

Лабораторная работа №1. Энергетический спектр электрона.

Теоретическая часть

1 Моделирование энергетического спектра электрона в твердом теле

Прежде чем приступить к моделированию энергетического спектра электронов в гетероструктурах, рассмотрим движения электрона в обычном кристалле. Потенциальная энергия электронов в кристалле является функцией координат с периодом, равным расстоянию между атомами. Электрон в периодическом поле обладает рядом общих свойств, не зависящих от конкретной формы периодического потенциала. Большинство из них можно выяснить при рассмотрении упрощенной модели кристалла, представляя его в виде цепочки атомов. При этом периодический потенциал становится одномерным. Форма периодического потенциала выбирается такой, чтобы расчет оказался наиболее простым. В этом случае возможно проведение строгого решения уравнения Шредингера. В модели Кронига–Пенни потенциал имеет вид прямоугольных ям (рисунок 1), которые чередуются с прямоугольными потенциальными барьерами.

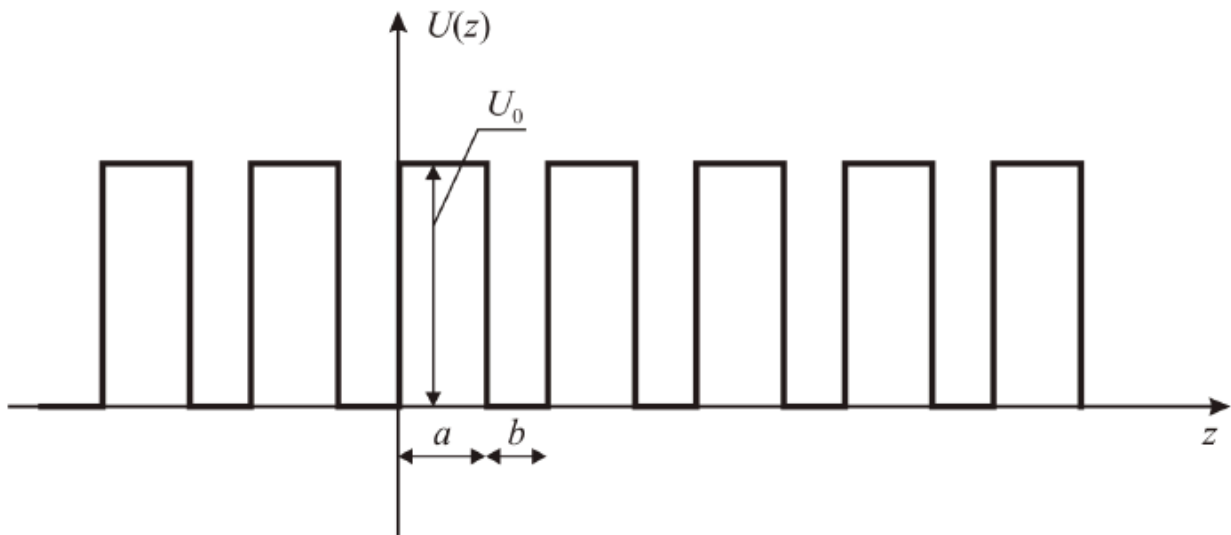


Рисунок 1 – Потенциальный рельеф для электрона в кристалле (модель Кронига–Пенни)

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } nc < z < nc + a \\ U_0, & \text{если } (nc + a) < z < (n + 1)c \end{cases} \quad (1)$$

где a – ширина ямы, b – ширина барьера, $c = a + b$ – постоянная кристаллической решетки, U_0 – высота барьера, $n = 0, \pm 1, \pm 2$. Решения уравнения Шредингера при $E < U_0$ могут быть записаны в виде:

$$\psi_n(z) = \begin{cases} A_n e^{j\alpha(z-nc)} + B_n e^{-j\alpha(z-nc)}, & \text{если } nc < z < nc + a \\ C_n e^{\beta[z-(nc+a)]} + D_n e^{-\beta[z-(nc+a)]}, & \text{если } (nc + a) < z < (n + 1)c \end{cases} \quad (2)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n E}, \quad (3)$$
$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n (U_0 - E)},$$

m_n — эффективная масса электрона в кристалле, j — мнимая единица.

Из граничных условий (4),

$$\begin{cases} \Psi_A = t_{11} \cdot \Psi_B + t_{12} \cdot \tilde{\Psi}_B, \\ \tilde{\Psi}_A = t_{21} \cdot \Psi_B + t_{22} \cdot \tilde{\Psi}_B, \end{cases} \quad (4)$$

принимая во внимание постоянство эффективной массы во всем кристалле, получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} A_n + B_n &= C_{n-1}e^{\beta b} + D_{n-1}e^{-\beta b}, \\ j\alpha A_n - j\alpha B_n &= C_{n-1}\beta e^{\beta b} - D_{n-1}\beta e^{-\beta b}, \\ A_n e^{j\alpha a} + B_n e^{-j\alpha a} &= C_n + D_n, \\ j\alpha A_n e^{j\alpha a} - j\alpha B_n e^{-j\alpha a} &= \beta C_n - \beta D_n. \end{aligned} \quad (5)$$

При этом между коэффициентами C_{n-1} , D_{n-1} и C_n , D_n существует связь, вытекающая из связи между волновыми функциями ψ_n и ψ_{n-1} . Так как функции ψ_n и ψ_{n-1} являются решениями одного и того же уравнения Шредингера, то они могут отличаться друг от друга только постоянным множителем, квадрат которого равен единице. То есть:

$$\Psi_n = \Psi_{n-1} e^{j\lambda}, \quad (6)$$

где λ – некий вещественный параметр.

Отсюда

$$\begin{aligned} C_{n-1} &= C_n e^{-j\lambda}, \\ D_{n-1} &= D_n e^{-j\lambda}. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя значения (8) в систему уравнений, получим систему из четырех однородных уравнений с четырьмя неизвестными A_n , B_n , C_n и D_n . Для того, чтобы эта система имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы определитель, составленный из коэффициентов этих уравнений, был равен нулю.

$$\tilde{\Psi}_A = l \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_A, \quad \tilde{\Psi}_B = l \cdot \frac{m_A}{m_B} \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_B, \quad (8)$$

$m_{A,B}$ – эффективные массы электронов в слоях А и В соответственно, l – произвольный параметр с размерностью длины, введенный чтобы элементы матрицы были безразмерными. Записав и раскрыв определитель, получим уравнение, определяющее значения энергии электрона E , для которых существуют нетривиальные решения системы.

$$\left| \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) \right| = \cos(\lambda). \quad (9)$$

Анализ уравнения затруднен тем, что энергия входит в α и β , однако его можно упростить, представив потенциал в ещё более идеализированном виде. Произведение βb определяет степень прозрачности потенциального барьера для электронов, в него входит ширина барьера b и высота барьера U_0 . Рассмотрим случай, когда ширина барьера устремляется к нулю, а высота – к бесконечности, причем так, что произведение $U_0 b$ остается постоянным. При этом, так как $U_0 \sim \beta^2$, то при $b \rightarrow 0$ и $U_0 \rightarrow \infty$ произведение $\beta b \rightarrow 0$. Тогда, подставляя (10) в (11):

$$P = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty \\ U_0 b = \text{const}}} \frac{\beta^2 a b}{2}, \quad (10)$$

$$\begin{cases} \psi|_A = \psi|_B \\ \frac{1}{m_A} \frac{\partial \psi}{\partial z}|_A = \frac{1}{m_B} \frac{\partial \psi}{\partial z}|_B \end{cases} \quad (11)$$

Перейдем к более простому уравнению:

$$\cos(\alpha a) + P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} = \cos(\lambda) \quad (12)$$

Уравнение (1) называется уравнением Кронига–Пенни. Параметр P пропорционален площади потенциального барьера; он характеризует степень прозрачности барьера для электронов или степень связанности электрона внутри потенциальной ямы. Для анализа уравнения (1) изобразим графически его левую часть как функцию аргумента (рисунок 2, сплошная линия). Действительные корни этого уравнения существуют только при тех значениях αa , при которых левая часть уравнения принимает значения в интервале $[-1; 1]$. На рисунке 2 заштрихованы области допустимых значений αa . Их ширина зависит от параметра P : чем он меньше, тем они шире и при фиксированном значении P становятся шире с увеличением αa , а значит и энергии.

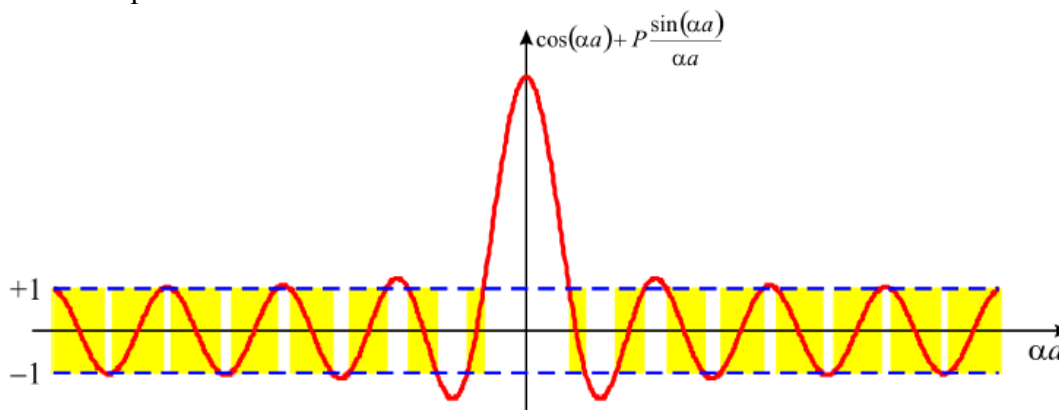


Рисунок 2 – Графический анализ уравнения Кронига–Пенни

Таким образом, энергия электрона в периодическом поле не может принимать любое значение, как для свободного электрона. Она ограничена рядом полос (зон) разрешенных значений, отделенных друг от друга запрещенными зонами – энергетический спектр электрона в периодическом поле имеет зонную структуру. Ширина разрешенных зон определяется степенью связанности электрона внутри потенциальной ямы.

2 Моделирование энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме

Если сформировать тонкий слой узкозонного материала между двумя достаточно толстыми слоями широкозонного материала, то для электрона, движущегося в поперечном к плоскостям слоёв направлении, может быть сформирован потенциальный рельеф, изображенный на рисунке 3 (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости материала ямы). Такого рода рельеф носит название прямоугольной потенциальной ямы. В данном разделе мы будем рассматривать симметричную потенциальную яму (рисунок 3, б).

2.1. С бесконечно высокими стенками. Рассмотрение начнем с идеализированного случая потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. В этом случае вне ямы функция $\psi(z, E)$ тождественно равна нулю, а внутри ямы удовлетворяет уравнению Шредингера вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} = E \cdot \psi(z, E) \quad (13)$$

с граничными условиями:

$$\psi\left(\pm \frac{a}{2}, E\right) = 0, \quad (14)$$

где a – ширина потенциальной ямы (толщина среднего слоя рассматриваемой трехслойной структуры). Тогда $\pm a/2$ — координаты интерфейсов между слоями.

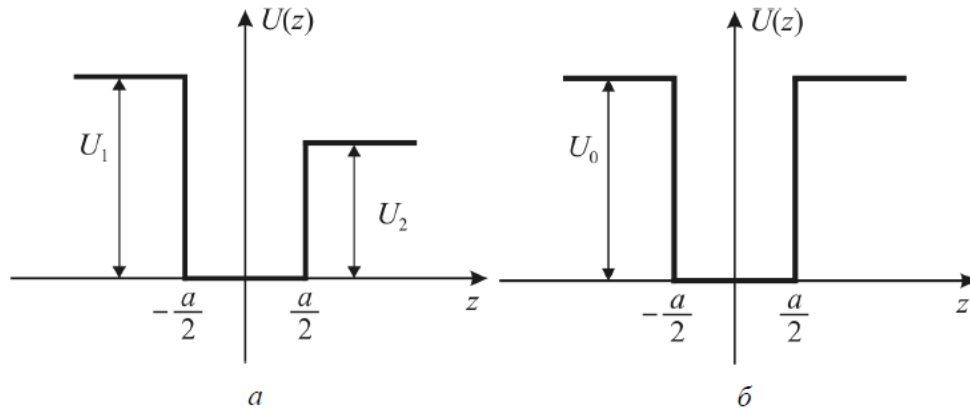


Рисунок 3 – Энергетическая диаграмма прямоугольной потенциальной ямы: а – несимметричной, б – симметричной

Из математической физики известно, что уравнение имеет решение лишь при дискретных значениях энергии E – собственных значениях данного уравнения:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu\pi}{a} \right)^2. \quad (15)$$

Система обладает симметрией по оси Oz относительно начала координат, поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера разбивается на подгруппы четных и нечетных решений:

$$\psi(z, E) = \begin{cases} C \cos\left(\frac{\pi\nu}{a}\right), & \text{если } \nu = 1, 3, 5, \dots \\ C \sin\left(\frac{\pi\nu}{a}\right), & \text{если } \nu = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (16)$$

Здесь C – нормировочный коэффициент.

2.2 Со стенками конечной высоты

В реальном случае стенки потенциальной ямы имеют конечную ширину, и для симметричной потенциальной ямы потенциал $U(z)$ имеет вид:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ U_0, & \text{если } |z| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (17)$$

Решения уравнения Шредингера записываются отдельно в каждой из трех областей, где потенциал $U(z)$ постоянен, в виде:

$$\begin{aligned} \psi_1(z) &= A_1 e^{\beta z}, \\ \psi_2(z) &= A_2 e^{j\gamma z} + B_2 e^{-j\gamma z}, \\ \psi_3(z) &= B_3 e^{-\beta z}. \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\beta = \sqrt{\frac{2m_B(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}} \quad (19)$$

m_A и m_B – эффективные массы электронов в материале А, образующем яму, и в материале В, образующем барьеры, соответственно. Решения ψ_1 и ψ_2 записаны с учетом того, что они

должны равняться нулю на бесконечности. Значения констант A_1 , A_2 , B_2 и B_3 находятся из граничных условий, которые после подстановки туда решений (3) принимают вид:

$$\begin{cases} A_1 e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_1 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = B_3 e^{-\frac{a}{2}\beta}, \\ A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = -B_3 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta}. \end{cases} \quad (20)$$

Система алгебраических уравнений (3) имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда её определитель равен нулю:

$$\text{Det} \begin{pmatrix} e^{-\frac{a}{2}\beta} & -e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & -e^{j\gamma\frac{a}{2}} & 0 \\ \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} & -\frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} & 0 \\ 0 & e^{j\gamma\frac{a}{2}} & e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & -e^{-\frac{a}{2}\beta} \\ 0 & \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} & -\frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} \end{pmatrix} = 0. \quad (21)$$

Раскрывая определитель и упрощая полученное выражение, приходим к уравнению:

$$\beta^2 m_A^2 \sinh(j\gamma a) + 2j\gamma\beta m_A m_B \cosh(j\gamma a) - \gamma^2 m_B^2 \sinh(j\gamma a) = 0, \quad (22)$$

определяющему разрешенные значения энергии электрона в квантовой яме. Уравнение (5) является трансцендентным и требует численного или графического решения. Система (3) имеет бесконечное множество решений, отличающихся друг от друга произвольным множителем. Выражая из этой системы константы A_2 , B_2 и B_3 через A_1 , получим частное решение в виде:

$$\begin{aligned} A_2 &= A_1 \cdot \frac{1}{2} \left(1 - j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{(j\gamma - \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_2 &= A_1 \cdot \frac{1}{2} \left(1 + j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-(j\gamma + \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_3 &= A_1 \cdot \left[\frac{1}{2} \left(1 - j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{j\gamma a} + \frac{1}{2} \left(1 + j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-j\gamma a} \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Порядок выполнения работы

1 Создать в MatchCAD файл «Энергетический спектр электрона в твердом теле».

2 Изобразить графически левую часть уравнения (1), схематически изобразить на получившемся графике зоны разрешенных и запрещенных значений αa . Проиллюстрировать, как изменяется ширина разрешенных зон при изменении параметра P . Проанализировать два крайних случая: $P = 0$ (электрон совершенно свободен) и $P = \infty$ (барьер совершенно непроницаем, электрон заперт в пределах одной потенциальной ямы).

Параметр

$$P := 4$$

Горизонтальные ограничивающие линии

$$S(\alpha a) := \cos(\alpha a) + P \cdot \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a}$$

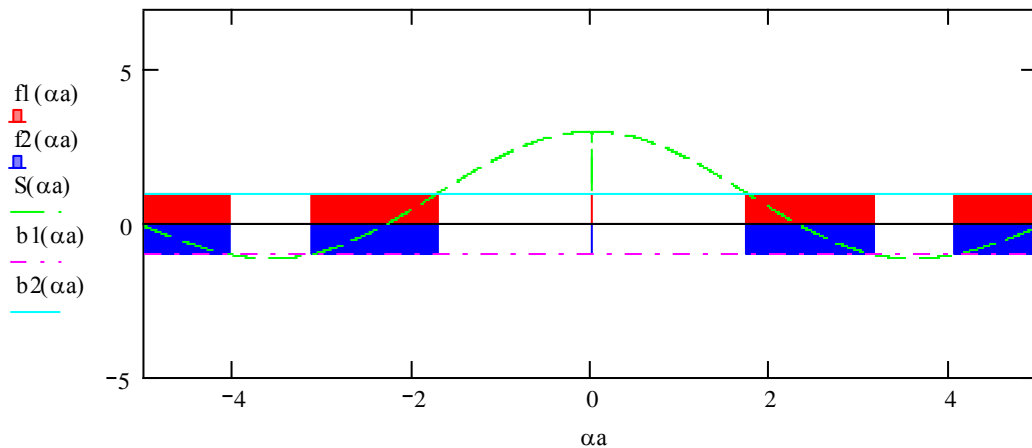
Отрисовывает разрешенные зоны

$$b1(\alpha a) := -1$$

$$f1(x) := \text{if}(|S(x)| - 1 > 0, 0, 1)$$

$$b2(\alpha a) := 1$$

$$f2(x) := \text{if}(|S(x)| - 1 > 0, 0, -1)$$



3 Построить графики огибающих волновых функций электрона в квантовой яме шириной 20 атомных монослоёв (11,3 нм) для первых четырех разрешенных уровней энергии. Материал ямы – GaAs. Согласно следующему алгоритму:

Основные константы

Масса электрона $m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$

Заряд электрона $q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$

Постоянная Планка с чертой $\hbar := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$

Свойства соединения $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

$m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$ (Г – минимум)

$E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247 \cdot x, 1.9 + 0.125 \cdot x + 0.143 \cdot x^2) \cdot q_e$

$a_0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ – постоянная решетки

Одиночная квантовая яма с бесконечно высокими стенками

Условия задачи:

Полупроводниковый материал ямы $x := 0.0$ $m_n A := m_n(x)$

Ширина квантовой ямы - 20 периодов решетки

$$a := 20 \cdot a_0(x) \quad a \cdot 10^9 = \blacksquare$$

Аналитически полученные уровни квантования в яме: $v := 1, 2, \dots, 10$

$$E(v) := \frac{\hbar^2}{2m_n A} \left(\frac{v \cdot \pi}{a} \right)^2 \quad k(v) := \frac{v \cdot \pi}{a} \quad E_{эв}(v, z) := \frac{E(v)}{q_e}$$

Аналитическое решение уравнения Шредингера для волновой функции в яме:

$$\psi_s(z, v) := \text{if}[(\text{mod}(v, 2)) \neq 0, \cos(k(v) \cdot z), \sin(k(v) \cdot z)]$$

$$\psi_{s1}(z, v) := \left(|\psi_s(z \cdot 10^{-9}, v)| \right)^2$$

v изменяется от 1 до 4. Построить $E_{эв}(v, z)$ при $z = -10 \dots 10$ и $\psi_{s1}(z, v)$

4 Построить огибающие волновых функций и квантованные уровни энергии в прямоугольной квантовой яме с бесконечно высокими стенками для различных значений ширины ямы: 10 и 30 атомных монослоев GaAs.

5 Построить огибающие волновых функций. Графики схематично наложить на зонную диаграмму гетеропереходов, образующих квантовую яму, при этом начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме. Материал ямы – GaAs, материал барьеров — $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$. Согласно следующему алгоритму:

Квантовая яма со стенками конечной высоты $j := \sqrt{-1}$

Основные константы

Масса электрона $m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$

Заряд электрона $q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$

Постоянная Планка с чертой $\hbar := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$

Свойства соединения $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

$m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$ (Г – минимум)

$E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247 \cdot x, 1.9 + 0.125 \cdot x + 0.143 \cdot x^2) \cdot q_e$

$a_0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ – постоянная решетки

Условия задачи:

Полупроводниковый материал квантовой ямы:

$$x_a := 0 \quad m_a := m_0(x_a)$$

Полупроводниковый материал барьеров:

$$x_b := 0.3 \quad m_b := m_0(x_b)$$

Ширина квантовой ямы - 20 периодов решетки:

$$a := 20 \cdot a_0(x_a) \quad a \cdot 10^9 = \blacksquare$$

Зонная диаграмма структуры (в электрон-вольтах, энергия отсчитывается от дна зоны проводимости в яме:

$$V := \frac{E_g(x_b) - E_g(x_a)}{2} \quad V_{ev} := \frac{V}{q_e} \quad V_{ev} = \blacksquare \quad \text{высота потенциального барьера}$$

$$E_c(z) := \text{if} \left(\left| z \right| < \frac{a}{2}, 0, V_{ev} \right) \quad U(z) := E_c(z) q_e$$

Построить $E_c(z)$ и $\beta(Ez), \gamma(Ez)$:

$$\gamma(Ez) := \frac{\sqrt{2m_a \cdot Ez}}{h} \quad \beta(Ez) := \frac{\sqrt{2m_b \cdot (V - Ez)}}{h}$$

$$D(E) := \begin{pmatrix} -\beta(E) \cdot \frac{a}{2} & -j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & 0 \\ \frac{\beta(E)}{m_b} \cdot e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & -\frac{j \cdot \gamma(E)}{m_a} \cdot e^{-j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & \frac{j \cdot \gamma(E)}{m_a} \cdot e^{j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & 0 \\ 0 & j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & -j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & -\beta(E) \cdot \frac{a}{2} \\ 0 & \frac{j \cdot \gamma(E)}{m_a} \cdot e^{j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & -\frac{j \cdot \gamma(E)}{m_a} \cdot e^{-j\gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & \frac{\beta(E)}{m_b} \cdot e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

Нули определителя находят графически:

$$\varepsilon := 0, 0.00001, 0.2 \quad \Delta(E) := \left| |D(E \cdot q_e)| \right|$$

Построить $\Delta(\varepsilon)$

Из графика зависимости определителя системы от энергии электрона можно определить приближенные значения разрешенных энергий электрона в квантовой яме:

$$E1 := 0.0236 \text{ qe} \quad E2 := 0.09266 \text{ qe} \quad E3 := 0.18521 \cdot \text{qe} \quad A1(E) := 3$$

$$A2(E) := A1(E) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(1 - j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_a}{m_b} \right) \cdot e^{\frac{(j\gamma(E) - \beta(E)) \cdot a}{2}}$$

$$B2(E) := A1(E) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(1 + j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_a}{m_b} \right) \cdot e^{-\frac{(j\gamma(E) + \beta(E)) \cdot a}{2}}$$

$$B3(E) := A1(E) \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \left(1 - j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_a}{m_b} \right) \cdot e^{j\gamma(E) \cdot a} + \frac{1}{2} \cdot \left(1 + j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_a}{m_b} \right) \cdot e^{-j\gamma(E) \cdot a} \right]$$

$$\psi_1(E, z) := A_1(E) \cdot e^{\beta(E) z}$$

$$\psi_2(E, z) := A_2(E) \cdot e^{j\gamma(E) z} + B_2(E) \cdot e^{-j\gamma(E) z}$$

$$\psi_3(E, z) := B_3(E) \cdot e^{-\beta(E) z}$$

$$\psi(E, z) := \text{if} \left[z < -\frac{a}{2}, (|\psi_1(E, z)|)^2, \text{if} \left[z > \frac{a}{2}, (|\psi_3(E, z)|)^2, (|\psi_2(E, z)|)^2 \right] \right]$$

Построить $E_s(z)$, $\psi(E_1, z)$, $\psi(E_2, z)$, $\psi(E_3, z)$. На графике z ограничить от -10^{-8} до 10^{-8}

Контрольные вопросы

1. От чего зависит энергия электрона в периодическом поле, каким уравнением описывается такая зависимость ?
2. Чем отличается поведение электрона в квантовой яме с бесконечно высокими стенками от поведения в квантовой яме с ограниченной высотой ?