3. Rodin, A. S. Srain-Induced Gap Modification in Black Phosphorus / A. S. Rodin, A. Carvalho, A. H. Castro Neto // Phys. Rev. Lett. – 2014. – №112. – 176801-5.

4. Kresse, G. VASP the guide: tutorial / G. Kresse, M. Marsman, J. Furthmüller – Vienna: University of Vienna, 2014 – 209 p.

5. Li, X.-B. Structures, stabilities, and electronic properties of defects in monolayer black phosphorus / X.-B. Li, P. Guo, T.-F. Cao, H. Liu, W.-M. Lau, L.-M. Liu // Scientific Reports. – 2015. – №5. – 10848-11.

6. Guo, Y. Vacancy and Doping States in Monolayer and bulk Black Phosphorus / Y. Guo, J. Robertson // Scientific Reports. – 2015. – № 5. – 14165-10.

А.И. Толкачёв (УО «ГГУ имени Ф. Скорины», Гомель)
Науч. рук. **В.Н. Капшай,** канд. физ.-мат. наук, доцент

ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

1. Как известно, многие задачи акустики, электродинамики и квантовой механики для звуковых, электромагнитных и других полей сводятся к решению уравнения Гельмгольца в ограниченных областях:

$$\Delta + k^2 \ \ \Psi(\vec{x}) = 0; \quad \vec{x} \in G. \tag{1}$$

При этом на поверхности Σ, ограничивающей область G, должны выполняться граничные условия (ГУ), например Дирихле или Неймана:

$$(ГУ)_1 \ \ U(\vec{x})\big|_{\vec{x}\in\Sigma} = 0; \qquad (ГУ)_2 \ \ \partial U(\vec{x})/\partial\vec{n}\big|_{\vec{x}\in\Sigma} = 0, \tag{2}$$

где $\vec{n}$ – внешняя нормаль к поверхности Σ. Такие задачи являются задачами на собственные значения (СЗ), – они имеют решения не при всех значениях параметра k^2, а только при некоторых: k_n^2. Например, для заключённой внутри поверхности Σ квантовой частицы массы m_0, которая описывается стационарным уравнением Шрёдингера [1,2]

$$-(\hbar^2/2m_0)\Delta + U(\vec{x}) \ \ \Psi(\vec{x}) = E\cdot\Psi(\vec{x}); \quad U(\vec{x}) = 0; \ \ \vec{x}\in G; \ \ U(\vec{x}) = \infty; \ \ \vec{x}\notin G, \tag{3}$$

имеем ГУ Дирихле, а СЗ энергии $E_n = \hbar^2 k_n^2/2m_0$. В данной работе сконцентрируем внимание на задачах для областей, которые удобно рассматривать в цилиндрических координатах.

Для решения уравнения Гельмгольца воспользуемся методом разделения переменных. Для оператора Лапласа и функции $\Psi(\vec{x})$ имеем

$$\Delta = \Delta_\rho + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}; \qquad \Psi(\vec{x}) = \Psi(\rho,\varphi,z) = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z), \tag{4}$$

поэтому нетрудно получить равенство

$$\frac{\Delta_\rho R(\rho)}{R(\rho)}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)}+\frac{Z''(z)}{Z(z)}+k^2=0. \qquad (5)$$

Из (5) следуют три обыкновенных дифференциальных уравнения:

$$Z''(z)=-\kappa^2 Z(z); \qquad \Phi''(\varphi)=-\nu^2\Phi(\varphi), \qquad (6)$$

$$\rho^2\Delta_\rho-\nu^2+\gamma^2\rho^2 \quad R(\rho)=0, \qquad (7)$$

где $\gamma^2=k^2-\kappa^2$, а κ^2 и ν^2 – константы разделения переменных. Общие решения уравнений (6)-(7) имеют вид

$$Z(z)=A_\kappa\cos\kappa z+B_\kappa\sin\kappa z, \qquad (8)$$

$$\Phi(\varphi)=A_\nu\cos\nu\varphi+B_\nu\sin\nu\varphi, \qquad (9)$$

$$R(\rho)=C_\nu J_\nu(\gamma\rho)+D_\nu N_\nu(\gamma\rho), \qquad (10)$$

где $J_\nu(z)$ ($N_\nu(z)$) – функции Бесселя (Неймана). Таким образом, имеем решения уравнения Гельмгольца в цилиндрических координатах в виде

$$\Psi(\vec{x})= \ C_\nu J_\nu(\gamma\rho)+D_\nu N_\nu(\gamma\rho) \quad A_\nu\cos\nu\varphi+B_\nu\sin\nu\varphi \quad A_\kappa\cos\kappa z+B_\kappa\sin\kappa z \ . \qquad (11)$$

Далее рассмотрим конкретные области и найдём к каким следствиям приводят граничные условия.

2. Начнём с цилиндрической области (рис. 1)

$$G= \ 0\le\rho\le\rho_0; \ \ 0\le\varphi\le 2\pi; \ \ 0\le z\le z_0 \ . \qquad (12)$$

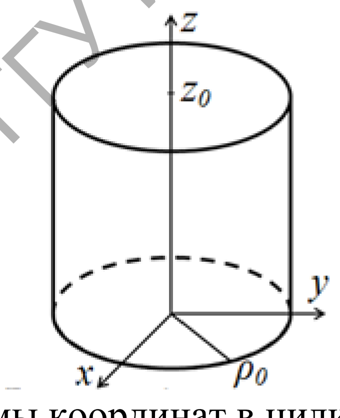


Рисунок 1 – Системы координат в цилиндрической области

Из ГУ Дирихле имеем для функций $Z(z)$; $\Phi(\varphi)$ и $R(\rho)$ условия

$$Z(0)=0; Z(z_0)=0; \Phi(2\pi)=\Phi(0); \Phi'(2\pi)=\Phi'(0); \left|R(\rho)\right|<\infty; R(\rho_0)=0. \qquad (13)$$

Из условий (13) для функции (8), нормируя её на единицу, имеем:

$$\kappa=\kappa_l=l\pi/z_0; \quad A_l=0; \qquad Z_l(z)=\sqrt{2/z_0}\sin \ l\pi z/z_0 \ ; \quad l=1,2,3,\ldots \qquad (14)$$

Для описывающих азимутальную зависимость функций $\Phi(\varphi)$ имеем $\nu=\nu_m=m, \ \ m=1,2,3,\ldots$ и две возможности (при $\nu=0$ – одну):

$$\Phi_m^{(c)}(\varphi)=\sqrt{1/\pi}\cos m\varphi; \qquad \Phi_m^{(s)}(\varphi)=\sqrt{1/\pi}\sin m\varphi. \qquad (15)$$

Условию $|R(\rho)| < \infty$ в начале координат удовлетворяют только функции Бесселя (функции Неймана имеют логарифмическую особенность), поэтому (при $\nu = m$) $D_m = 0$ и $R(\rho) = C_m J_m(\gamma\rho)$, причём должно выполняться условие Дирихле на боковой поверхности цилиндра

$$R(\rho_0) = C_m J_m(\gamma\rho_0) = 0 . \qquad (16)$$

Это условие означает, что

$$\gamma = \gamma_n^{(m)} = \mu_n^{(m)} / \rho_0 , \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \ , \qquad (17)$$

где $\mu_n^{(m)}$ – корни функций Бесселя индекса m, для больших значений номеров корней n их приближённые значения [3]

$$\mu_n^{(m)} \cong 3\pi/4 + \pi m/2 + n\pi. \qquad (18)$$

Константы C_m определяются из условия нормировки

$$\int_0^{\rho_0} |R(\rho)|^2 \rho d\rho = 1. \qquad (19)$$

Таким образом, волновые функции квантовомеханической частицы, находящейся внутри цилиндрического ящика, имеют вид

$$\Psi_{nml}^{(c,s)}(\rho,\varphi,z) = C_n^{(m)} J_m\left(\mu_n^{(m)}\rho/\rho_0\right) \Phi_m^{(c,s)}(\varphi) Z_l(z) . \qquad (20)$$

Соответствующие собственные значения энергии таковы:

$$E_{nml} = \hbar^2 k_{nml}^2 / 2m_0 ; \qquad k_{nml}^2 = \left(l\pi/z_0\right)^2 + \left(\mu_n^{(m)}/\rho_0\right)^2 . \qquad (21)$$

3. Рассмотрим теперь область G в виде клина (рис. 2):

$$G = \{0 \le \rho \le \rho_0; \ 0 \le \varphi \le \varphi_0; \ 0 \le z \le z_0\} . \qquad (22)$$

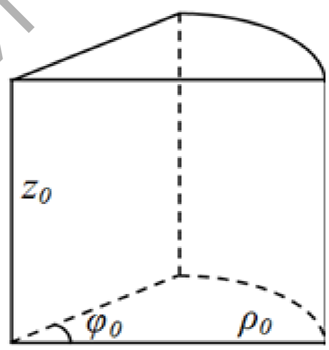


Рисунок 2 – Клиновидная область в цилиндрических координатах

Для такой области из ГУ Дирихле для функций (8)–(10) имеем

$$Z(0) = 0; \ Z(z_0) = 0; \ \Phi(0) = 0; \ \Phi(\varphi_0) = 0; \ |R(\rho)| < \infty; \ R(\rho_0) = 0 . \qquad (23)$$

Функции $Z(z)$ будут иметь тот же вид $Z_l(z)$ (14). Для описывающих азимутальную зависимость функций $\Phi(\varphi)$ имеем $\nu = \nu_m = m\pi/\varphi_0$, $m = 1, 2, \ldots$ и одну возможность

$$\Phi_{\nu_m}^{(s)}(\varphi) = \sqrt{2/\varphi_0} \sin \nu_m \varphi = \sqrt{2/\varphi_0} \sin\left(m\pi \varphi/\varphi_0\right) . \qquad (24)$$

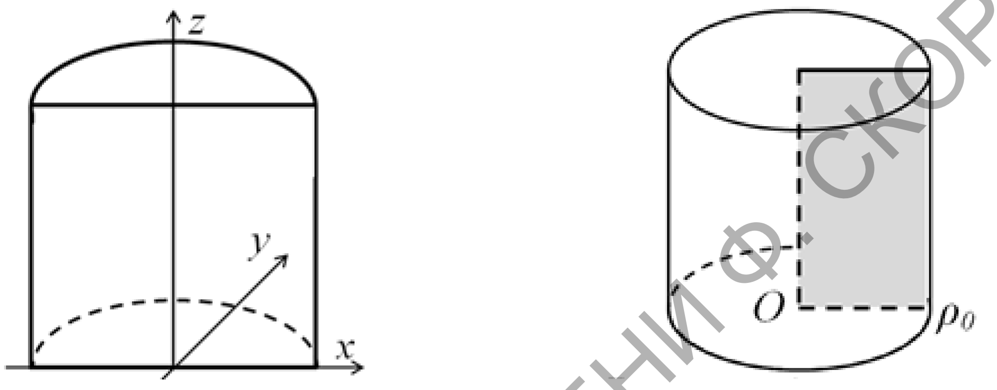
Радиальная зависимость теперь будет описываться функциями Бесселя индексов ν_m, корни которых $\mu_n^{(\nu_m)}$, а приближённые значения корней

$\mu_n^{(\nu_m)} \cong 3\pi/4 + \pi\nu_m/2 + n\pi$. При этом волновые функции имеют вид

$$\Psi_{nml}^{(s)}(\rho,\varphi,z) = C_n^{(\nu_m)} J_{\nu_m}\left(\mu_n^{(\nu_m)}\rho/\rho_0\right) \Phi_{\nu_m}^{(s)}(\varphi)\, Z_l(z). \qquad (25)$$

Соответствующие СЗ энергии описываются формулами (21), в которых $\mu_n^{(m)}$ заменяется на $\mu_n^{(\nu_m)}$.

Рассмотрим некоторые частные случаи клина (рисунок 3).



а) б)

Рисунок 3 – Частные случаи клина

а) – полуцилиндр; б) – цилиндр с перегородкой

При $\varphi_0 = \pi$ область G имеет вид полуцилиндра (рисунок 3 а). Для функций $\Phi(\varphi)$ в этом случае имеем

$$\begin{aligned} &\nu = \nu_m = m\pi/\pi = m, \quad m = 1, 2, ..., \\ &\Phi_{\nu_m}^{(s)}(\varphi) = \sqrt{2/\pi}\sin\nu_m\varphi. \end{aligned} \qquad (26)$$

СЗ энергии даются формулами (21), а волновые функции имеют вид

$$\Psi_{nml}^{(s)}(\rho,\varphi,z) = C_n^{(m)} J_m\left(\mu_n^{(m)}\rho/\rho_0\right) \Phi_{\nu_m}^{(s)}(\varphi)\, Z_l(z). \qquad (27)$$

Подчеркнём, что спектры энергий квантовой частицы в цилиндре и частицы в полуцилиндре одинаковы.

В случае цилиндра с перегородкой имеем область G в виде (рисунок 3 б):

$$G = \left\{0 \le \rho \le \rho_0;\ 0 < \varphi < 2\pi;\ 0 \le z \le z_0\right\}. \qquad (28)$$

Поскольку $\varphi_0 = 2\pi$, то $\nu = \nu_m = m/2$, $m = 1, 2, ...$, азимутальные функции $\Phi_{m/2}^{(s)}(\varphi) = \sqrt{1/\pi}\sin\left(m\varphi/2\right)$, а волновые функции и СЗ энергии таковы:

$$\Psi_{nml}^{(s)}(\rho,\varphi,z) = C_n^{(m/2)} J_{m/2}\left(\mu_n^{(m/2)}\rho/\rho_0\right) \Phi_{m/2}^{(s)}(\varphi)\, Z_l(z), \qquad (29)$$

$$E_{nml} = \hbar^2 k_{nml}^2/2m_0; \qquad k_{nml}^2 = \left(l\pi/z_0\right)^2 + \left(\mu_n^{(m/2)}/\rho_0\right)^2. \qquad (30)$$

Здесь $\mu_n^{(m/2)}$ – корни функций Бесселя полуцелых индексов, их приближённые значения таковы: $\mu_n^{(m/2)} = 3\pi/4 + m\pi/4 + n\pi$. Отметим, что в случае значения $m=1$ формула

$$\mu_n^{(1/2)} = 3\pi/4 + \pi/4 + n\pi = (n+1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \qquad (31)$$

для корней функции Бесселя и формула для СЗ энергии являются точными.

Литература

1. Мессиа, А. Квантовая механика: в 2-х т. / А. Мессиа. – М. : Наука, 1978. – Т. 1.– С. 79–81.

2. Коэн-Таннуджи, К. Квантовая механика: в 2-х т. / К. Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоэ. – М. : УРСС: ЛЕНАНД, 2015. – Т. 1.– С. 861–866.

3. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М. : Наука, 1988. – С. 332–365.

А.Г.Трафименко (УО «БГУИР», Минск)

Научн. рук. **А.Л. Данилюк,** канд. физ.-мат. наук, доцент

ЭМИССИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В ПРОВОДЯЩИХ КАНАЛАХ ДИОКСИДА ГАФНИЯ, ОБРАЗОВАННЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОБОЯ

В настоящее время наноструктуры на основе диоксида гафния перспективны для применения в энергонезависимой резистивной памяти с произвольной выборкой (RRAM). Однако, остается еще много нерешенных задач, наиболее важными из которых являются выявление механизма переключения диоксида гафния из высокоомного в низкоомное состояние, идентификация механизмов токопереноса при наличии высокой концентрации ловушек, определение вклада тепловых процессов. В данной работе, исходя из механизма формирования проводящих каналов (филаментов) при электрического пробое, рассмотрена модель эмиссии электронов в них. Проводящие каналы формируются путем сильного разогрева вещества в них при электрическом пробое, последующем остывании и формировании вакуумных и метастабильных областей [1]. При этом часть материала катода попадает в канал, образуя заостренный катод. Токоперенос осуществляется путем эмиссии электронов из катода в вакуумный промежуток и последующего взаимодействия их с метастабильной областью у анода.