцениваем плотность пространственного заряда ρ , а затем повторно решаем уравнение Пуассона, чтобы получить новый профиль электрического потенциала, V . Простая формула для новой плотности пространственного заряда:

$$\rho = q n_{sum}, \quad (6)$$

почти всегда приводит к расхождению итераций. Намного лучшую оценку дает:

$$\rho = q n_{sum} \exp \left(e^{-\alpha \frac{-q(V - V_{old})}{k_B T}} \right), \quad (7)$$

где $-V_{old}$ электрический потенциал из предыдущей итерации, а α – дополнительный параметр настройки. Уравнение 7 используется решаящей последовательностью для вычисления плотности ρ пространственного заряда.

Формула основана на том, что плотность частиц n_{sum} является результатом V_{old} и изменится после повторного решения уравнения Пуассона для получения нового. Другими словами, уравнение 6 можно более подробно записать как

$$\rho_{new} = q n_{sum,old} \quad (8)$$

поскольку n_{sum} является результатом V_{old} , и ρ используется для повторного решения уравнения Пуассона, чтобы получить новое V .

Чтобы достичь самосогласованного решения, лучшая формула была бы

$$\rho_{new} = q n_{sum,new} \quad (9)$$

На данный момент нам неизвестно, так как оно исходит из решения уравне-

ния Шредингера на следующей итерации. Однако мы можем сформулировать прогноз для него, используя статистику Больцмана, которая обеспечивает простую экспоненциальную связь между потенциальной энергией $V_e = q \circ V$, и плотностью частиц, n_{sum} .

$$n_{sum,new} = n_{sum,old} \exp\left(\frac{-q(V-V_{old})}{k_B T}\right) \quad (10)$$

Это приводит к формуле 7 для случая $\alpha=0$. Это хорошо работает при высоких температурах, где статистика Больцмана является хорошим приближением. При более низких температурах установка положительного числа α помогает ускорить сходимость.

ШАГ 6. После получения нового профиля электрического потенциала V , путем повторного решения уравнения Пуассона сравните его с электрическим потенциалом из предыдущей итерации V_{old} . Если два профиля совпадают в пределах желаемого допуска, то достигается самосогласованность; в противном случае переходим к шагу 2, чтобы продолжить итерацию.

Следуя описанию в статье [1], радиус нанопроволоки установлен равным 50 нм. Эффективная масса электрона установлена равной 0,067 массы свободного электрона (как указано в результате измерения температуры Ферми в статье), а диэлектрическая проницаемость принята равной 12,9. Уровень энергии Ферми в модели установлен на 0 В, а электрический потенциал на стенке на -0,7 В, чтобы соответствовать граничному условию пиннинга уровня Ферми, описанному исследователями [1]. Мы моделируем случай однородных ионизированных примесей $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при температуре 10 К.

В процессе моделирования мы сначала решаем приближенное решение Томаса-Ферми, а затем используем его в качестве начального условия для полностью связанного уравнения Шредингера-Пуассона.

Решатель сходится за восемь итераций благодаря хорошему начальному условию, обеспечиваемому приближением Томаса-Ферми, и хорошей прямой оценке плотности пространственного заряда, заданной уравнением 7. График электронной плотности, потенциальной энергии и парциальных орбитальных моментов хорошо согласуется с данными, опубликованной в статье [1].

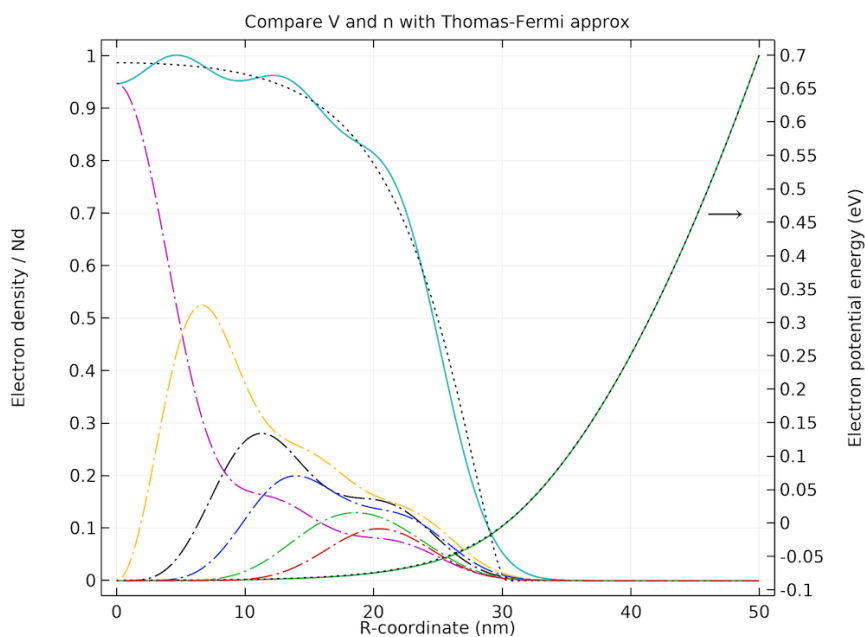


Рисунок 1 – Электронная плотность, потенциальная энергия и парциальные орбитальные моменты.

На графике ниже показаны пространственные колебания типа Фриделя, присутствующие как в профилях электронной плотности, так и в профилях потенциальной энергии.

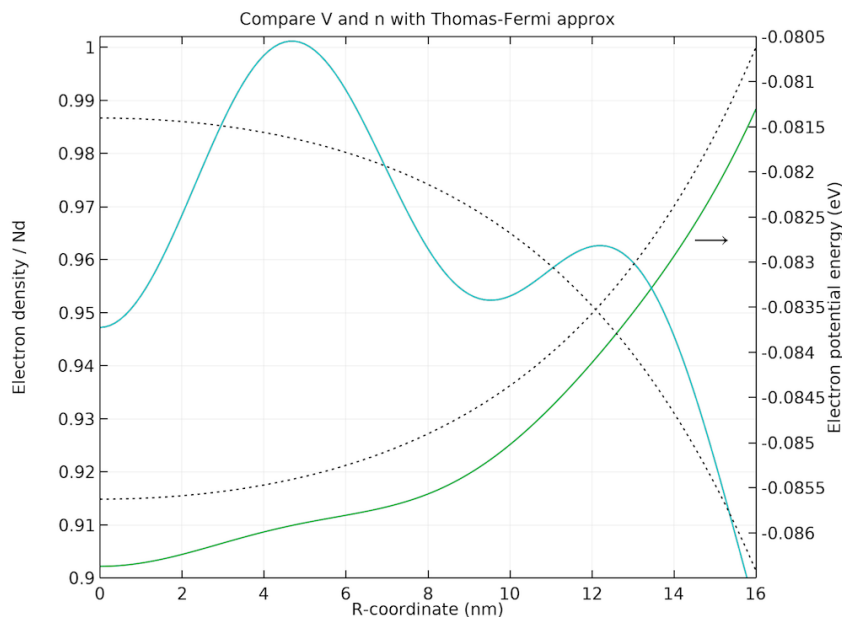


Рисунок 2 – Увеличенный график пространственных колебаний типа Фриделя в профилях электронной плотности и потенциальной энергии.

В этом исследовании мы продемонстрировали, что интерфейс уравнения Шредингера-Пуассона и тип исследования Шредингера-Пуассона упрощают настройку и решение системы Шредингера-Пуассона с использованием самосогласованных результатов Шредингера-Пуассона для модели нанопроволоки GaAs.

Список литературы

1. Luscombe, J.H. Electron confinement in quantum nanostructures: Self-consistent Poisson-Schrödinger theory / J.H. Luscombe, A.M. Bouchard, and M. Luban // Phys. Rev. B. – 1992. – vol. 46, No. 16. – P. 10262.

УДК 681.3

О ПОСТРОЕНИИ КАРКАСОВ ПРОГРАММ С УЧЕТОМ ПРЕДЪЯВЛЯЕМЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ТРЕБОВАНИЙ

В. В. Шпак

*Брестский государственный технический университет, Брест
Научный руководитель: Г. Л. Муравьев, к. т. н., доцент*

При проектировании и разработке программ, приложений исходят из имеющихся требований, предъявляемых к характеристикам продукта. Это функциональные требования, задающие закон функционирования - набор функций, реализуемых программой и определяющих связь входных данных с выходными, требования к характеристикам исполнения, для оконных программ - требования к организации и дизайну интерфейсов (ГИП) и др. [1].