

# Лабораторная работа №3. Моделирование движения электрона при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв

## Теоретическая часть

### 1 Метод матриц переноса и его применение для моделирования движения электрона в сложном потенциальном рельефе

Как можно заметить из уже рассмотренных примеров, при решении задач о движении электронов в слоисто-неоднородных средах решения уравнения Шредингера записываются отдельно в каждой из областей, где потенциал  $U(z)$  постоянен, в виде суперпозиции падающей и отраженной волн де Бройля, а для нахождения амплитуд этих волн используются граничные условия на интерфейсах между слоями. Такой подход позволяет легко формализовать расчет амплитуд волн де Бройля и коэффициентов отражения и прохождения в многослойных средах с использованием метода матриц переноса. Рассмотрим структуру, состоящую из  $N$  слоёв, заключенных между полубесконечными областями, причем в каждом слое и в крайних областях потенциал  $U(z)$  постоянен (рисунок 1):

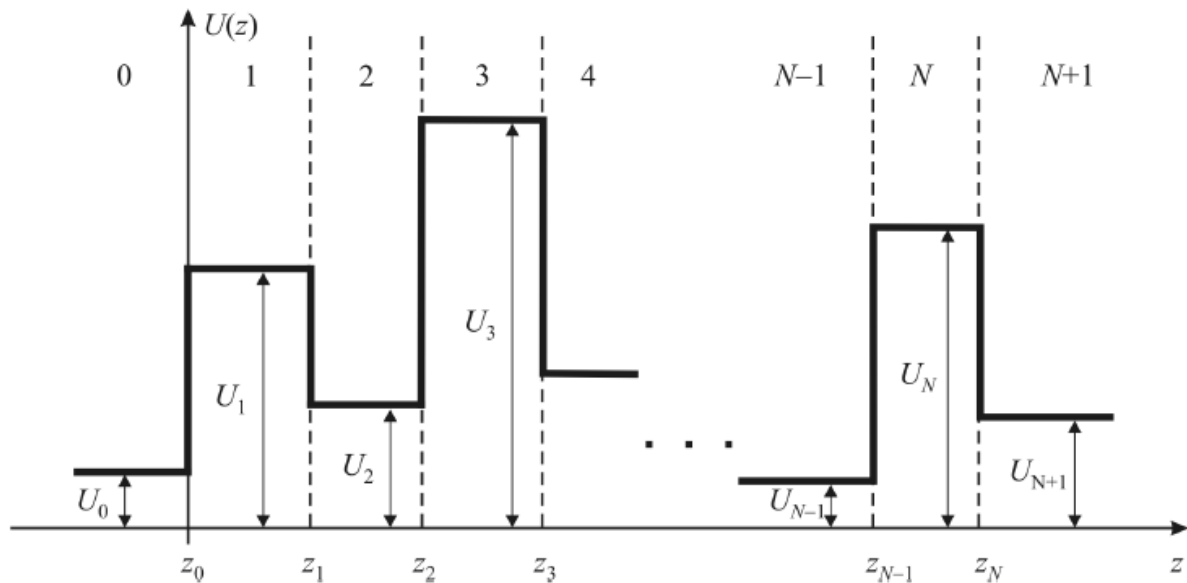


Рисунок 1 – Энергетическая диаграмма многослойной гетероструктуры

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & \text{если } z < z_0, \\ U_i, & \text{если } z_{i-1} < z < z_i, i = 1, \dots, N, \\ U_{N+1}, & \text{если } z > z_N, \end{cases} \quad (1)$$

где  $z_k$  – координата границы между  $k$ -ой и  $(k+1)$ -ой областями,  $k = 0, \dots, N$ .

Как и прежде, будем считать, что источник электронов находится в области 0 и бесконечно удален от слоистой структуры. Электрон движется от источника в положительном направлении оси  $Oz$ , обладая энергией  $E$ . Решение уравнения Шредингера для  $i$ -ой области ( $i = 0, \dots, N+1$ ) записывается в виде:

$$\psi_i(z, E) = A_i e^{j\gamma_i z} + B_i e^{-j\gamma_i z}, \quad (2)$$

где  $A_i$  и  $B_i$  – амплитуды падающей и отраженной волн де Бройля в  $i$ -ой области соответственно

$$\gamma_i(E) = \sqrt{\frac{2m_i(E - U_i)}{\hbar^2}} \quad (3)$$

А  $m_i$  – эффективная масса в  $i$ -ой области. Граничные условия принимают вид:

$$\begin{cases} \Psi_k(z_k) = \Psi_{k+1}(z_k), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \Psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \Psi_{k+1}}{\partial z}(z_k). \end{cases} \quad (4)$$

Получим систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов  $A_i, B_i$ :

$$\begin{cases} A_k e^{j\gamma_k z_k} + B_k e^{-j\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{j\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-j\gamma_{k+1} z_k}, \\ jA_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{j\gamma_k z_k} - jB_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{-j\gamma_k z_k} = jA_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{j\gamma_{k+1} z_k} - jB_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{-j\gamma_{k+1} z_k} \end{cases} \quad (5)$$

которая путем алгебраических преобразований может быть приведена к виду:

$$\begin{cases} A_{k+1} = A_k \cdot \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} + B_k \cdot \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k}, \\ B_{k+1} = A_k \cdot \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k} + B_k \cdot \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k}, \end{cases} \quad (6)$$

или в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{k,k+1} \cdot \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix} \quad (7)$$

где  $\mathbf{T}_{k,k+1}$  – матрица передачи волны де Бройля из области  $k$  в область  $k+1$ :

$$\mathbf{T}_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1}+\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} \end{pmatrix} \quad (8)$$

Из рекуррентного соотношения, с учетом того, что по условию задачи в области  $N+1$  нет встречной электронной волны (т.е.  $B_{N+1}=0$ ), можно записать следующую систему из двух уравнений для амплитуд волн де Бройля в полубесконечных областях до и после структуры:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{00} & \mathbf{T}_{01} \\ \mathbf{T}_{10} & \mathbf{T}_{11} \end{pmatrix} = \prod_{k=N}^0 \mathbf{T}_{k,k+1}$$

– матрица передачи волны де Бройля через всю слоистую структуру. Следует отметить, что матрица  $\mathbf{T}$  полностью определяется параметрами материалов структуры и прилегающих областей. Коэффициенты отражения и прохождения электронной волны через структуру могут быть выражены через элементы матрицы передачи из системы уравнений:

$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2,$$

$$D = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|A_{N+1}|^2}{|A_0|^2} = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \left| \frac{\mathbf{T}_{11} \mathbf{T}_{00} - \mathbf{T}_{01} \mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2. \quad (10)$$

Таким образом, с использованием матричного метода могут быть рассчитаны коэффициенты отражения и прохождения электронных волн через слоистую структуру при задании параметров всех входящих в неё слоёв, а также амплитуды волн де Бройля в каждой точке структуры, отнесенные к амплитуде падающей на структуру электронной волны.

## 2 Моделирование движения электрона через двухбарьерную и трехбарьерную квантоворазмерную структуру

Мы уже рассмотрели задачи, касающиеся поведения частиц в системах с изолированными квантовыми ямами и потенциальными барьерами. Как уже отмечалось, современные технологии выращивания эпитаксиальных структур позволяют формировать многослойные системы со сложным потенциальным рельефом, в том числе систем со связанными квантовыми ямами. Последние интересны тем, что в них возможно формирование заданного энергетического спектра и скоростей рассеяния электронов не только путем задания формы потенциальной ямы, но и путем изменения связи между соседними квантовыми ямами. Кроме того, в ряде случаев коэффициент прохождения через многобарьерные структуры оказывается больше коэффициентов прохождения через каждый барьер в отдельности. Данный эффект возникает вследствие интерференции волн де Бройля и носит название резонансного туннелирования через многобарьерную структуру.

Рассмотрим прохождение частицы через систему из двух потенциальных барьеров, разделенных квантовой ямой, заключенную между двумя полубесконечными областями (рис. 2).

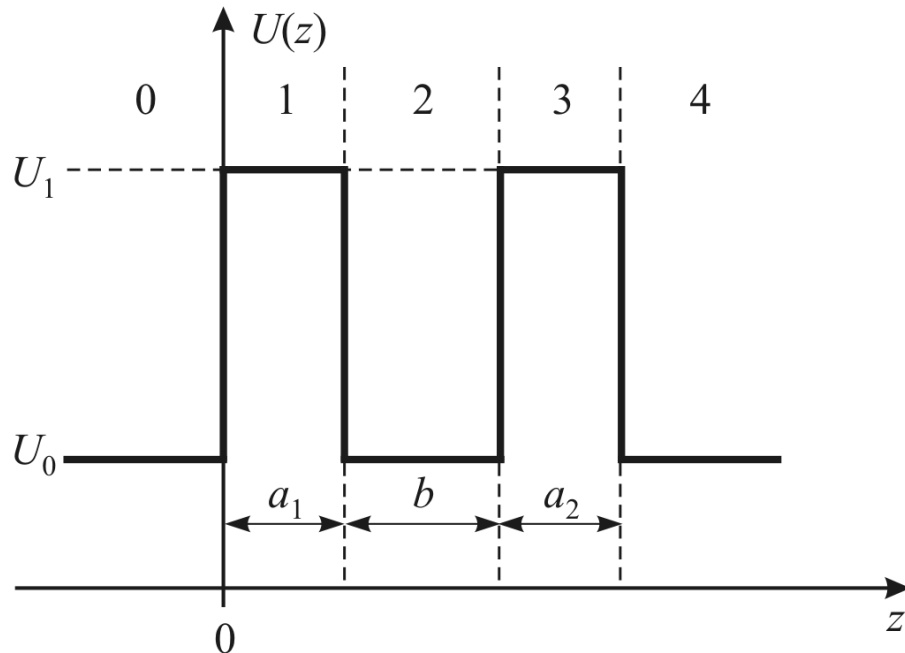


Рисунок 2 – Энергетическая диаграмма двухбарьерной квантоворазмерной Гетероструктуры

Как и прежде, будем считать, что источник электронов находится в области 0 и бесконечно удален от структуры. Электрон движется от источника в положительном

направлении оси Oz, обладая энергией E. Для расчета коэффициента прохождения электрона и амплитуд волн де Бройля воспользуемся матричным методом:

- число слоёв в структуре  $N=3$ ;
- число границ в рассматриваемой системе  $N+1= 4$  ;
- число областей, в которых потенциал  $U(z)$  постоянен  $N + 2 = 5$ .

Таким образом, для описания системы необходимо задать параметры материала в 5-ти областях, а также координаты границ между областями. Эти исходные данные позволяют рассчитать 4 матрицы передачи волны де Бройля для каждой из границ и общую матрицу передачи структуры, из которой вычисляется коэффициент прохождения. А с использованием выражений и рассчитываются амплитуды волн де Бройля в каждой из областей.

Аналогично, методом матриц переноса легко может быть проанализирована и трехбарьерная (а, вообще говоря, и многобарьерная) структура.

## Порядок выполнения работы

1 Создать в MatchCAD файл «Моделирование движения электрона с помощью матрицы переноса».

2 Рассмотреть двухслойную гетероструктуру  $Al_{0,15}Ga_{0,85}As$  -  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  заключенную между полубесконечными областями GaAs и построить её потенциальный профиль для электронов.

3 Построить зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0 до 2 эВ.

### Основные константы

Масса электрона	$m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$	
Заряд электрона	$q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$	$j := \sqrt{-1}$
Постоянная Планка с чертой	$h := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$	

### Моделирование движения электрона через слоистые наноструктуры с помощью матриц переноса

$$\gamma(m, E, U) := \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot (E - U)}{h^2}}$$

$$T00(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j(\gamma_2 - \gamma_1)z}$$

$$T01(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j(\gamma_2 + \gamma_1)z}$$

$$T10(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j(\gamma_2 + \gamma_1)z}$$

$$T11(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j(\gamma_2 - \gamma_1)z}$$

$$T(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \begin{pmatrix} T00(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T01(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \\ T10(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T11(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \end{pmatrix}$$

$$D(\gamma_{last}, \gamma_{first}, m_{last}, m_{first}, T) := \frac{|\gamma_{last}|}{|\gamma_{first}|} \cdot \frac{m_{first}}{m_{last}} \cdot \left( \left| \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$R(T) := \left( \left| \frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$B_{first}(A_{first}, T) := -\frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first} \quad A_{last}(A_{first}, T) := \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first}$$

$$NextLayer(PreviousLayer, T) := T \cdot PreviousLayer$$

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

$$m\pi(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e \quad (\Gamma - \text{минимум})$$

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

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

**Движение электрона через симметричный потенциальный барьер конечной толщины**

$$x_1 := 0 \quad E_{g1} := E_g(x_1) \quad m_1 := m\pi(x_1)$$

$$x_2 := 0.3 \quad E_{g2} := E_g(x_2) \quad m_2 := m\pi(x_2)$$

$$x_3 := 0 \quad E_{g3} := E_g(x_3) \quad m_3 := m\pi(x_3)$$

**Толщина потенциального барьера - M атомных монослоев**

$$a(M) := M \cdot a_0(x_2) \quad a(10) \cdot 10^9 = \blacksquare$$

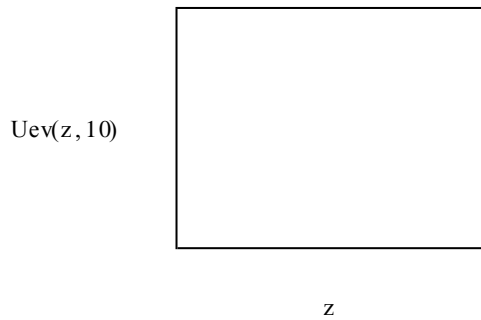
$$U_1 := \frac{E_{g1}}{2}$$

$$U_2 := \frac{E_{g2}}{2}$$

$$U_3 := \frac{E_{g3}}{2}$$

$$U(z, M) := \text{if}(z < 0, U_1, \text{if}(z > a(M), U_3, U_2))$$

$$U_{ev}(z, N) := \frac{U(z, N)}{q_e}$$



**Число слоев структуры, исключая внешние области**  $N := 1$

**Толщина барьера (количество атомных монослоев)**  $M := 10$

$$Z := (0 \quad a(M))^T \quad U := (U_1 \quad U_2 \quad U_3)^T$$

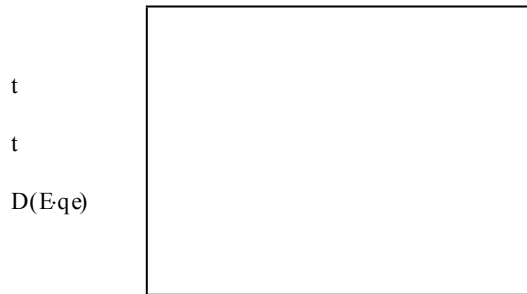
$$m := (m_1 \quad m_2 \quad m_3)^T$$

$$\gamma(E, i) := \gamma(m_i, E, U_i)$$

$$T(E, i) := T[\gamma(E, i), \gamma(E, i + 1), m_i, m_{i+1}, Z_i]$$

$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T(E, i)$$

$$D(E) := D(\gamma(E, N + 1), \gamma(E, 0), m_{N+1}, m_0, T(E))$$



$$\frac{U_1}{q_e}, \frac{U_2}{q_e}, E$$

4 Создать в MatchCAD файл «Моделирование движения электрона через двухбарьерную структуру».

5 Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из трех нанослоёв:

1)  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

2)  $\text{GaAs}$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

3)  $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв, заключенную между полубесконечными областями  $\text{GaAs}$ .

6 Построить зависимости коэффициентов прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0,5 до 1,5 эВ. Определить значение энергии резонансного туннелирования через структуру.

#### Основные константы

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

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

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

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

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

#### Движение электрона через двухбарьерную квантоворазмерную структуру

$N := 3$  число слоев в структуре, исключая внешние области.  
Итого в задаче рассматривается  $N+2=5$  областей

#### Рассматриваем структуру $\text{GaAs} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{GaAs} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{GaAs}$

$x(i) := \text{if}(\text{mod}(i, 2) = 0, 0, 0.3)$   $i := 0..N + 1$   $i$  – номер области

$A := \begin{pmatrix} 10 \\ 10 \\ 10 \end{pmatrix}$  число атомных монослоев в каждом слое многослойной структуры (исключая внешние области)

$E_g(i) := E_g(x(i))$   $m(i) := m_n(x(i))$   $V(i) := \frac{E_g(i)}{2}$

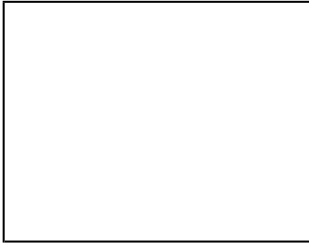
$d(n) := \text{if}(n = 0, 0, A_{n-1} \cdot a_0(x(n)))$   $n := 1..N$  Толщина  $n$ -го слоя

$Z(\zeta) := \sum_{k=0}^{\zeta} d(k)$   $\zeta := 0..N$  Координаты  $\zeta$ -ной границы слоя

$I(z) := \begin{cases} \text{return } 0 & \text{if } z < Z(0) \\ \text{return } N + 1 & \text{if } z \geq Z(N) \\ \text{for } i \in 1..N \\ \text{return } i & \text{if } (Z(i-1) \leq z) \cdot (z < Z(i)) \end{cases}$

$U(z) := V(I(z))$

$z_1 := Z(0) - 10 \cdot 10^{-9}$   $z_2 := Z(N) + 10 \cdot 10^{-9}$   $dz := 0.01 \cdot 10^{-9}$   
 $Nz := \frac{z_2 - z_1}{dz}$   $Nz = \blacksquare$   $p := 0..Nz$   $z_p := z_1 + p \cdot dz$

$$\frac{U(z_p)}{qe}$$


$$z_p \cdot 10^9$$

**Моделирование движения электрона через слоистые наноструктуры с помощью матриц переноса**

$$\gamma(m, E, U) := \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot (E - U)}{h^2}}$$

$$T00(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j(\gamma_2 - \gamma_1)z}$$

$$T01(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j(\gamma_2 + \gamma_1)z}$$

$$T10(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j(\gamma_2 + \gamma_1)z}$$

$$T11(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j(\gamma_2 - \gamma_1)z}$$

$$T(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \begin{pmatrix} T00(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T01(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \\ T10(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T11(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \end{pmatrix}$$

$$D(\gamma_{last}, \gamma_{first}, m_{last}, m_{first}, T) := \frac{|\gamma_{last}|}{|\gamma_{first}|} \cdot \frac{m_{first}}{m_{last}} \cdot \left( \left| \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$R(T) := \left( \left| \frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$B_{first}(A_{first}, T) := -\frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first} \quad A_{last}(A_{first}, T) := \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first}$$

$$NextLayer(PreviousLayer, T) := T \cdot PreviousLayer$$

$$\gamma(E, i) := \gamma(m(i), E, V(i))$$

$$T(E, i) := T(\gamma(E, i), \gamma(E, i + 1), m(i), m(i + 1), Z(i))$$

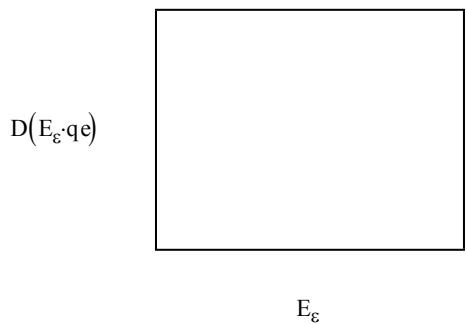
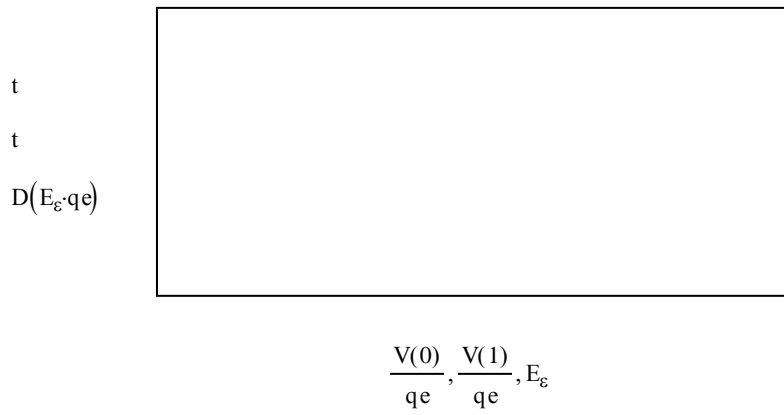
$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T(E, i)$$

$$D(E) := D(\gamma(E, N + 1), \gamma(E, 0), m(N + 1), m(0), T(E))$$

$$\epsilon_1 := 0.5 \quad \epsilon_2 := 1.5 \quad d\epsilon := 0.00001$$

$$N\epsilon := \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{d\epsilon} \quad \epsilon := 0..N\epsilon \quad N\epsilon = \blacksquare \quad E_\epsilon := \epsilon_1 + \epsilon \cdot d\epsilon$$





7 Создать в MatchCAD файл «Моделирование движения электрона через трехбарьерную структуру».

8 Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из пяти нанослоёв:

1)  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

2)  $GaAs$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

3)  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

4)  $GaAs$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв,

5)  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  ( $x = 0,3$ ) толщиной 10 атомных монослоёв, заключенную между полубесконечными областями  $GaAs$ .

9 Построить зависимости коэффициентов прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0,5 до 1,5 эВ. Определить значение энергии резонансного туннелирования через структуру.

**Основные константы**

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

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

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

$j := \sqrt{-1}$

**Свойства соединения  $Al_x Ga_{1-x} As$**

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

## Движение электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру

$N := 5$       число слоев в структуре, исключая внешние области.  
Итого в задаче рассматривается  $N+2=5$  областей

$x(i) := \text{if}(\text{mod}(i, 2) = 0, 0, 0.3)$        $i := 0..N + 1$        $i$  – номер области

$A := (10 \ 10 \ 10 \ 10 \ 10)^T$       число атомных монослоев в каждом слое  
многослойной структуры (исключая внешние области)

$Eg(i) := Eg(x(i))$        $m(i) := mn(x(i))$        $V(i) := \frac{Eg(i)}{2}$

$d(n) := \text{if}(n = 0, 0, A_{n-1} \cdot a0(x(n)))$        $n := 1..N$       Толщина  $n$ -го слоя

$Z(\zeta) := \sum_{k=0}^{\zeta} d(k)$        $\zeta := 0..N$       Координаты  $\zeta$ -ной границы слоя

$I(z) := \begin{cases} \text{return } 0 & \text{if } z < Z(0) \\ \text{return } N + 1 & \text{if } z \geq Z(N) \\ \text{for } i \in 1..N \\ \text{return } i & \text{if } (Z(i-1) \leq z) \cdot (z < Z(i)) \end{cases}$

$U(z) := V(I(z))$

$z1 := Z(0) - 10 \cdot 10^{-9}$        $z2 := Z(N) + 10 \cdot 10^{-9}$        $dz := 0.01 \cdot 10^{-9}$

$Nz := \frac{z2 - z1}{dz}$        $Nz = \blacksquare$        $p := 0..Nz$        $z_p := z1 + p \cdot dz$

$$\frac{U(z_p)}{qe}$$



$$z_p \cdot 10^9$$

## Моделирование движения электрона через слоистые наноструктуры с помощью матриц переноса

$$\gamma(m, E, U) := \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot (E - U)}{h^2}}$$

$$T00(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma1}{\gamma2} \cdot \frac{m2}{m1} \right) \cdot e^{-j(\gamma2 - \gamma1)z}$$

$$T01(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma1}{\gamma2} \cdot \frac{m2}{m1} \right) \cdot e^{-j(\gamma2 + \gamma1)z}$$

$$T10(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 - \frac{\gamma1}{\gamma2} \cdot \frac{m2}{m1} \right) \cdot e^{j(\gamma2 + \gamma1)z}$$

$$T1(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left( 1 + \frac{\gamma1}{\gamma2} \cdot \frac{m2}{m1} \right) \cdot e^{j(\gamma2 - \gamma1)z}$$

$$T(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) := \begin{pmatrix} T0(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) & T0l(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) \\ T1(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) & T1l(\gamma1, \gamma2, m1, m2, z) \end{pmatrix}$$

$$D(\gamma_{last}, \gamma_{first}, m_{last}, m_{first}, T) := \frac{|\gamma_{last}|}{|\gamma_{first}|} \cdot \frac{m_{first}}{m_{last}} \cdot \left( \left| \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$R(T) := \left( \left| \frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$$

$$B_{first}(A_{first}, T) := -\frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first} \quad A_{last}(A_{first}, T) := \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first}$$

$$NextLayer(PreviousLayer, T) := T \cdot PreviousLayer$$

$$\gamma(E, i) := \gamma(m(i), E, V(i))$$

$$T(E, i) := T(\gamma(E, i), \gamma(E, i + 1), m(i), m(i + 1), Z(i))$$

$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T(E, i)$$

$$D(E) := D(\gamma(E, N + 1), \gamma(E, 0), m(N + 1), m(0), T(E))$$

$$\varepsilon1 := 0.7 \quad \varepsilon2 := 1.5 \quad d\varepsilon := 0.00001$$

$$N\varepsilon := \frac{\varepsilon2 - \varepsilon1}{d\varepsilon} \quad \varepsilon := 0..N\varepsilon \quad N\varepsilon = \blacksquare$$

$$E_\varepsilon := \varepsilon1 + \varepsilon \cdot d\varepsilon$$

t  
t  
D(E<sub>ε</sub>·qε)



$$\frac{V(0)}{q\varepsilon}, \frac{V(1)}{q\varepsilon}, E_\varepsilon$$

D(E<sub>ε</sub>·qε)



E<sub>ε</sub>

## **Контрольные вопросы**

1. Принцип формализации расчета амплитуд волн де Бройля и коэффициентов отражения и прохождения в многослойных средах с использованием метода матриц переноса ?
2. Принцип резонансного туннелирования