

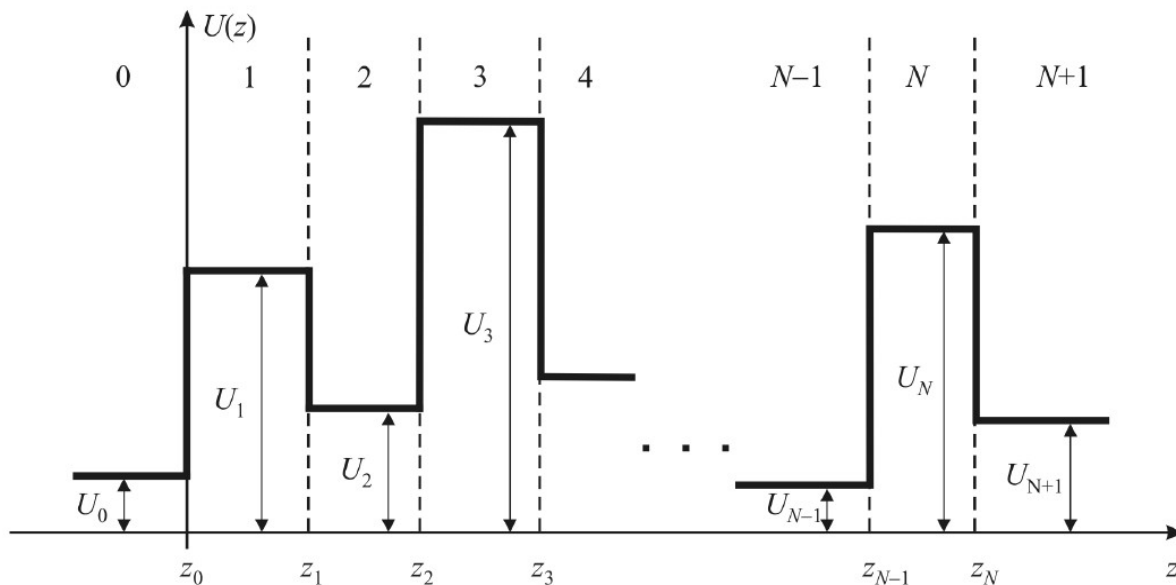
Моделирование движения электрона через потенциальные барьеры с помощью матриц переноса.

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:

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

где z_i – координата границы между i -й и $(i+1)$ -й областями, $i = 0, \dots, N$.



Пусть электрон имеет заданную энергию E и движется от источника в положительном направлении оси z . Решение уравнения Шредингера для k -й области ($k = 0, \dots, N+1$) записывается в виде:

$$\Psi_k(z, E) = A_k e^{i y_k z} + B_k e^{-i y_k z}$$

где A_k и B_k – амплитуды падающей и отраженной волн де Бройля в k области,

$\gamma_k(E) = \sqrt{2m_k \frac{(E-U)}{\hbar^2}}$, где m_k – эффективная масса электрона в k области.

Исходя из общего уравнения для граничных условий, можно получить такую формулу перехода:

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

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

$$\mathbf{T}_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1}-\gamma_k)z_k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{00} & \mathbf{T}_{01} \\ \mathbf{T}_{10} & \mathbf{T}_{11} \end{pmatrix}$$

Тогда матрица передачи волны де Бройля через всю слоистую структуру:

$$\mathbf{T} = \prod_N^0 \mathbf{T}_{k,k+1}$$

Коэффициенты отражения и прохождения электронной волны через структуру могут быть выражены через элементы матрицы передачи следующим образом:

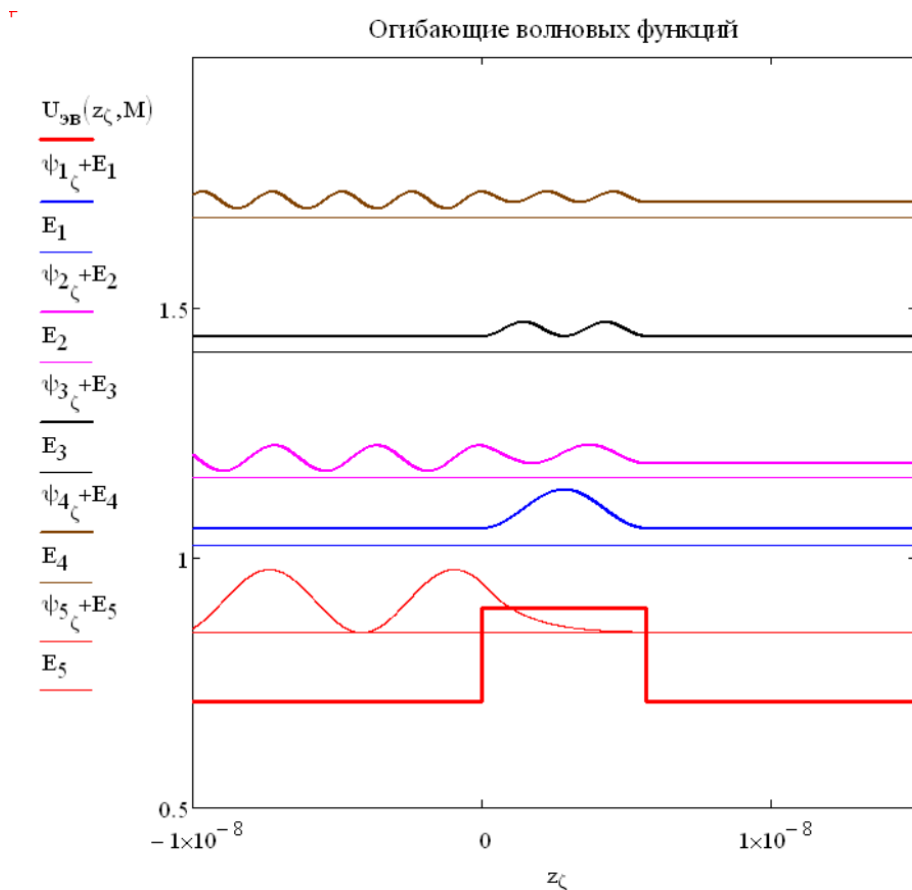
$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2,$$

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

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.

Задания:

1) Реализовать решение задачи о движении электрона через потенциальный барьер конечной толщины для соединения GaAs–Al_xGa_{1-x}As–GaAs (барьер симметричный). Построить функции плотности вероятности (оггибающие волновых функций) для нескольких значений энергии электрона, и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры. Построить графики зависимости коэффициентов прохождения и отражения от энергии электрона.

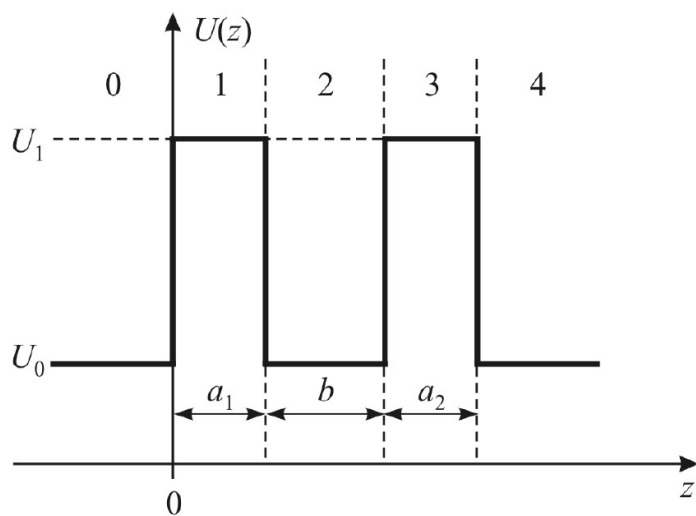


2) Решить задачу о движении электрона через систему двух потенциальных барьеров конечной толщины, разделённых квантовой ямой. Электрон движется от источника в положительном направлении оси z , обладая энергией E . Для расчета коэффициента прохождения электрона и амплитуд волн де Бройля следует использовать матричный метод. Константы для применения метода: число слоёв в структуре $N = 3$; число границ в рассматриваемой системе = 4; число областей, в которых потенциал $U(z)$ постоянен = 5.

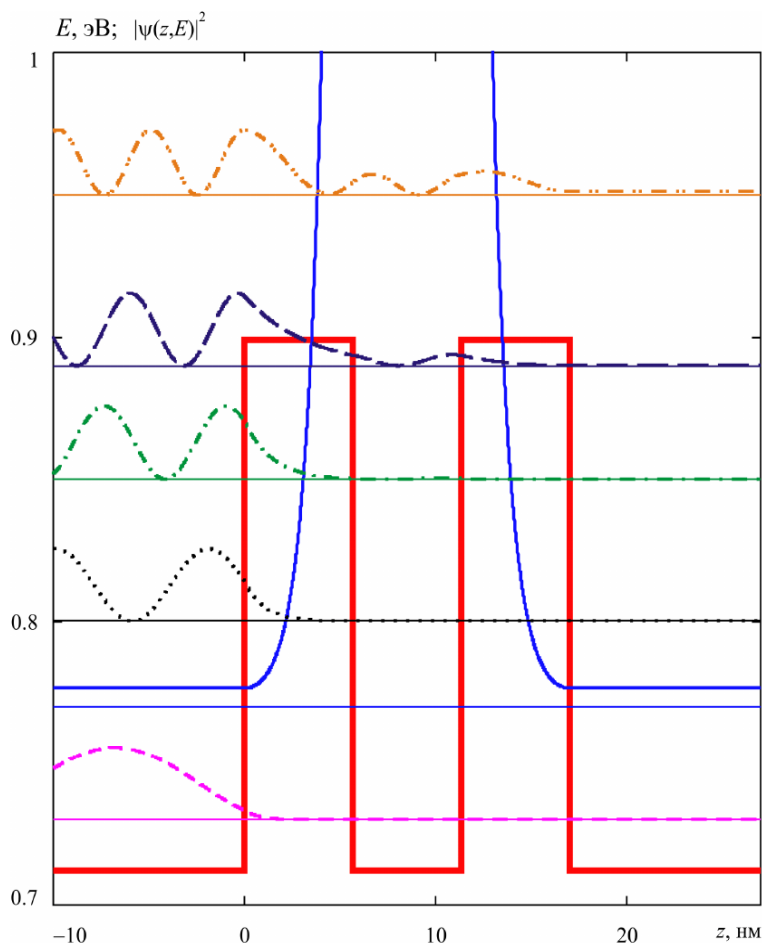
Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из трех нанослоёв:

- 1) Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 10 атомных монослоёв,
- 2) GaAs толщиной 10 атомных монослоёв,
- 3) Al_{0.3}Ga_{0.7}As толщиной 10 атомных монослоёв,

заклученную между полубесконечными областями GaAs.



Примерный вид результатов:



Графики огибающих волновых функций
для структуры GaAs – Al_{0.3}Ga_{0.7}As – GaAs – Al_{0.3}Ga_{0.7}As – GaAs.

Построить графики зависимости коэффициентов прохождения и отражения от энергии электрона в диапазоне от 0.7 до 1.5 эВ.

Состояния в квантовой яме, соответствующие значениям энергии, для которых $D=1$, называют резонансными, а наблюдаемое явление – резонансным туннелированием через структуру. Следует определить значение энергии резонансного туннелирования электронов через структуру.

