Лабораторная работа №2. Моделирование движения электрона вблизи потенциальной ступеньки и в слоистых квантоворазмерных структурах

Теоретическая часть

1 Моделирование движения электрона вблизи потенциальной ступеньки

Рассмотрим модель рассеяния электрона на потенциальном рельефе, описываемом следующим выражением:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } z < 0, \\ U_0, & \text{если } z \geq 0, \end{cases} \tag{1}$$

Область 1 сформирована узкозонным материалом A, область 2 – широкозонным материалом B.

Будем считать, что источник электронов находится в области 1 и бесконечно удален от границы раздела (интерфейса) между областями 1 и 2. Электроны движутся от источника в положительном направлении оси Oz, обладая энергией E.

Решение уравнения Шредингера с потенциалом вида (2) в области 1 будет иметь вид (3):

$$\psi_n = \psi_{n-1} e^{j\lambda}, \tag{2}$$

$$\psi_1(z, E) = A_1 e^{j\gamma_1 z} + B_1 e^{-j\gamma_1 z}, \tag{3}$$

где

$$\gamma_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$$

m_1 – эффективная масса электрона в материале A. То есть, ψ_1 представляет собой суперпозицию падающей и отраженной волны де Бройля, A_1 – амплитуда волны, распространяющейся от источника электронов к потенциальной ступеньке, B_1 – амплитуда волны, отраженной от потенциальной ступеньки.

Учитывая однородность среды в области 2 (по постановке задачи в области 2 нет источников электронов и нет неоднородностей, от которых они могли бы отразиться) и условие конечности волновой функции во всех точках пространства, в том числе и в точке z = + ∞ решение уравнения Шредингера с потенциалом вида (2) в области 2 можно записать в виде:

$$\psi_2(z, E) = A_2 e^{j\gamma_2 z}, \tag{4}$$

где

$$\gamma_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E - U_0)}{\hbar^2}}$$

m_2 – эффективная масса электрона в материале *B*. То есть, в области 2 имеет место только волна де Бройля, распространяющаяся в положительном направлении оси *Oz*, A_2 – амплитуда этой волны.

Коэффициенты A_2 и B_1 могут быть выражены через коэффициент A_1 с использованием граничных условий.

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ \gamma_1 A_1 - \gamma_1 B_1 = \gamma_2 B_2, \end{cases} \tag{5}$$

Откуда

$$B_1 = A_1 \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad A_2 = A_1 \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2} \tag{6}$$

Коэффициент A1 может быть найден из условия нормировки волновой функции, которая имеет смысл вероятности. При изображении графиков огибающих волновых функций его можно положить равным произвольному числу, поскольку физический интерес представляет не амплитуда падающей электронной волны, а отношения амплитуд волн прошедших и отраженных к амплитуде волны падающей.

Физический интерес представляют коэффициенты отражения и прохождения, определяемые отношением плотностей потоков отраженных и прошедших через интерфейс электронов к плотности потока падающих на интерфейс электронов. Определим вектор плотности потока вероятности J следующим образом (в нашем одномерном случае это будет скаляр):

$$J = \frac{j\hbar}{2m}\left(\psi \cdot \psi^{*\prime} - \psi^{*} \psi'\right). \tag{7}$$

Тогда коэффициент прохождения D и коэффициент отражения R определяются следующим образом:

$$D = \lim_{|z|\to\infty} \frac{|J_2^+|}{|J_1^+|}, \qquad R = \lim_{|z|\to\infty} \frac{|J_1^-|}{|J_1^+|}, \tag{8}$$

где J_1^+ – вектор плотности потока вероятности для электронов, падающих на границу раздела со стороны области 1, J_1^- – вектор плотности потока вероятности для электронов, отраженных от границы раздела обратно в область 1, J_2^+ – вектор плотности потока вероятности для электронов, прошедших через границу раздела в область 2. Следует отметить, что данная постановка задачи не предусматривает рекомбинацию (поглощение) электронов как на границе между областями 1 и 2, так и в самих областях.

$$C_{n-1} = C_n e^{-j\lambda}, \qquad D_{n-1} = D_n e^{-j\lambda}. \tag{9}$$

$$\cos(\alpha a)\cosh(\beta b) + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta}\sin(\alpha a)\sinh(\beta b) = \cos(\lambda). \tag{10}$$

$$P = \lim_{\substack{b\to 0\\ U_0\to\infty\\ U_0 b = const}} \frac{\beta^2 ab}{2}, \tag{11}$$

Подставляя выражения (9) и (10) в (11), получим:

$$J_1^+ = \hbar\frac{\gamma_1}{m_1}|A_1|^2,\; J_1^- = -\hbar\frac{\gamma_1}{m_1}|B_1|^2,\; J_2^+ = \hbar\frac{\gamma_2}{m_2}|A_2|^2. \tag{12}$$

Тогда выражения для коэффициентов прохождения и отражения от потенциальной ступеньки примут вид:

$$D = \frac{|\gamma_2|}{|\gamma_1|}\frac{m_1}{m_2}\frac{|A_2|^2}{\left||A_1|\right|^2}, \quad R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \qquad \text{или} \qquad D = \frac{m_1}{m_2}\frac{4|\gamma_1\gamma_2|}{|\gamma_1+\gamma_2|^2}, \quad R = \frac{|\gamma_1-\gamma_2|^2}{|\gamma_1+\gamma_2|^2}. \tag{13}$$

Отметим, что в случае, когда энергия электрона $E < U_0$, величина γ_2 становится мнимой и функция ψ_2 принимает вид спадающей экспоненты:

$$\psi_2(z,E) = A_2 e^{-\beta z} \qquad \text{где} \qquad \beta = j\gamma_2 = \sqrt{\frac{2m_2(U_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{14}$$

В этом случае поток частиц в области 2 отсутствует ($J_2^+ = 0$), а коэффициент отражения равен 1. Несмотря на это, в области 2 волновая функция отлична от нуля, то есть имеется определенная, хотя и малая, вероятность того, что электрон проникает под потенциальный барьер. Кроме того, когда энергия электрона $E > U_0$, имеется конечная вероятность отражения частицы от потенциального барьера.

2 Моделирование движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины

Потенциальный рельеф для электрона в такой структуре можно записать в виде:

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1}, & \text{если } z < 0, \\ E_{c2}, & \text{если } 0 < z < a, \\ E_{c3}, & \text{если } z > a, \end{cases} \tag{15}$$

где a – толщина слоя широкозонного материала.

Как и в предыдущем случае будем считать, что источник электронов находится в области 1 и бесконечно удален от границы раздела между областями 1 и 2. Электроны движутся от источника в положительном направлении оси Oz, обладая энергией E. Решения уравнения Шредингера в областях 1, 2 и 3, в каждой из которых потенциал U(z) постоянен, можно записать в виде, соответственно:

$$\begin{aligned} \psi_1(z,E) &= A_1 e^{j\gamma_1 z} + B_1 e^{-j\gamma_1 z}, \\ \psi_2(z,E) &= A_2 e^{j\gamma_2 z} + B_2 e^{-j\gamma_2 z}, \\ \psi_3(z,E) &= A_3 e^{j\gamma_3 z}, \end{aligned} \tag{16}$$

где
$$\gamma_i = \sqrt{\frac{2m_i(E - E_{ci})}{\hbar^2}},$$

$i = 1,2,3$; m_i и E_{ci} – эффективная масса и энергия дна зоны проводимости i-ой области.

Коэффициенты B_1 , A_2 , B_2 и A_3 могут быть выражены через коэффициент A_1 с использованием граничных условий, получим:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ \dfrac{\gamma_1}{m_1}(A_1 - B_1) = \dfrac{\gamma_2}{m_2}(A_2 - B_2), \\ A_2 e^{j\gamma_2 a} + B_2 e^{-j\gamma_2 a} = A_3 e^{j\gamma_3 a}, \\ \dfrac{\gamma_2}{m_2}\left(A_2 e^{j\gamma_2 a} - B_2 e^{-j\gamma_2 a}\right) = \dfrac{\gamma_3}{m_3} A_3 e^{j\gamma_3 a}, \end{cases} \tag{17}$$

Откуда

$$A_3 = 4\frac{\gamma_1}{m_1}\frac{\gamma_2}{m_2}\frac{1}{\zeta}\cdot A_1,$$

Где
$$\zeta = \left(\frac{\gamma_1}{m_1} + \frac{\gamma_2}{m_2}\right)\left(\frac{\gamma_2}{m_2} + \frac{\gamma_3}{m_3}\right)e^{j(\gamma_3 - \gamma_2)a} + \left(\frac{\gamma_1}{m_1} - \frac{\gamma_2}{m_2}\right)\left(\frac{\gamma_2}{m_2} - \frac{\gamma_3}{m_3}\right)e^{j(\gamma_3 + \gamma_2)a}$$

$$A_2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\gamma_3}{\gamma_2}\frac{m_2}{m_3}\right)e^{j(\gamma_3 - \gamma_2)a} \cdot A_3,\ B_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\gamma_3}{\gamma_2}\frac{m_2}{m_3}\right)e^{j(\gamma_3 + \gamma_2)a} \cdot A_3,$$

$$B_1 = A_2 + B_2 - A_1.$$

Коэффициенты прохождения и отражения от потенциального барьера могут быть вычислены следующим образом:

$$D = \lim_{|z|\to\infty}\frac{|J_3^+|}{|J_1^+|} = \frac{|\gamma_3|}{|\gamma_1|}\frac{m_1}{m_3}\frac{|A_3|^2}{|A_1|^2},$$

$$R = \lim_{|z|\to\infty}\frac{|J_1^-|}{|J_1^+|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad (18)$$

Таким образом, расчеты показывают, что при достаточно тонком потенциальном барьере для значений энергии электрона E $<U_0$ имеется конечная вероятность его прохождения через потенциальный барьер из области 1 в область 3. Этот явление носит название туннельного эффекта и является чисто квантово-механическим. Также следует отметить, что при энергии электрона E $>$ U_0 зависимость коэффициента прохождения от энергии имеет вид квазипериодической осциллирующей функции. При этом существуют избранные значения энергии электрона, для которых вследствеи интерференции электронных волн, отраженных от границ барьера, амплитуда волновой функции в области барьера будет больше, чем в других областях.

Порядок выполнения работы

1 Создать в MatchCAD файл «Моделирование движения электрона».

2 Рассмотреть структуру, представляющую собой интерфейс между двумя полубесконечными областями $Al_xGa_{1-x}As$ и GaAs для значения параметра x = 0,4.

3 Построить потенциальный профиль для электронов в рассматриваемой структуре, определить высоту потенциального барьера U_0 , отсчитывая энергию от дна зоны проводимости GaAs.

4 Построить зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0 до $3U_0$.

5 Построить огибающие волновых функций вблизи интерфейса между областями 1 и 2 для различных значений энергии электрона и схематически наложить их на потенциальный профиль структуры; проиллюстрировать следующие факты:

а) при энергии электрона $E > U_0$ имеется конечная вероятность отражения частицы от потенциального барьера, то есть перед барьером есть встречный поток частиц;

б) при $E < U_0$ все частицы отражаются от потенциальной ступеньки, то есть в области барьера поток частиц отсутствует;

в) имеется определенная вероятность проникновения частицы с энергией $E < U_0$ внутрь потенциального барьера.

Основные константы

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

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

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

$j := \sqrt{-1}$

Свойства соединения $Al_xGa_{1-x}As$

$mn(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot me$ (Г – минимум)

$Eg(x) := \mathrm{if}\left(x < 0.45, 1.424 + 1.247 \cdot x, 1.9 + 0.125 \cdot x + 0.143 \cdot x^2\right) \cdot qe$

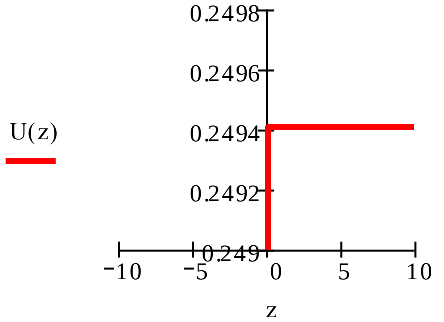
$a0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ –постоянная решетки

Движение электрона вблизи потенциальной ступеньки

$x1 := 0$ $Eg1 := Eg(x1)$ $m1 := mn(x1)$

$x2 := 0.4$ $Eg2 := Eg(x2)$ $m2 := mn(x2)$

$U0 := \dfrac{Eg2 - Eg1}{2}$ $\dfrac{U0}{qe} = 0.2494$ $U(z) := \mathrm{if}\left(z < 0, 0, \dfrac{U0}{qe}\right)$



$\gamma1(E) := \sqrt{\dfrac{2m1 \cdot E}{h^2}}$ $\gamma2(E) := \sqrt{\dfrac{2m2 \cdot (E - U0)}{h^2}}$

$A1(E) := 0.08$ $B2(E) := 0$

$B1(E) := A1(E) \cdot \dfrac{\gamma1(E) - \gamma2(E)}{\gamma1(E) + \gamma2(E)}$

$A2(E) := A1(E) \cdot \dfrac{2 \cdot \gamma1(E)}{\gamma1(E) + \gamma2(E)}$

$$\psi1(E,z) := A1(E)\cdot e^{j\cdot\gamma1(E)\cdot z} + B1(E)\cdot e^{-j\cdot\gamma2(E)\cdot z}$$

$$\psi2(E,z) := A2(E)\cdot e^{j\cdot\gamma2(E)\cdot z}$$

$$\psi(E,z) := \mathrm{if}\left[z<0,\left(\left|\psi1(E,z)\right|\right)^2,\left(\left|\psi2(E,z)\right|\right)^2\right]$$

$E1 := 0.1\cdot qe \quad E2 := 0.2\cdot qe \quad E3 := U0 \quad E4 := 0.32\cdot qe \quad E5 := 0.35\cdot qe$

$\delta1 := \frac{E1}{qe} \quad \delta2 := \frac{E2}{qe} \quad \delta3 := \frac{E3}{qe} \quad \delta4 := \frac{E4}{qe} \quad \delta5 := \frac{E5}{qe}$

Построить U(z) и ψ (E,z) для E1, E2, E3, E4, E5. Z ограничить от – 2 10^{-8} до 2 10^{-8}

Рассчитать коэффициенты отражения и прохождения. Построить график $(|R(E)|)^2$ и $(|D(E)|^2)$ где Е изменяется от 0 до 0,5.

Коэффициент отраже ния (комплексный) Коэффициент прохождения (комплексный)

$$\gamma1(E) := \sqrt{\frac{2m1\cdot E}{h^2}} \qquad \gamma2(E) := \sqrt{\frac{2m2\cdot\left(E-\frac{U0}{qe}\right)}{h^2}}$$

$$R(E) := \left(\frac{\gamma2(E)-\gamma1(E)}{\gamma1(E)+\gamma2(E)}\right)^2 \qquad D(E) := \mathrm{if}\left[E<\frac{U0}{qe},0,\frac{4\cdot\gamma1(E)\cdot\gamma2(E)}{\left(\gamma1(E)+\gamma2(E)\right)^2}\right]$$

6 Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из трех слоёв: GaAs –$Al_xGa_{1-x}As$ – GaAs. Слои 1й и 3й – полубесконечные, слой 2й – туннельно-тонкий.

Основные константы

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

Заряд электрона $qe := 1.60217733\ 10^{-19}$ $\quad j := \sqrt{-1}$

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

Свойства соединения $Al_xGa_{1-x}As$

$mn(x) := (0.067 + 0.083\cdot x)\cdot me$ (Г – минимум)

$Eg(x) := \mathrm{if}\left(x<0.45, 1.424+1.247\cdot x, 1.9+0.125\cdot x+0.143\cdot x^2\right)\cdot qe$

$a0(x) := (0.56533 + 0.00078\cdot x)\cdot 10^{-9}$ –постоянная решетки

Движение электрона через симметричный потенциальный барьер конечной толщины

$x1(x) := 0 \quad Eg1(x) := Eg(x1(x)) \quad m1(x) := mn(x1(x))$

$x2(x) := x \quad Eg2(x) := Eg(x2(x)) \quad m2(x) := mn(x2(x))$

$x3(x) := 0 \quad Eg3(x) := Eg(x3(x)) \quad m3(x) := mn(x3(x))$

Толщина потенциального барьера - N атомных монослоев

$$a(x,N) := N \cdot a0(x2(x)) \qquad a(0.3,20)\cdot 10^{9} = \blacksquare$$

$$U1(x) := \frac{Eg1(x)}{2} \qquad U2(x) := \frac{Eg2(x)}{2} \qquad U3(x) := \frac{Eg3(x)}{2}$$

$$U(z,x,N) := \mathrm{if}(z < 0, U1(x), \mathrm{if}(z > a(x,N), U3(x), U2(x)))$$

$$Uev(z,x,N) := \frac{U(z,x,N)}{qe}$$

Построить потенциальный барьер при помощи функции Uev(z,x,N) для 10, 20, 30 монослоев и для барьера толщины 0,3, 0,4 , 0,2.

$$\gamma1(E,x) := \sqrt{\frac{2\,m1(x)\cdot(E - U1(x))}{h^2}}$$

$$\gamma2(E,x) := \sqrt{\frac{2\,m2(x)\cdot(E - U2(x))}{h^2}}$$

$$\gamma3(E,x) := \sqrt{\frac{2\,m3(x)\cdot(E - U3(x))}{h^2}}$$

$$\xi(E,x,N) := \left[\left(\frac{\gamma1(E,x)}{m1(x)} + \frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)}\right)\cdot\left(\frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)} + \frac{\gamma3(E,x)}{m3(x)}\right)\cdot e^{j\cdot(\gamma3(E,x)-\gamma2(E,x))\cdot a(x,N)}\right.$$
$$\left. + \left(\frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)} - \frac{\gamma3(E,x)}{m3(x)}\right)\cdot e^{j\cdot(\gamma3(E,x)+\gamma2(E,x))\cdot a(x,N)}\right]$$

$$A1(E) := 0.2$$

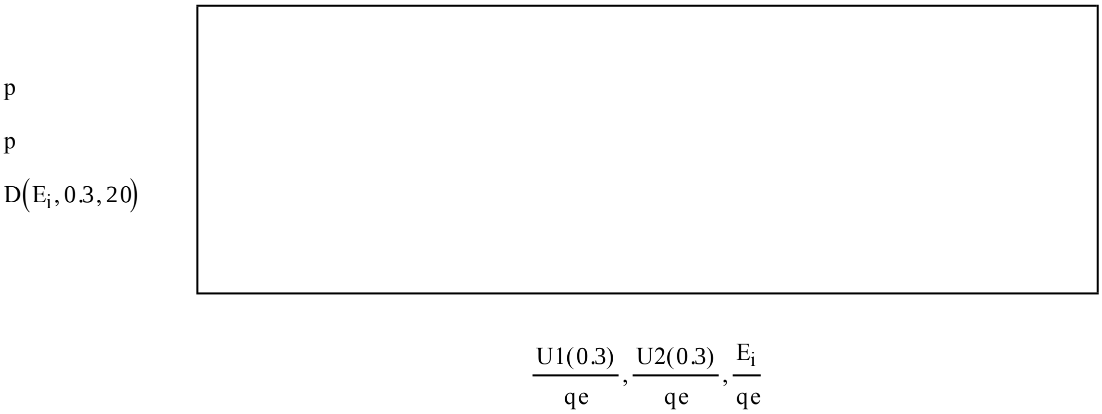
$$A3(E,x,N) := \frac{4\cdot\gamma1(E,x)\cdot\gamma2(E,x)}{m1(x)\cdot m2(x)}\cdot\frac{1}{\xi(E,x,N)}\cdot A1(E)$$

$$D(E,x,N) := \mathrm{if}\left[E \ge U1(x), \frac{\gamma3(E,x)}{\gamma1(E,x)}\,\frac{m3(x)}{m1(x)}\cdot\frac{(|A3(E,x,N)|)^2}{(|A1(E)|)^2}, 0\right]$$

$$E1 := 0.5\cdot qe \qquad E2 := 1.5\cdot qe \qquad NE := 1000 \qquad i := 0..NE$$

$$dE := \frac{E2 - E1}{NE} \qquad E_i := E1 + i\cdot dE$$

Построить следующий график. Объяснить его физический смысл



Минимумы и максимумы коэффициента прохождения (определены графически)

$$Emax := \begin{pmatrix} 0.931 \\ 1.027 \end{pmatrix} \cdot qe \qquad Emin := \begin{pmatrix} 0.964 \\ 1.092 \end{pmatrix} \cdot qe$$

$$A2(E,x,N) := \frac{\frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)} + \frac{\gamma3(E,x)}{m3(x)}}{2 \cdot \frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)}} \cdot A3(E,x,N) \cdot e^{j(\gamma3(E,x)-\gamma2(E,x))\cdot a(x,N)}$$

$$B2(E,x,N) := \frac{\frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)} - \frac{\gamma3(E,x)}{m3(x)}}{2 \cdot \frac{\gamma2(E,x)}{m2(x)}} \cdot A3(E,x,N) \cdot e^{j(\gamma3(E,x)+\gamma2(E,x))\cdot a(x,N)}$$

$$B1(E,x,N) := A2(E,x,N) + B2(E,x,N) - A1(E)$$

$$\psi1(E,z,x,N) := A1(E) \cdot e^{j\cdot\gamma1(E,x)\cdot z} + B1(E,x,N) \cdot e^{-j\cdot\gamma1(E,x)\cdot z}$$

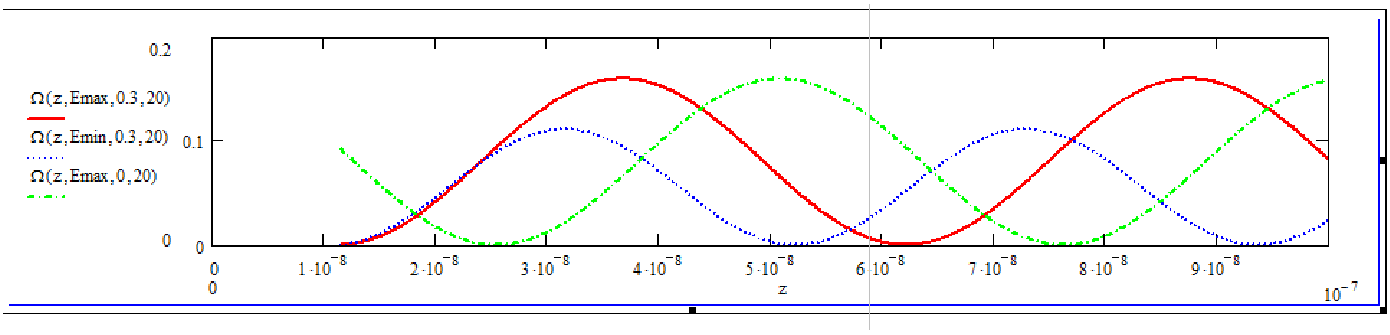
$$\psi2(E,z,x,N) := A2(E,x,N) \cdot e^{j\cdot\gamma2(E,x)\cdot z} + B2(E,x,N) \cdot e^{-j\cdot\gamma2(E,x)\cdot z}$$

$$\psi3(E,z,x,N) := A3(E,x,N) \cdot e^{j\cdot\gamma3(E,x)\cdot z}$$

$$\psi(z,E,x,N) := \mathrm{if}(z < 0, \psi1(E,z,x,N), \mathrm{if}(z > a(x,N), \psi3(E,z,x,N), \psi2(E,z,x,N)))$$

$$\Omega(z,E,x,N) := (|\psi(z,E,x,N)|)^2$$

Построить $\Omega(z, E, x, N)$ для Emax и Emin при различной толщине барьера и числе монослоев. На графике z ограничить от 0 до 10^{-7}.



Контрольные вопросы

1. От чего зависит эффективная глубина проникновения электрона под потенциальный барьер ?
2. Что такое туннельный эффект ? Условия его возникновения ?