

Моделирование квантоворазмерных эффектов в структурах на основе арсенида галлия.

Лабораторные работы.

Описание идеи 1:

Моделирование предполагается проводить для твердых растворов $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Величина x – доля атомов галлия, замещенных атомами алюминия, обычно она изменяется в пределах от 0,15 до 0,35. Варьируя долю замещения атомов галлия алюминием, можно изменять такие важные параметры полупроводникового материала, как эффективную массу носителей заряда, ширину запрещенной зоны и постоянную решетки:

$$m_n(x) = (0.067 + 0.083x)m_e \quad (1a)$$

$$m_{pL}(x) = (0.087 + 0.063x)m_e \quad (1b)$$

$$m_{pH}(x) = (0.62 + 0.14x)m_e \quad (1c)$$

– соответственно для массы электронов в Γ -минимуме зоны проводимости, лёгких и тяжёлых дырок в валентной зоне (масса покоя свободного электрона $m_e=9.1 \cdot 10^{-31}$ кг),

$$E_g(x) = \begin{cases} 1.424 + 1.247x, & \text{если } x < 0.45 \\ 1.9 + 0.125x + 0.143x^2, & \text{если } x \geq 0.45 \end{cases} \quad (2)$$

– для ширины запрещённой зоны в эВ,

$$a_0(x) = 0.56533 + 0.00078x \quad (3)$$

– для постоянной решётки, нм.

Поскольку зависимость постоянной решетки от параметра x слабая, кристаллическая структура на границе между слоями характеризуется минимальными структурными нарушениями и незначительными механическими напряжениями.

Расчеты электронных состояний в полупроводниковых структурах, выполняемые в методе эффективной массы, обычно основаны на решении стационарного уравнения Шредингера, которое для движения электронов в перпендикулярном плоскости слоёв направлении является одномерным:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z,E)}{\partial z^2} + U(z) \cdot \psi(z,E) = E \cdot \psi(z,E) \quad (4)$$

здесь m – эффективная масса носителя заряда, E – его полная энергия, $U(z)$ – потенциальный рельеф для электрона вдоль оси z , направленной в перпендикулярном к

плоскости слоёв направлении, $\hbar = 6.626 \cdot 10^{-34} / 2\pi$ (Дж·с). Решением данного уравнения является z -составляющая огибающей волновой функции $\psi(z, E)$, характеризующая движение электронов в перпендикулярном плоскости слоёв направлении и определяющая, с точностью до нормировки, вероятность нахождения электрона с энергией E в точке с координатой z .

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 рис. 1 – прямоугольная потенциальная яма (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости материала ямы, a — ширина ямы).

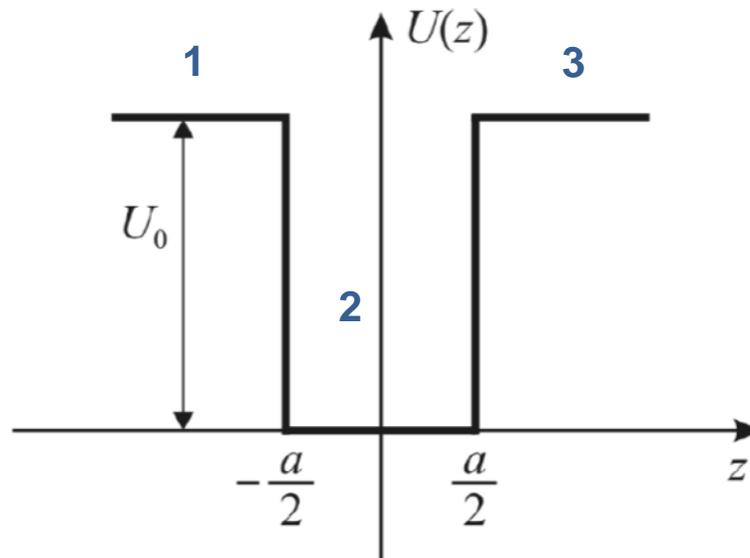


Рис. 1. Симметричная потенциальная яма.

Будем считать в теории, что $U_0 \rightarrow \infty$ (потенциальная яма с бесконечно высокими стенками). В реальности ограничим максимальную высоту барьера в полупроводниках работой выхода $\Phi \approx 4 \div 5$ эВ. В этом случае вне ямы функция $\psi(z, E)$ тождественно равна нулю, а внутри ямы удовлетворяет уравнению Шредингера вида:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} = E \cdot \psi(z, E) \quad (5)$$

с граничными условиями

$$\psi\left(\pm \frac{a}{2}, E\right) = 0. \quad (6)$$

Уравнение (5) имеет решение лишь при дискретных значениях энергии E – собственных значениях данного уравнения:

$$E_\nu = \frac{\pi^2 \hbar^2 \nu^2}{2ma^2}, \text{ где } \nu \text{ – целые положительные числа.} \quad (7)$$

Система обладает симметрией по оси z относительно начала координат, поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера (5) разбивается на подгруппы четных и нечетных решений:

$$\psi(z, E_\nu) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi\nu z}{a}\right), & \text{если } \nu = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi\nu z}{a}\right), & \text{если } \nu = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (8)$$

Для существования связанных состояний в яме необходимо, чтобы для значений ν величина $E_\nu \ll \Phi$.

Задание 1:

- 1) Выберите ширину прямоугольной потенциальной ямы, удовлетворяющей условию $E_\nu \ll \Phi$ по крайней мере для существования нескольких собственных значений энергии, однако яму не следует делать шире 100 атомных монослоёв GaAs.
- 2) На языке Python напишите программу, которая рассчитает и построит «график» расположения энергетических уровней в полученной потенциальной яме (единица энергии – электронвольт, единица расстояния – нанометр, носители заряда – электроны).
- 3) Добавьте к графику форму огибающих волновых функций $\psi^2(z, E_\nu)$ для выбранной потенциальной ямы, как показано на рисунке 2.

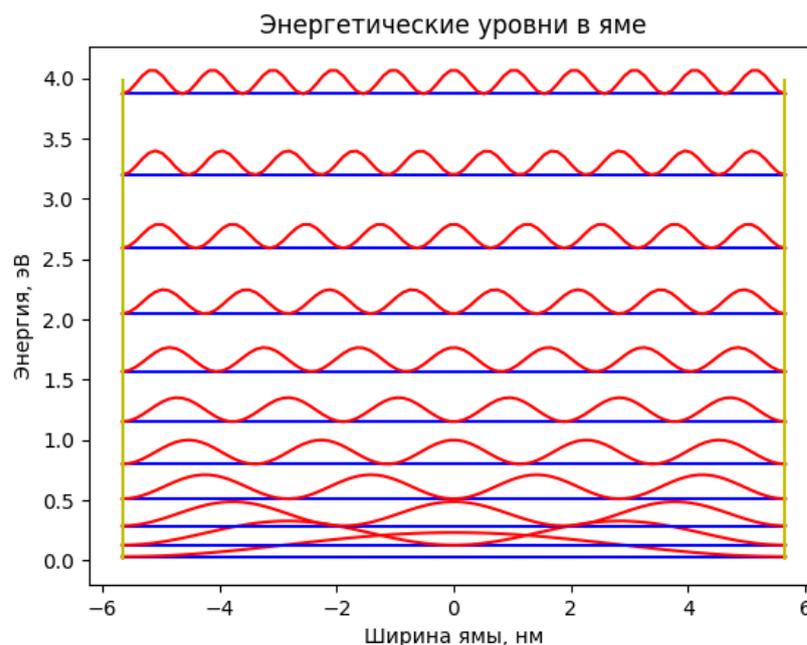


Рис.2. Примерный результат моделирования.

Описание идеи 2:

Рассмотрим потенциальную яму со стенками конечной высоты и бесконечной ширины. Пусть материал А образует яму, а материал В – её стенки. В этом случае потенциал $U(z)$ в уравнении (4) будет иметь вид (см рис. 1):

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } |z| \leq \frac{a}{2} \text{ (область 2)} \\ U_0, & \text{если } |z| > \frac{a}{2} \text{ (области 1 и 3)} \end{cases} \quad (9)$$

Для каждой из областей можно записать уравнения Шредингера в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 e^{\beta z}, \\ \psi_2 &= A_2 e^{i\gamma z} + B_2 e^{-i\gamma z}, \\ \psi_3 &= B_3 e^{-\beta z}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $\beta = \sqrt{\frac{2m_B(U_0-E)}{\hbar^2}}$, $\gamma = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}}$; m_A и m_B – эффективные массы электронов в материале А, образующем яму, и в материале В, образующем барьеры. Значения констант A_1 , A_2 , B_2 и B_3 находятся из граничных условий (6) путём решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Граничные условия, после подстановки (10) в (6), принимают вид:

$$\begin{cases} A_1 e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 e^{-i\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{i\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_1 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{-i\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{i\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_2 e^{i\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{-i\gamma\frac{a}{2}} = B_3 e^{-\frac{a}{2}\beta}, \\ A_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{i\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{i\gamma}{m_A} e^{-i\gamma\frac{a}{2}} = -B_3 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} \end{cases} \quad (11)$$

Система уравнений (10) будет иметь нетривиальное решение тогда и только тогда, когда её определитель (12) будет равен нулю.

Поскольку элементы определителя зависят от энергии E , то, определив нули в зависимости детерминанта от энергии, можно получить разрешённые значения энергии электрона в квантовой яме.

$$\text{Det} \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{a}{2}\beta\right) & -\exp\left(-i\gamma\frac{a}{2}\right) & -\exp\left(i\gamma\frac{a}{2}\right) & 0 \\ \frac{\beta}{m_B}\exp\left(-\frac{a}{2}\beta\right) & -\frac{i\gamma}{m_A}\exp\left(-i\gamma\frac{a}{2}\right) & \frac{i\gamma}{m_A}\exp\left(i\gamma\frac{a}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(i\gamma\frac{a}{2}\right) & \exp\left(-i\gamma\frac{a}{2}\right) & -\exp\left(-\frac{a}{2}\beta\right) \\ 0 & \frac{i\gamma}{m_A}\exp\left(i\gamma\frac{a}{2}\right) & -\frac{i\gamma}{m_A}\exp\left(-i\gamma\frac{a}{2}\right) & \frac{\beta}{m_B}\exp\left(-\frac{a}{2}\beta\right) \end{bmatrix} = 0 \quad (12)$$

Однако, для полученных значений энергии система (11) имеет бесконечное множество решений. Полагая $A_1 = \text{const}$, остальные константы могут быть выражены через A_1 :

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{A_1}{2} \left(1 - i\frac{\beta m_A}{\gamma m_B}\right) e^{(i\gamma - \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_2 &= \frac{A_1}{2} \left(1 + i\frac{\beta m_A}{\gamma m_B}\right) e^{-(i\gamma + \beta)\frac{a}{2}}, \\ B_3 &= \frac{A_1}{2} \left[\left(1 - i\frac{\beta m_A}{\gamma m_B}\right) e^{i\gamma a} + \left(1 + i\frac{\beta m_A}{\gamma m_B}\right) e^{-i\gamma a} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

Задание 2:

Напишите программу на языке Python, которая позволит вычислить квантованные уровни энергии и построить огибающие волновых функций в прямоугольной квантовой яме, образованной слоем GaAs, заключенным между слоями $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, для выбранной ширины ямы (от 10 до 30 атомных монослоёв). Единица энергии – электронвольт (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости), единица расстояния – нанометр, носители заряда – электроны. Для решения задачи следует найти, при каких значениях энергии E_v будет равен нулю определитель (12) – это можно, например, сделать с приемлемой точностью из анализа графика функции. Затем, положив константу $A_1 = 3$, рассчитать остальные константы и вычислить $\psi^2(z, E_v)$ для областей 1, 2 и 3. Примерные результаты расчётов показаны на рис. 3.

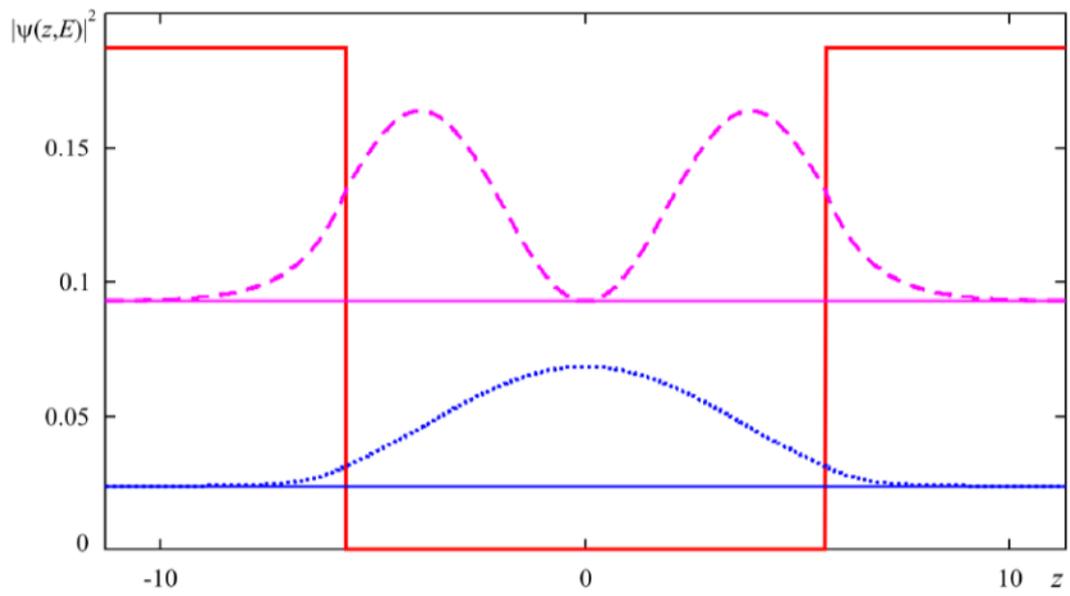


Рис. 3. Примерный вид огибающих волновых функций и квантованных уровней энергии в прямоугольной потенциальной яме со стенками конечной высоты.

Описание идеи 3: Моделирование движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины.

Рассмотрим гетероструктуру, состоящую из трёх слоёв: GaAs–Al_xGa_{1-x}As–GaAs. Пусть средний слой структуры будет туннельно тонким (не более 20 атомных монослоёв). Будем отсчитывать энергию электронов от середины запрещённой зоны GaAs, и также будем считать, что середина E_g компаунда совпадает с серединой E_g для GaAs. Тогда для свободных электронов потенциальный рельеф $U(z) = E_g(z) / 2$ будет иметь вид, показанный на рис. 4 (в нашем случае барьер будет симметричным). Будем считать, что электроны движутся из области 1 в область 3, обладая энергией E .

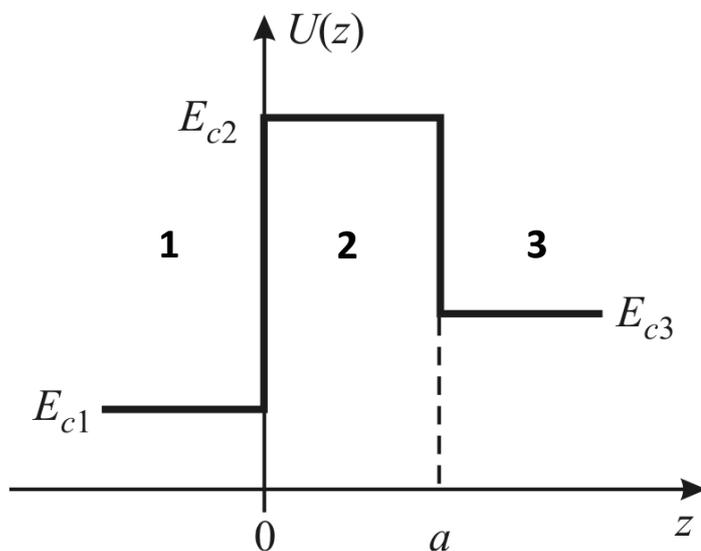


Рис. 4. Общий вид потенциального барьера для электронов (a – ширина барьера).

Решения уравнения Шредингера для областей 1, 2 и 3, в каждой из которых потенциал $U(z)$ постоянен, можно записать в виде:

$$\begin{aligned}\psi_1(z, E) &= A_1 e^{i\gamma_1 z} + B_1 e^{-i\gamma_1 z}, \\ \psi_2(z, E) &= A_2 e^{i\gamma_2 z} + B_2 e^{-i\gamma_2 z}, \\ \psi_3(z, E) &= A_3 e^{i\gamma_3 z}.\end{aligned}\tag{14}$$

Здесь $\gamma_k = \sqrt{\frac{2m_k(E - E_{ck})}{\hbar^2}}$, где $k = 1, 2, 3$; m_k и E_{ck} – эффективная масса и энергия дна зоны проводимости в k -й области. Коэффициенты B_1 , A_2 , B_2 и A_3 могут быть найдены из граничных условий и выражены через коэффициент A_1 следующим образом:

$$\begin{aligned}
A_3 &= 4 \frac{\gamma_1 \gamma_2}{m_1 m_2} \frac{1}{\zeta} \cdot A_1, \\
\zeta &= \left(\frac{\gamma_1}{m_1} + \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} + \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 - \gamma_2)a} + \left(\frac{\gamma_1}{m_1} - \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} - \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{i(\gamma_3 + \gamma_2)a}; \\
A_2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_3 m_2}{\gamma_2 m_3} \right) e^{i(\gamma_3 - \gamma_2)a} \cdot A_3, \\
B_2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_3 m_2}{\gamma_2 m_3} \right) e^{i(\gamma_3 + \gamma_2)a} \cdot A_3, \\
B_1 &= A_2 + B_2 - A_1.
\end{aligned} \tag{15}$$

Коэффициент A_1 может быть взят произвольным образом.

Определённый интерес представляет вычисление коэффициентов отражения и прохождения электрона через потенциальный барьер. Эти коэффициенты определяются отношением плотностей потоков отражённых и прошедших через барьер электронов к плотности потока подходящих к барьеру электронов.

Если определить плотность потока вероятности J так:

$$J = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \cdot \psi^{*'} - \psi^* \cdot \psi'), \tag{16}$$

тогда коэффициент прохождения D и коэффициент отражения R будут выражены следующим образом:

$$\begin{aligned}
D &= \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_2^+|}{|J_1^+|}, \\
R &= \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_1^-|}{|J_1^+|},
\end{aligned} \tag{17}$$

где J_1^+ - плотность потока вероятности для электронов, падающих на барьер со стороны области 1, J_1^- - то же для электронов, отражённых от барьера обратно в область 1, J_2^+ - то же для электронов, прошедших в область 2. При этом в задаче для упрощения предполагается, что рекомбинация электронов для любой из областей отсутствует.

При подстановке (14) в (17) получим следующие расчётные соотношения:

$$\begin{aligned}
D &= \frac{|\gamma_3| m_1 |A_3|^2}{|\gamma_1| m_3 |A_1|^2}, \\
R &= \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}.
\end{aligned} \tag{18}$$

Задание 3:

- 1) Провести моделирование движения электрона в зоне проводимости гетероструктуры, состоящей из трёх слоёв: GaAs–Al_xGa_{1-x}As–GaAs, параметр x взять из диапазона от 0.2 до 0.6. Ширину слоя 2 взять не более чем 20 атомных монослоёв.
- 2) Построить огибающие волновых функций в гетероструктуре для нескольких значений энергии электрона (выше и ниже барьера), и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры (рис. 5).

3) Построить график зависимости коэффициентов прохождения и отражения электронов в зависимости от энергии электрона (в диапазоне от 0 до $3E_{C2}$, рис. 6), найти значения экстремумов коэффициента прохождения.

4) Сделать вывод, возможны ли при выбранных параметрах структуры эффект туннелирования электрона через потенциальный барьер и эффект отражения электрона при его прохождении над потенциальным барьером.

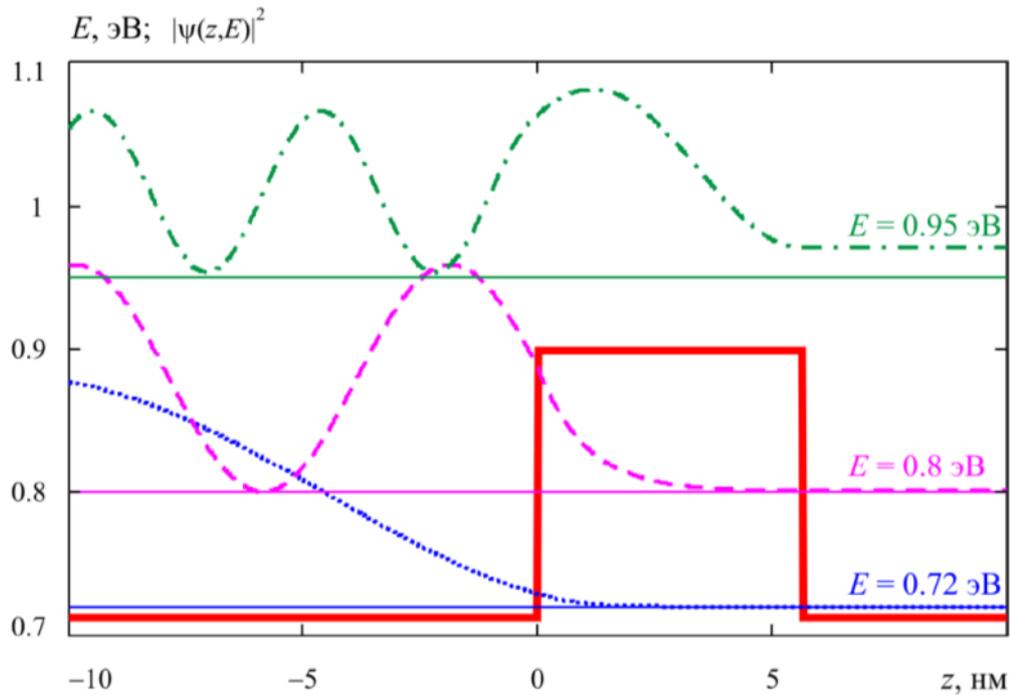


Рис. 5. Примерный вид огибающих волновых функций возле потенциального барьера для электронов с различными энергиями.

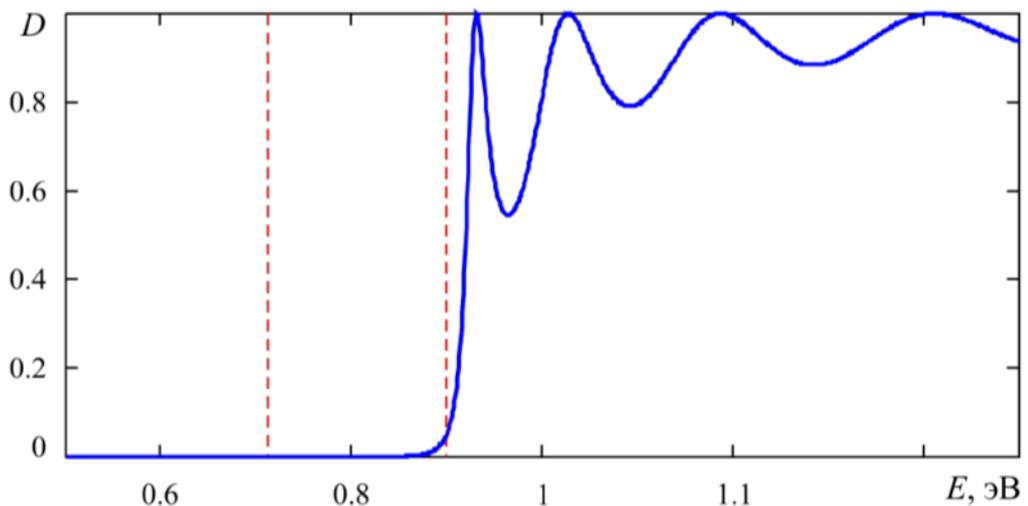


Рис. 6. Примерный вид графика зависимости коэффициента прохождения электрона через барьер от энергии электрона.

Общие примечания к ходу работ и структуре отчётов.

Компьютерное моделирование включает в себя несколько важных этапов:

1. Постановка задачи.

На этом этапе производится теоретический анализ физической модели, устанавливаются ограничения на допустимые пределы изменения параметров, формулируются основные уравнения, граничные (начальные) условия и пределы применимости модели.

2. Формулировка математической модели.

В физической модели выделяются характерные единицы измерения физических величин, затем уравнения модели (обычно) записываются в безразмерном виде. Это необходимо, чтобы исключить в дальнейших расчетах ошибки вычислений, связанные с очень большими или очень маленькими размерными константами, такими как постоянная Планка или масса покоя электрона.

3. Выбор алгоритма и разработка программы вычислений.

Алгоритм вычислений должен обеспечивать необходимую скорость вычислений и заданные погрешности конечных результатов. Программа, реализующая выбранный алгоритм, должна позволять изменять параметры модели и выдавать результаты в удобном и наглядном виде.

4. Решение и анализ решения.

Отладку программы удобно провести на модели, имеющей точное решение, так, чтобы можно было проверить правильность моделирования. Отлаженная таким образом программа, затем может быть применена к задачам, не имеющим точного решения.