

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
Національний університет «Запорізька політехніка»

**МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ**

до лабораторного практикуму з дисципліни

**„НАНОМАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ЇХ ФОРМУВАННЯ“**

для студентів спеціальностей

175 „Інформаційно-вимірювальні технології“,  
(освітня програма „Інформаційні системи моніторингу і контролю“);

176 „Мікро- та наносистемна техніка“,  
(освітня програма „Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“)  
денної й заочної форм навчання

Методичні вказівки до лабораторного практикуму з дисципліни „Наноматеріали та методи їх формування“ для студентів спеціальностей 175 „Інформаційно-вимірювальні технології“, (освітня програма „Інформаційні системи моніторингу і контролю“); 176 „Мікро- та наносистемна техніка“, (освітня програма „Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої“) денної й заочної форм навчання / Укл.: Андрій КОРОТУН, Віталій РЕВА, Ян КАРАНДАСЬ. – Запоріжжя: НУ „Запорізька політехніка“, 2024. – 27 с.

Укладачі: Андрій КОРОТУН, проф., канд. фіз.-мат. наук,  
Віталій РЕВА, доц., канд. фіз.-мат. наук  
Ян КАРАНДАСЬ, аспірант

Рецензент: Валентин ПОГОСОВ, проф., д-р фіз.-мат. наук

Відповідальний за випуск: Андрій КОРОТУН, проф., канд. фіз.-мат. наук

Затверджено  
на засіданні кафедри  
інформаційної безпеки та наноелектроніки  
Протокол № 6 від 10.05.2024 р.

Рекомендовано до видання НМК факультету інформаційної безпеки та електронних комунікацій  
Протокол № 7 від 14.05.2024 р

## ЗМІСТ

|                                                                                                                                     |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1 Лабораторна робота №1 “ Квантоворозмірні гетероструктури на основі твердого розчину $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ” ..... | 4  |
| 2 Лабораторна робота №2 “ Моделювання коливань двоатомної молекули в середовищі MathCad” .....                                      | 16 |
| 3 Лабораторна робота №3“ Поверхнева провідність вуглецевої нанотрубки ” .....                                                       | 23 |
| Додаток А – Приклад оформлення титульної сторінки .....                                                                             | 30 |

# 1 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 1 “КВАНТОВОРОЗМІРНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ НА ОСНОВІ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ”

**Мета роботи:** ознайомитися з гетероструктурами та їх класифікацією, зокрема з квантоворозмірними гетероструктурами на основі твердого розчину  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

## 1.1 Загальні теоретичні відомості

Фізика напівпровідників останні 10–15 років, завдяки успіхам технології і, перш за все, методу MBE (Molecular Beam Epitaxy – молекулярно-променева епітаксія), це переважно фізика напівпровідникових низькорозмірних структур (наноструктур). Сучасні методи епітаксії дозволяють створювати монокристалічні шари і багатошарові гетероструктури з товщиною шарів  $1 \div 10$  нм, порівняної з довжиною хвилі де Бройля носіїв заряду:

$$\Lambda = \frac{h}{m_n^* v} . \quad (1.1)$$

Це відкриває принципову можливість спостереження і використання явищ, обумовлених хвильовою природою електрона. До них, зокрема, відносяться інтерференція електронних хвиль і викликані нею розмірні квантові ефекти, наприклад, такі, як квантування енергії і імпульсу носіїв заряду в тонких шарах, резонансний характер проходження електронів через ці шари тощо. Розмірне квантування кардинально міняє енергетичний спектр носіїв заряду, фононів, квазічастинок, і виникненню цілого ряду нових фізичних явищ і властивостей напівпровідникових наноструктур.

Важлива перевага наноструктур пов'язана з тим, що, змінюючи геометричні розміри і конфігурацію нанооб'єктів, можна керувати властивостями системи. Відкривається широка можливість конструювання параметрів структур і, перш за все, енергетичного спектру носіїв заряду.

Енергетичні схеми деяких гетероструктур зображені на рис. 1.1 і 1.2. Верхня і нижня лінії показують залежність положення дна зони

провідності і стелі валентної зони від координати у напрямі головної осі структури, або осі зростання, перпендикулярно площинам шарів.

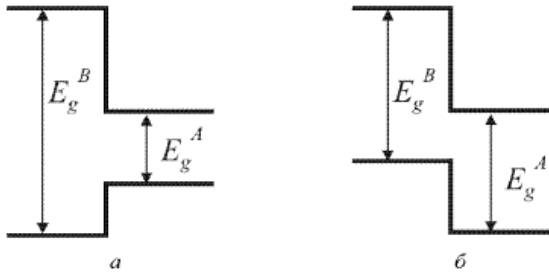


Рисунок 1.1 – Зонна схема одиночного гетеропереходу типу I (a) і типу II (б)

Одиночний гетероперехід між двома матеріалами – напівпровідниками  $A$  і  $B$  зображений на рис. 1.1. Розрізняють гетеропереходи першого і другого типу залежно від того, лежить заборонена зона  $E_g$  одного з композиційних матеріалів усередині забороненої зони іншого матеріалу, як наприклад для гетеропари  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$  (рис. 1.1, a), або дно зони провідності нижче в одному, а стеля валентної зони вища в іншому матеріалі, як у випадку  $\text{InAs}/\text{AlSb}$  або  $\text{ZnSe}/\text{BeTe}$  (рис. 1.1, б). На рис. 1.2 зображений подвійний гетероперехід.

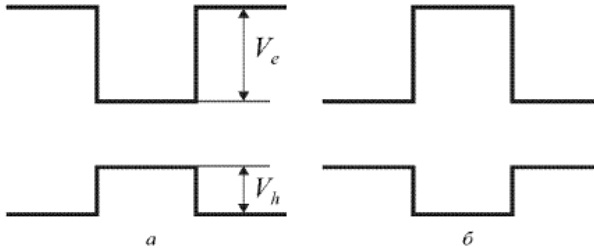


Рисунок 1.2 – Зонна схема подвійного гетеропереходу першого роду з квантовою ямою (a) або бар'єром (б);  $V_{e,h}$  – висота потенціального бар'єру (глибина квантової ями) або розрив зон на інтерфейсі в зоні провідності і валентній зоні відповідно

Подвійний гетероперехід першого роду  $B/A/B$  представляє структуру з одиночною квантовою ямою, якщо ширина забороненої зони в матеріалі  $A$  менша, ніж в матеріалі  $B$ , тобто  $E_g^A < E_g^B$  або структуру з одиночним бар'єром, якщо  $E_g^A > E_g^B$ . У першому випадку внутрішній

шар  $A$  утворює потенціальну яму (рис. 1.2,  $a$ ), в якій відбувається розмірне квантування електронних і діркових станів. У другому випадку шар  $A$  утворює потенціальний бар'єр для електронів і дірок (рис. 1.2,  $b$ ). На рис. 1.2,  $a$  схематично показана структура з прямокутною ямою. Використовуючи як композиційний матеріал  $A$  твердий розчин і змінюючи його склад в процесі зростання, можна створювати ями іншої форми – параболічні, трикутні і т.п.

Логічним розвитком однобар'єрної структури є двобар'єрні і трибар'єрні структури, тобто одиночна або подвійна квантові ями, відокремлені бар'єрами кінцевої товщини від напівнескінченних шарів з меншою шириною забороненої зони. А періодична структура з квантовими ямами, розділеними не дуже широкими потенціальними бар'єрами, утворює надгратку, в якій носії заряду можуть тунелювати з ями до ями і довжина вільного пробігу цього носія уздовж осі, перпендикулярної площинам шарів, перевищує період структури.

Як правило, квантоворозмірні ефекти спостерігаються в шаруватих гетероструктурах, складених з матеріалів, що розрізняються розташуванням і шириною енергетичних зон. У таких структурах в поперечному до площини шарів напрямі потенціальний рельєф для електронів має форму потенціальних ям і бар'єрів, що істотно впливає на їх енергетичний спектр і характер руху. Особливо сильне квантування поперечних значень імпульсу і енергії позначається на поперечному транспорті електронів в гетероструктурах. Інтерференція електронних хвиль, відбитих від границь шарів, призводить до резонансних осциляцій струму, що протікає в поперечному до шарів напрямі під дією прикладеної до них різниці потенціалів, і появи на вольт-амперних характеристиках шаруватих структур ділянок з негативним диференціальним опором.

Якщо вважати, що електрони тунелюють з тепловою швидкістю ( $\sim 5 \cdot 10^5$  м/с) через шар товщиною менше  $10^{-8}$  м, то час тунелювання складає  $10^{-13}$  с, і це дає змогу створювати надшвидкодійні прилади з робочими частотами більш  $10^3$  ГГц.

Такі квантоворозмірні структури створюються із шарів метал-діелектрик і епітаксialьних шарів різних напівпровідникових матеріалів, перш за все, гетероструктур  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Оскільки гетероструктури на основі твердих розчинів  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , в якому частина атомів галію заміщена атомами алюмінію, були історично першими і залишаються до цього дня найбільш вивченими і поширеними, комп'ютерне моделювання квантово-розмірних ефектів ми проводитимемо саме на їх прикладі. Величина  $x$  – це частка атомів галію, заміщених атомами алюмінію, зазвичай вона змінюється в межах від 0,15 до 0,35.

Зонна структура  $\text{GaAs}$  наведена на рис. 1.3.

Найбільша увага надається структурам, у яких головну роль виконують стани в центрі зони Бріллюена (точка  $\Gamma$ ) – структурам з гетеромежами по площині (001).

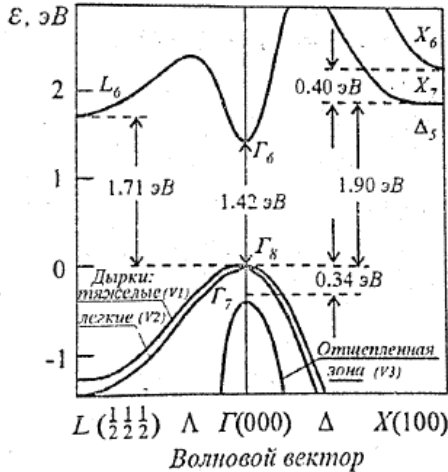


Рисунок 1.3 – Зонна діаграма  $\text{GaAs}$

Ефективна маса електронів в  $\Gamma$ -мінімумі таких структур визначається виразом

$$m_n(x) = (0,067 + 0,083x)m_e, \quad (1.2)$$

ширина забороненої зони (у еВ) –

$$\Delta E_g(x) = \begin{cases} 1,424 + 1,247x & , \text{ якщо } x < 0,45, \\ 1,9 + 0,125x + 0,143x^2 & , \text{ якщо } x \geq 0,45 \end{cases} \quad (1.3)$$

а постійна ґратки –

$$a_0(x) = 0,56533 + 0,00078x \text{ нм}. \quad (1.4)$$

Таким чином, варіюючи частку заміщення атомів галію алюмінієм  $x$  можна змінювати такі важливі параметри напівпровідникового матеріалу як ефективну масу носіїв заряду, ширину забороненої зони і постійну ґратки. Помітна залежність ширини забороненої зони від параметра  $x$  дозволяє при вирощуванні монокристалічних шаруватих структур одержувати заданий потенціальний рельєф для електронів в нормальному до площини шарів напрямі. При цьому внаслідок того, що залежність постійних ґраток від параметра  $x$  слабка, кристалічна структура на інтерфейсі між шарами характеризується мінімальними порушеннями – кристалічні ґратки різних шарів практично ідеально підходять один до одного. Через практично повне узгодження постійних ґраток шари мають малі напруження і можуть вирощуватися довільної товщини.

## 1.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Згідно Додатку А ознайомитися з деякими функціями пакету MathCad.
2. Побудувати залежності ефективної маси електронів, ширини забороненої зони та постійної ґратки від долі заміщення атомів галію алюмінієм  $x$  в  $\Gamma$ -мінімумі гетероструктури  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .
3. Підготувати звіт.

## 1.3 Контрольні запитання

1. Вкажіть основні напрямки розвитку фізики напівпровідників в останні роки. З якою технологією цей розвиток пов'язаний?
2. Які явища характерні для квантоворозмірних структур?
3. Що таке одиночні гетеропереходи першого і другого типу?
4. Що таке подвійні гетеропереходи першого і другого типу?
5. В чому переваги і недоліки квантоворозмірних структур?
6. Як впливає доля заміщення атомів галію алюмінієм  $x$  в гетероструктурі  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  на параметри матеріалу?

## 2 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №2. МОДЕЛЮВАННЯ КОЛИВАНЬ ДВОАТОМНОЇ МОЛЕКУЛИ В СЕРЕДОВИЩІ MATHCAD

**Мета роботи:** отримати навички комп'ютерного моделювання коливань двоатомної молекули на модельному прикладі з метою засвоєння основних положень квазікласичного наближення Борна – Оппенгеймера.

### 2.1 Загальні теоретичні відомості

Будь-яка двухатомна молекула (наприклад,  $O_2$ ) складається з двох ядер, зв'язаних електронами, які обертаються навколо них. Оскільки ядра набагато разів важчі за електрони можна вважати, що останні рухаються настільки швидко, що у кожний момент часу відбувається миттєве підстроювання їх розподілу до зміни положення ядер (наближення Борна – Оппенгеймера). Тому вихідна задача зводиться до задачі про рух двох ядер в потенційному полі, яка залежить лише від відстані між ними. Потенціал є таким, що притягується на великих відстанях (сили Ван-дер-Вальсу). На близьких відстанях він є відштовхуючим (кулонівської взаємодії ядер і відштовхування електронів, обумовлене принципом заборони Паулі). Така поведінка поля зазвичай описується потенціалом Ленарда – Джонса (рис. 2.1):

$$V(r) = 4V_0 \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right].$$

Велика маса ядер дозволяє провести подальше спрощення завдання шляхом поділу повільного обертання ядер і більш швидкої зміни їх взаємної відстані. Перший тип руху добре описується як квантово-механічне обертання жорсткої системи типу «гантель», а коливальний рух описується рівнянням Шредингера. Однак, маючи на увазі дуже велику масу ядер, можна вважати, що їх рух близький до класичного. Тому наближені значення енергії коливань можна знайти, вирішивши класичну задачу про рух ядер в потенційному полі  $V(r)$  і потім використати правила квантування Бора – Зоммерфельда для визначення рівнів енергії  $E_n$ .

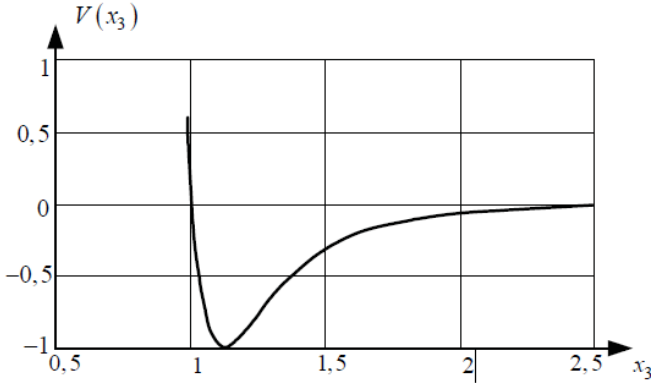


Рисунок 2.1. Форма потенціалу

Класичне обмеження руху в потенціалі  $V(r)$ , яке описує зміну між'ядерної відстані можливо в діапазоні енергій  $-V_0 < E < 0$ . Ця зміна відстані має характер періодичних, але необов'язково гармонійних осциляцій між внутрішніми і зовнішніми точками повороту з координатами  $x_{\text{left}}$  та  $x_{\text{right}}$ . Під час цих коливань енергія системи перерозподіляється між кінетичною і потенційною енергією. Однак загальна енергія дорівнює сумі кінетичної і потенційної енергії залишається постійною тому рух системи можна розглядати як рух по деякій замкнутій траєкторії у фазовому просторі з координатами  $p, r$ . В кожній точці траєкторії виконується умова

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r). \quad (2.1)$$

У явній формі рівняння траєкторії можна отримати, вирішивши рівняння (2.1) щодо  $p$ :

$$p(r) = \pm \sqrt{2m(E - V(r))}. \quad (2.2)$$

Розглянутий класичний рух можливий при будь-якому рівні енергії між  $-V_0$  і 0. Для того щоб проквантувати цей рух і знайти наближені значення власних чисел  $E_n$ , введемо безрозмірну величину, звану дією. В одновимірному випадку воно визначається інтегралом

$$S(E_n) = 2 \left[ \sqrt{\frac{2m}{h^2}} \int_{x_{\text{left}}}^{x_{\text{right}}} \sqrt{E_n - V(x)} dx \right], \quad (2.3)$$

де  $h$  – стала Планка. Правилами квантування встановлено, що дозволені лише такі значення енергії  $E_n$ , яким відповідає дія, що дорівнює  $2\pi(n+1/2)$ , де  $n$  – ціле число. Множник «2» перед інтегралом у формулі (2.55) враховує той факт що кожна точка під час одного циклу коливання проходиться двічі (один раз з позитивним значенням  $p$ , а інший раз з негативним).

Після введення безрозмірних змінних

$$\varepsilon = \frac{E}{V}; \quad x = \frac{r}{a}; \quad \gamma = \left( \frac{2ma^2V_0}{h^2} \right)^{1/2}$$

рівняння (2.3) набуває вигляду

$$S(E_n) = 2 \left[ \sqrt{\frac{2m}{h^2}} \int_{x_{\text{left}}}^{x_{\text{right}}} \sqrt{E_n - V(x)} dx \right] = 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.4)$$

$$\text{де } V(x) = 4 \left( \frac{1}{x^{12}} - \frac{1}{x^6} \right).$$

## 2.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Скласти програму обчислення залежності між'ядерної відстані від часу за запропонованим алгоритму.
2. Обчислити енергетичний спектр і координати точок повороту ядер, які відповідають значенням енергетичного спектра двоядерної молекули.
3. Побудувати графік потенціалу та енергетичного спектра в середовищі MathCad за запропонованим алгоритмом.
4. Побудувати траєкторію руху ядер на фазовій площині в середовищі MathCad за запропонованим алгоритмом.
5. Отримати чисельне рішення «гантельної» задачі методом рівнянь Гамільтона.

## 2.3 Алгоритм до програми обчислення залежності між'ядерної відстані від часу

- обчислення залежності  $S(\epsilon_n)$ ;
- обчислення енергетичного спектру і координат точок повороту, які відповідають значенням енергетичного спектра;
- побудова графіка потенціалу та енергетичного спектра;
- побудова траєкторії на фазовій площині;
- рішення задачі методом рівнянь Гамільтона.

Розглянемо методику реалізації кожного кроку наведеного алгоритму в середовищі *MathCad*.

```

 $\gamma := 80$ 
 $X_{\min} := \sqrt[6]{2} = 1.122$ 
 $D_x := 0.1 \cdot X_{\min} = 0.112$ 
 $V(x) := 4(x^{-12} - x^{-6})$ 
 $S := \left| \begin{array}{l} E_{\max} \leftarrow -10^{-4} \\ x \leftarrow X_{\min} - D_x \\ x_{\text{left}} \leftarrow \text{root}(V(x) - E_{\max}, x) \\ x \leftarrow X_{\min} + D_x \\ x_{\text{right}} \leftarrow \text{root}(V(x) - E_{\max}, x) \\ E_{\min} \leftarrow -1 + 10^{-4} \\ N_E \leftarrow 100 \\ D_E \leftarrow \frac{(E_{\max} - E_{\min})}{N_E} \\ \text{for } i \in 0..N_E \end{array} \right| \begin{array}{l} E \leftarrow E_{\min} + D_E \cdot i \\ x \leftarrow X_{\min} - D_x \\ x_{\text{left}} \leftarrow \text{root}(V(x) - E, x) \\ x \leftarrow X_{\min} + D_x \\ x_{\text{right}} \leftarrow \text{root}(V(x) - E, x) \\ \text{Sint}_{i,0} \leftarrow E \\ \text{Sint}_{i,1} \leftarrow \gamma \cdot \text{Re} \left( \int_{x_{\text{left}}}^{x_{\text{right}}} \sqrt{E - V(\xi)} d\xi \right) \end{array}$ 
 $\text{Sint}$ 
 $\max(S) = 64.279$ 

```

Рисунок2.2 – Лістинг програми обчислення залежності  $S(\epsilon_n)$

### 2.3.1 Обчислення залежності $S(\epsilon_n)$ :

- $X_{\min} = 2^{1/6}$  - задати змінну, відповідно мінімуму потенціалу;
- $\gamma = 80$  - задати змінну  $\gamma$ ;

- $TOL=10^{-5}$  – задати зміну, яка визначає точність рішення рівняння;
- $D_x = 0.1X_{\min}$  - змінна для завдання початкового наближення.

Програма обчислення залежності  $S(\epsilon_n)$  показана на рис.2.2.

|          |                                                                                                                             |                                                                                         |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| $E_1 :=$ | $n \leftarrow 0$<br>$M_1 \leftarrow \max(S)$<br>$j \leftarrow 0$<br>while $\left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \pi \leq M_1$ | $A \leftarrow \frac{\left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \pi - b\right]}{a}$        |
|          | while $S_{j,1} < \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \pi$                                                                    | $x \leftarrow X_{\min} - D_x$<br>$x_{\text{left}} \leftarrow \text{root}(A - V(x), x)$  |
|          | $j \leftarrow j + 1$                                                                                                        | $x \leftarrow X_{\min} + D_x$<br>$x_{\text{right}} \leftarrow \text{root}(A - V(x), x)$ |
|          | $vx \leftarrow \begin{pmatrix} S_{j-1,0} \\ S_{j,0} \end{pmatrix}$                                                          | $E_{n,0} \leftarrow A$                                                                  |
|          | $vy \leftarrow \begin{pmatrix} S_{j-1,1} \\ S_{j,1} \end{pmatrix}$                                                          | $E_{n,1} \leftarrow x_{\text{left}}$                                                    |
|          | $a \leftarrow \text{slope}(vx, vy)$                                                                                         | $E_{n,2} \leftarrow x_{\text{right}}$                                                   |
|          | $b \leftarrow \text{intercept}(vx, vy)$                                                                                     | $n \leftarrow n + 1$                                                                    |
|          |                                                                                                                             | $E$                                                                                     |

Рисунок 2.3 Програма обчислення енергетичного спектра

### 2.3.2 Побудова енергетичного спектра.

Лістинг програми побудови енергетичного спектра представлена на рис. 2.4.

$x_{\text{left}} := 0.98$

$x_{\text{right}} := 2.5$

$Tmp := E1^{(0)}$  – виділення нульового стовпця матриці  $E1$  в вектор стовпець  $Tmp$ .

|    | 0      | 1     | 2     |
|----|--------|-------|-------|
| 0  | -0.935 | 1.081 | 1.179 |
| 1  | -0.812 | 1.057 | 1.234 |
| 2  | -0.7   | 1.044 | 1.281 |
| 3  | -0.599 | 1.034 | 1.327 |
| 4  | -0.507 | 1.027 | 1.373 |
| 5  | -0.425 | 1.022 | 1.422 |
| 6  | -0.352 | 1.017 | 1.474 |
| 7  | -0.287 | 1.014 | 1.53  |
| 8  | -0.231 | 1.011 | 1.591 |
| 9  | -0.183 | 1.008 | 1.659 |
| 10 | -0.141 | 1.006 | 1.735 |
| 11 | -0.106 | 1.005 | 1.822 |
| 12 | -0.078 | 1.003 | 1.922 |
| 13 | -0.055 | 1.002 | 2.04  |
| 14 | -0.037 | 1.002 | 2.181 |
| 15 | -0.023 | 1.001 | ...   |

Рисунок 2.4 Програма обчислення енергетичного спектра

```

xright := 2.5
xleft := 0.98
Tmp := E1(0)
Lxx := N0 ← 100
Dx ←  $\frac{(x_{right} - x_{left})}{N_0}$ 
for i ∈ 0 .. N0
    x0i ← xleft + Dx · i
    y0i ← V(x0i)
    Ymin ← min(y0)
    N0
    N ← ∑i=0N0 [(Ymin = y0i) · i]
    for i ∈ 0 .. N
        x0i ← x0i
        y0i ← y0i
K ← last(Tmp)
m ← 0
for i ∈ N .. K + N
    x0i+m ← E1i-N,1
    y0i+m ← E1i-N,0
    m ← m + 1
    x0i+m ← E1i-N,2
    y0i+m ← E1i-N,0
    m ← m + 1
    x0i+m ← E1i-N,1
    y0i+m ← E1i-N,0
    N1 ← last(Y0)
    for i ∈ 0 .. N1
        Sy ← -∞
        for j ∈ 0 .. N1
            if Sy < Y0j
                Sy ← Y0j
                N2 ← j
                Si,0 ← X0N2
                Si,1 ← Y0N2
                Y0N2 ← -∞
        Xmax ← max(X0)
        i ← 0
        Xt ← x0N
        while Xt < Xmax
            Si+N1+1,0 ← Xt
            Si+N1+1,1 ← V(Xt)
            i ← i + 1
            Xt ← Xt + Dx
S

```

Рисунок 2.5. Програма побудови енергетичного спектра

Функція, що повертає матрицю, що містить значення потенціалу Ленарда - Джонса і значення енергії спектра:

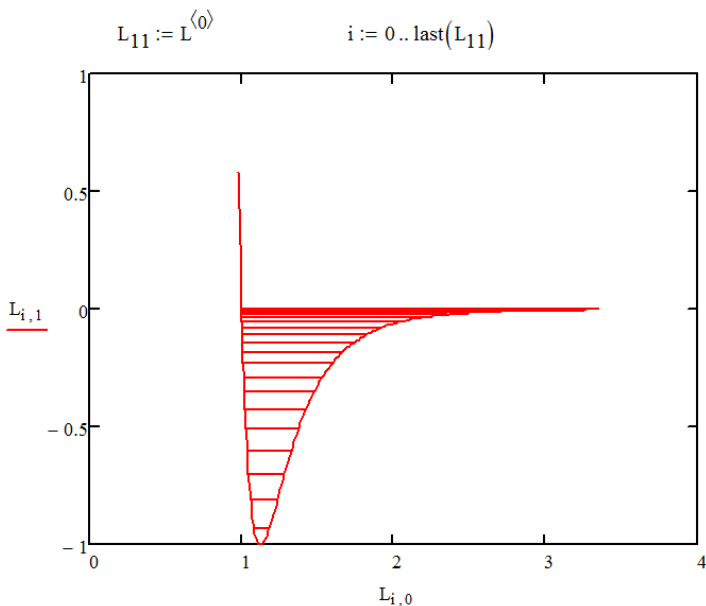


Рисунок 2.6. Потенціал Ленарда - Джонса

### 2.3.3 Побудова траєкторії на фазовій площині:

- $p(x, \varepsilon) = \sqrt{\varepsilon - V(x)}$  - визначення імпульсу
- $Np := 20000$ ;
- $i := 0 \dots Np$ ;
- $Level := 0$  - завдання номера енергетичного рівня для побудови траєкторії руху на фазовій площині;
- обчислення координат:

$$x_i := E1_{level,1} + \frac{(E1_{level,2} + E1_{level,1})}{Np} \cdot i;$$

- обчислення імпульсів:

$$p(x, \varepsilon) := \sqrt{\varepsilon - V(x)}$$

$$N_p := 20000$$

$$i := 0 \dots N_p$$

$$\text{Level} := 0$$

$$x_i := E_{1, \text{Level}, 1} + \frac{(E_{1, \text{Level}, 0} + E_{1, \text{Level}, 1})}{N_p} \cdot i$$

$$P := \left| \begin{array}{l} \text{for } i \in 0 \dots N_p \\ \quad \left| \begin{array}{l} S_{i,0} \leftarrow x_i \\ S_{i,1} \leftarrow p(x_i, E_{1, \text{Level}, 0}) \end{array} \right. \\ \text{for } i \in N_p + 1 \dots 2 \cdot N_p \\ \quad \left| \begin{array}{l} S_{i,0} \leftarrow S_{2 \cdot N_p - i, 0} \\ S_{i,1} \leftarrow -S_{2 \cdot N_p - i, 1} \end{array} \right. \\ S \end{array} \right.$$

P =

|    | 0     | 1                      |
|----|-------|------------------------|
| 0  | 1.081 | $2.2091 \cdot 10^{-6}$ |
| 1  | 1.081 | $5.103 \cdot 10^{-3}$  |
| 2  | 1.081 | $7.216 \cdot 10^{-3}$  |
| 3  | 1.081 | $8.838 \cdot 10^{-3}$  |
| 4  | 1.081 | 0.01                   |
| 5  | 1.081 | 0.011                  |
| 6  | 1.081 | 0.012                  |
| 7  | 1.081 | 0.013                  |
| 8  | 1.081 | 0.014                  |
| 9  | 1.081 | 0.015                  |
| 10 | 1.081 | 0.016                  |
| 11 | 1.081 | 0.017                  |
| 12 | 1.081 | 0.018                  |
| 13 | 1.081 | 0.018                  |
| 14 | 1.081 | 0.019                  |
| 15 | 1.081 | ...                    |

- завдання масивів для проведення вертикальних ліній в точках зупинки:

$$V_1 := \begin{pmatrix} E_{1, \text{Level}, 1} & -1 \\ E_{1, \text{Level}, 1} & 1 \end{pmatrix} \quad V_2 := \begin{pmatrix} E_{1, \text{Level}, 2} & -1 \\ E_{1, \text{Level}, 2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$j := 0 \dots 1 \quad i := 0 \dots 2 \cdot N_p$$

Побудова потенціалу, траєкторії руху та маркування точок зупинки (рис.2.6).

### 2.3.4 Рішення системи рівнянь Гамільтона

$$\begin{cases} x' = p(x); \\ p' = -\frac{d}{dx}V(x) \end{cases}$$

з початковими умовами

$$x(0) = E1_{0,1}; \quad p(0) = 0.$$

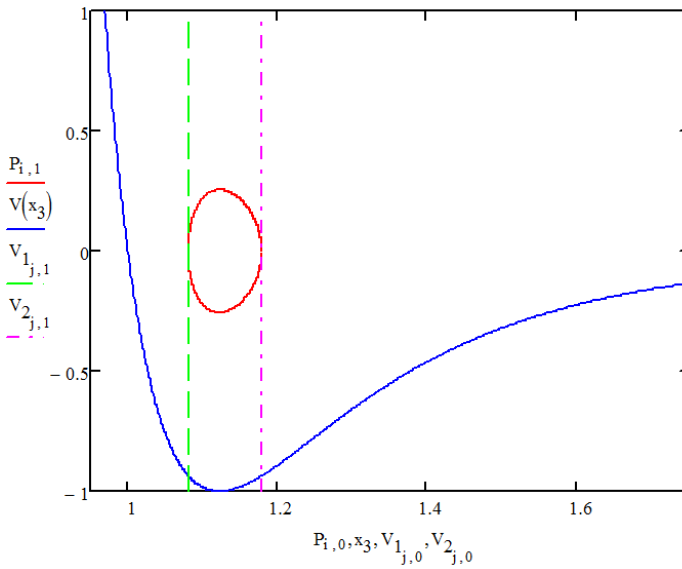


Рисунок 2.7. Графік потенціалу, траєкторії руху та маркування точок зупинки

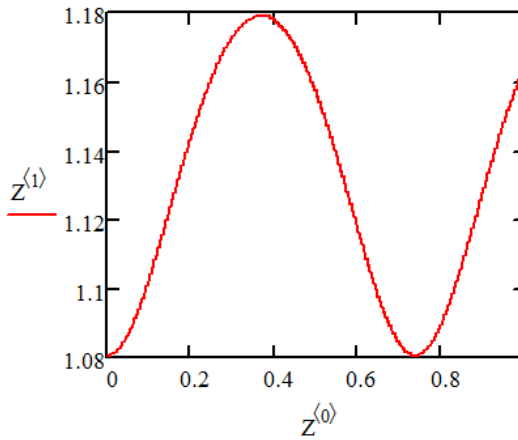


Рис.2.8. Залежність координати від часу

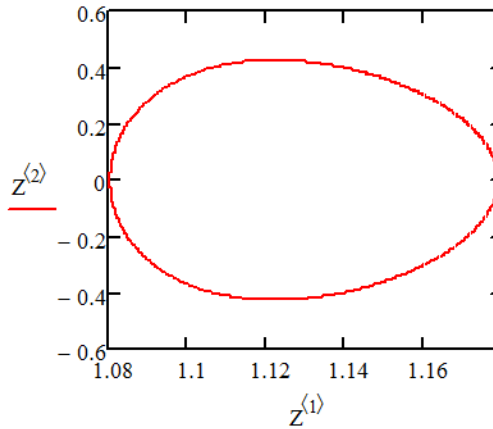


Рисунок 2.9. Траєкторія в фазовому просторі

### 2.3.5 Алгоритм рішення:

- задати номер рівня, для якого вирішується система рівнянь:

$$Level := 0;$$

- визначення коефіцієнта в безрозмірних рівняннях руху:

$$Coeff := \frac{\frac{10}{2^3} \cdot \pi^2}{3} = 33.16$$

- задати вектор початкових умов

$$y := \begin{pmatrix} E_{1_{Level,1}} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.081 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- задати вектор-функції, що повертає перші похідні:

$$D(t, z) := \begin{bmatrix} z_1 \\ Coeff \cdot \left[ \frac{2}{(z_0)^{13}} - \frac{1}{(z_0)^7} \right] \end{bmatrix}$$

- рішення системи диференціальних рівнянь:

```
Z := rkfixed(y, 0, 1, 1000, D)
i := 0.. 1000
```

## 2.4 Контрольні питання

1. Сформулюйте задачу моделювання енергетичного спектра двоатомної молекули.
2. Викладіть алгоритм розрахунку енергетичного спектра двоатомної молекули.
3. На які основні наближення спирається методика розрахунку енергетичного спектра двоатомної молекули?
4. Наведіть залежність повної енергії електронної підсистеми від положення ядер двоатомної молекули.
5. Поясніть хід графіка потенціалу Ленарда – Джонса.
6. Поясніть алгоритм програми побудови траєкторії ядер двоатомної молекули на фазовій площині.
7. Поясніть алгоритм програми побудови графіка потенціалу і енергетичного спектра двоатомної молекули.

### 3 ЛАБОРАТОРНА РОБОТА № 3

#### “ПОВЕРХНЕВА ПРОВІДНІСТЬ ВУГЛЕЦЕВОЇ НАНОТРУБКИ”

**Мета роботи:** дослідити механізмів провідності одностінних вуглецевих нанотрубок.

### 3.1 Загальні теоретичні відомості

#### 3.1.1 Структура та електронні властивості вуглецевих нанотрубок

**Одношарова вуглецева нанотрубка** (ВНТ) представляє собою порожнисту вуглецеву макромолекулу (рис. 3.1)

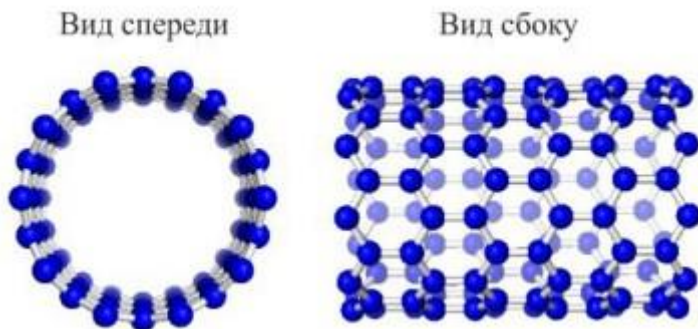


Рисунок 3.1 – Одношарова вуглецева нанотрубка: вид попереду та збоку. Атоми вуглецю позначені синіми сферами

Розташування атомів вуглецю на поверхні вуглецевої нанотрубки можна представити, згорнувши одноатомний шар графіту (графен) у циліндр вздовж вектора  $C_h$ , який з'єднує два кристалографічно еквівалентних атоми у ґратці графену (рис. 3.2). даний вектор, який називають також **вектором хіральності** вуглецевої нанотрубки, можна розкласти за базисними векторами кристалічної ґратки графену  $a_{1,2}$ :

$$C_h = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2,$$

де  $m$  та  $n$  – цілі числа. Залежно від значень індексів хіральності виділяють три різних конфігурації вуглецевих нанотрубок:

- ❖ хіральні нанотрубки ( $m \neq n > 0$ );
- ❖ нехіральні нанотрубки типу «зигзаг» ( $m > 0, n = 0$ );
- ❖ нехіральні нанотрубки типу «крісло» ( $m = n > 0$ ).

Радіус одношарової нанотрубки залежить від індексів її хіральності так:

$$R = \frac{\sqrt{3}b\sqrt{m^2 + mn + n^2}}{2\pi}, \quad (3.1)$$

де  $b = 0,142$  нм міжатомна відстань у кристалічній ґратці графена.

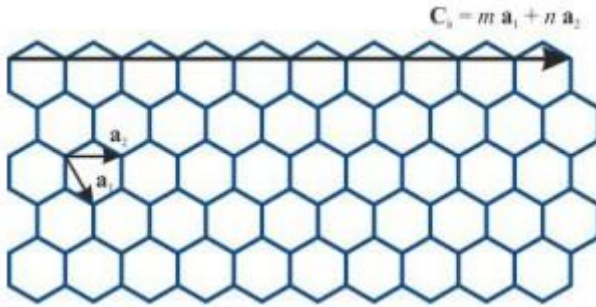


Рисунок 3.2 – Одноатомний шар графіту (графен), при згортанні якого в циліндр вздовж вектора  $C_n$ , одержують нанотрубку

Відмітимо, що фізичні властивості вуглецевих нанотрубок істотно залежать від їх індексів хіральності. Існує загальне правило: вуглецеві нанотрубки являються металевими при  $m - n = 3q$  і напівпровідниковими при  $m - n \neq 3q$ , де  $q$  – ціле число.

### 3.1.2 Електрична провідність вуглецевих нанотрубок

Розглянемо одношарову вуглецеву нанотрубку, вісь якої орієнтована вздовж вісі  $z$  декартової системи координат (рис. 3.3). Припустимо, що на вуглецеву нанотрубку падає плоска електромагнітна хви-

ля  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{e}_z \mathcal{E}_0 e^{-i\omega t}$ , поляризована вдовж осі вуглецевої нанотрубки, а хвильовий вектор  $\mathbf{k}$  (і, відповідно, напрям поширення хвилі) перпендикулярний вісі вуглецевої нанотрубки. Електромагнітна хвиля збуджує в вуглецевій нанотрубці електричний струм, густина якого має вигляд  $\mathbf{j}(t) = \mathbf{e}_z j_0(\omega) e^{-i\omega t}$ . Тут і надалі ми припускаємо, що довжина хвилі  $\lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$  набагато більше за радіус вуглецевої нанотрубки, але

набагато менше за довжину вуглецевої нанотрубки  $L$ . В цьому випадку амплітуда густини індукованого в вуглецевій нанотрубці струму  $j_0(\omega)$  та амплітуда плоскої хвилі  $\mathcal{E}_0$  пов'язані наступним співвідношенням:

$$j_0(\omega) = \sigma(\omega) \mathcal{E}_0, \quad (3.2)$$

де  $\sigma(\omega)$  – поверхнева провідність вуглецевої нанотрубки.

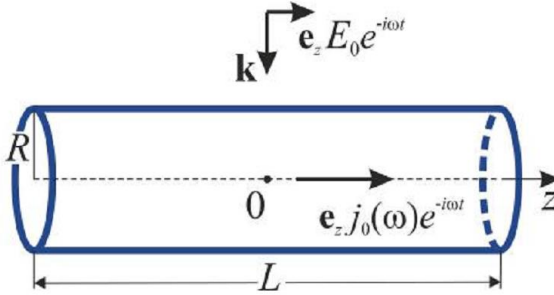


Рисунок 3.3 – Одношарова вуглецева нанотрубка, опромінена плоскою електромагнітною хвилею

В одноелектронному наближенні поверхнева провідність зигзаг  $(m, 0)$  вуглецевої нанотрубки має наступний вигляд:

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + \sigma_2(\omega), \quad (3.3)$$

де

$$\sigma_1 = \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \left( i\omega - \frac{1}{\tau} \right) R} I_1, \quad (3.4)$$

$$I_1 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\partial \varepsilon_c(p, s)}{\partial p} \cdot \frac{\partial}{\partial p} \left[ f(\varepsilon_c(p, s)) - f(-\varepsilon_c(p, s)) \right] dp, \\ \sigma_2 = \frac{i\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p, s) \mathcal{R}_{cv}^2(p, s) \left[ f(\varepsilon_c(p, s)) - f(-\varepsilon_c(p, s)) \right]}{\omega_{cv}^2(p, s) - \left( \omega + \frac{i}{\tau} \right)^2} dp. \quad (3.5)$$

Матричний елемент оператора дипольного моменту вуглецевої нанотрубки має вигляд:

$$\mathcal{R}_{cv}(p, s) = -\frac{b\gamma_0^2}{2\varepsilon_c^2(p, s)} \left( 1 + \cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} - 2\cos^2 \frac{\pi s}{m} \right), \quad (3.6)$$

де енергія  $\varepsilon_c$  визначається виразом

$$\varepsilon_c(p, s) = \gamma_0 \sqrt{1 + 4\cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} + 4\cos^2 \frac{\pi s}{m}}. \quad (3.7)$$

Обчислюючи похідну за імпульсом від енергії, матимемо:

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p} = -\frac{3\gamma_0 b \sin \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m}}{\hbar \sqrt{1 + 4\cos \frac{3pb}{2\hbar} \cos \frac{\pi s}{m} + 4\cos^2 \frac{\pi s}{m}}}. \quad (3.8)$$

Використовуючи вирази для функцій розподілу Фермі – Дірака, обчислимо різницю  $f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c)$ :

$$f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_c}{k_B T}} + 1} - \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon_c}{k_B T}} + 1} = -\text{th} \frac{\varepsilon_c}{2k_B T}. \quad (3.9)$$

Розраховуючи похідну за імпульсом від різниці функцій розподілу Фермі – Дірака:

$$\frac{\partial}{\partial p} [f(\varepsilon_c) - f(-\varepsilon_c)] = -\frac{1}{2k_B T \operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon_c}{2k_B T}} \cdot \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial p} \quad (3.10)$$

та підставляючи отримані результати у формулу для провідності в середині зони ВНТ (3.4), після розділення дійсної та уявної частини, отримаємо вирази для внутризонної провідності

$$\operatorname{Re} \sigma_1 = -\frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \tau R \left( \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} I_1; \quad (3.11)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_1 = -\frac{e^2 \omega}{2\pi^2 \hbar R \left( \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} I_1. \quad (3.12)$$

Другий доданок у формулі (3.3) описує провідність, зумовлену міжзонними переходами електронів. Частота іж зонної переходів

$$\omega_{cv}(p, s) = \frac{2\varepsilon_c(p, s)}{\hbar}. \quad (3.13)$$

Для дійсної та уявної частин міжзонної провідності (3.5) маємо вирази

$$\operatorname{Re} \sigma_2 = -\frac{2\omega^2 e^2}{\pi^2 \hbar^2 \tau R} I_2, \quad (3.14)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_2 = \frac{\omega e^2}{\pi^2 \hbar^2 R} \left( \omega_{cv}^2 - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right) I_2, \quad (3.15)$$

$$I_2 = \sum_{s=1}^m \int_{-a}^a \frac{\omega_{cv}(p, s) \mathcal{K}_{cv}^2(p, s) [f(\varepsilon_c(p, s)) - f(-\varepsilon_c(p, s))]}{\left( \omega_{cv}^2 - \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}} dp.$$

### 3.2 Завдання до лабораторної роботи

1. Вихідні дані:
  - квазіімпульс електронів  $p$  у ВНТ змінюється в межах  $-a \leq p \leq a$ , де  $a = 2\pi\hbar/(3b)$ ,  $b = 0.142$  нм – міжатомна відстань у кристалічній ґратці графена;
  - інтеграл перекриття  $\gamma_0 = 2.7$  еВ;
  - час релаксації  $\tau = N_{\text{var}} \cdot 10^{-14}$  с, де  $N_{\text{var}}$  – номер варіанту;
  - частотний діапазон моделювання знаходиться в межах від  $\omega_{\text{min}} = 10^{13}$  до  $\omega_{\text{max}} = 10^{15}$  рад/с.
  - температура  $T = 5N_{\text{var}}$  К.
2. Для нехіральної нанотрубки типу «зигзаг» з  $m=14$  розрахувати спектри дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутрішньозонних, так і міжзонних переходів. З графіку визначити частоти резонансних піків і занести їх у таблицю. Порівняйте поведінку провідності у низькочастотній та високочастотній областях. Зробіть висновки.
3. Провести аналогічні п.2 розрахунки для  $m=15$ . Порівняйте отримані значення резонансних частот з частотами при  $m=14$ .
4. Розрахуйте за (3.13) частоту міжзонних переходів  $\omega_{\text{cv}}(p,s)$  для  $p=0$ , підбираючи такі значення номерів підзон  $s$ , щоб частота  $\omega_{\text{cv}}(p,s)$  співпадала із значеннями частоти резонансу в спектрах, розрахованих у п.2 і 3. Зробіть висновки.
5. Змінюючи індекс хіральності ВНТ в межах від 12 до 30 з кроком 1, по спектрах дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутрішньозонних, так і міжзонних переходів визначити значення частоти першого резонансного піку в спектрі провідності та занести їх у таблицю. Зробіть висновки.
6. Збільшивши температуру на 300 К, розрахуйте спектри дійсної та уявної частин провідності з урахуванням як внутрішньозонних, так і міжзонних переходів для нехіральної нанотрубки типу «зигзаг» з  $m=14$ . Зробіть висновок, як впливає температура на провідність ВНТ.

### 3.3 Контрольні запитання:

1. Що являє собою одношарова вуглецева нанотрубка?
2. Що називають вектором хіральності вуглецевої нанотрубки?
3. Які конфігурації вуглецевих нанотрубок виділяють залежно від значень індексів хіральності?
4. Яким вимогам повинні задовольняти індекси хіральності, щоб ВНТ мала напівпровідникові властивості?
5. Чому дорівнює радіус одношарової нанотрубки залежно від значень індексів хіральності?
6. Що таке електрична провідність?
7. Які типи електронних рухів дають внесок у провідність ВНТ? В яких частотних діапазонах внесок кожного з типів є домінуючим?

**Додаток А**

Приклад оформлення титульної сторінки

Міністерство освіти і науки України  
Національний університет «Запорізька політехніка»

Кафедра ІБтаН

**ЛАБОРАТОРНА РОБОТА**

з дисципліни

„НАНОМАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ЇХ ФОРМУВАННЯ“

---

(тема роботи)

Виконав:

студент \_\_\_\_ курсу, група БК-

---

(Ініціали, Прізвище)

Прийняв:

(посада)

---

(Ініціали, Прізвище)

20 \_\_ р.