Занятие 1.
Нахождение коэффициента прохождения и отражения от простейших потенциальных рельефов

Цель: показать специфику нахождения коэффициента прохождения и отражения в случае простого полупроводникового гетероперехода

Где такая задача встречается?
Нанокомпонент обычно состоит из микроскопической области, в которой имеют место «размерные» эффекты, и которые не могут быть описаны на языке микроэлектроники, в частности в терминах диффузии и дрейфа, и макроскопических областей его окружающих (рис. 1.1).

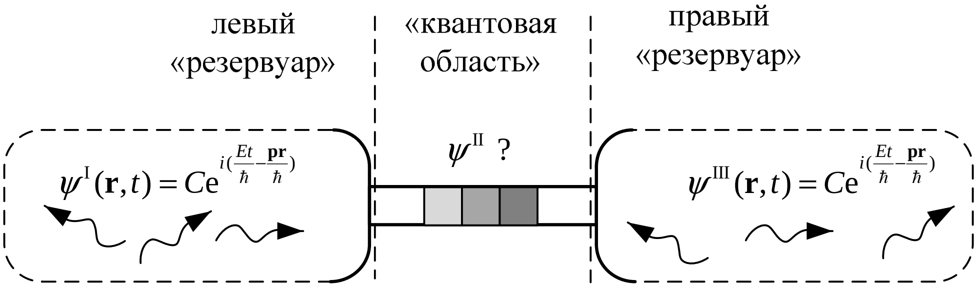

Рис.1.1. Структура с поперечным квантовым транспортом. Резервуары как правильно легируются сильно, квантовую область оставляют свободной от примесей.

Обычно задачу можно свести к одночастичной. В этом случае ток через такую структуру можно рассчитать, найдя *вероятности прохождения электронов* с произвольной энергией через структуру слева направо или справа налево (которые зачастую совпадают), и просуммировав их с учетом заселенности энергетических уровней.

Электроны, которые двигаются в «классических» областях («резервуарах») считаются свободными, но в отличие от свободных им приписывают *эффективную массу*, а от всей волновой функции оставляют лишь ее *огибающую*, которую в дальнейшем мы будем называть просто *волновой функцией*. Такие электроны описываются суперпозицией плоских волн де Бройля. В квантовой области в силу быстрого изменения потенциальной энергии электрона представление об электроне как о классической частице неадекватно. Поэтому конкретный ее вид необходимо устанавливать, решая уравнение Шредингера.

Переход к одному измерению

Для простоты рассмотрим полупроводниковую структуру с *поперечным электронным транспортом*, название которой указывает на то, что поле приложено таким образом, что ускоряет электроны поперек слоев. Такие структуры преимущественно создаются выращиванием на подложке *мезоструктуры*, то есть структуры, которая имеет наноскопические характерные размеры в направлении роста и микроскопические в плоскости, перпендикулярной направлению роста (рис. 2).

Для такой структуры можно в плоскости *xy* считать, что электроны движутся как классические частицы, и лишь в направлении 0*z* нужно учитывать волновые свойства электрона.

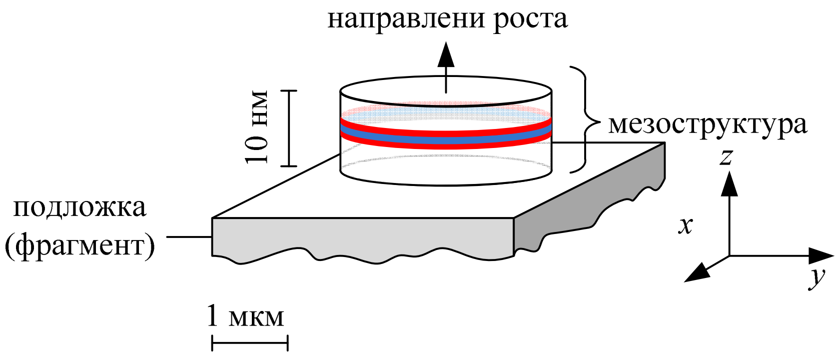

Рис. 1.2. Гетероструктура с поперечным электронным транспортом. Направление роста совпадает с 0z.

Если считать, что потенциальную энергию электрона в кристалле можно представить в виде:

$$U(x,y,z)=U_x(x)+U_y(y)+U_z(z),$$

то задачу по нахождению $\psi(x,y,z)$ можно свести к нахождению трех независимых функций [1 стр. 83]:

$$\psi(x,y,z)=\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) \qquad (0.1)$$

Две из них в силу макроскопичности размеров в плоскости *xy* интереса не представляют, являясь плоскими волнами (как это имело место для всех направлений в традиционной электронике).

Вдоль 0z характерные размеры, а вслед за ними потенциальная энергия электрона в зоне проводимости и эффективные массы сильно изменяются в масштабах нанометров. Это приводит к необходимости решать уравнение Шредингера для *огибающей волновой функции*, которое имеет вид:

$$\hat{H}\psi=E\psi,$$

где ψ – огибающая волновой функции, E – собственная энергия электрона, $\hat{H}$ – оператор Гамильтона, который равен: $\hat{H}=\hat{T}+U(x,y,z)$. Как оператор Гамильтона, так и оператор кинетической энергии $\hat{T}$ самым непосредственным образом подобен аналогичным величинам в классической механике (см. табл. 1.1)

Табл. 1.1.

Функции классической и операторы квантовой механики

классическая механика	квантовая механика
функция Гамильтона $H=T+U(x,y,z)$	оператор Гамильтона $\hat{H}=\hat{T}+U(x,y,z)$
кинетическая энергия $T=\dfrac{p^2}{2m}$	оперетор кинетической энергии $T=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$
импульс $p=m\dfrac{dx}{dt}$	оперетор кинетической энергии $\hat{p}_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}$

Учитывая указанное в таблице выражение для оператора импульса, а также дополнительные условия, накладываемые на огибающую волновой функции, получим в раскрытой форме т.н. уравнение Шредингера для огибающей:

$$\frac{d}{dz}\frac{1}{m^*}\frac{d}{dz}\psi + \frac{2}{\hbar^2}(E - U(z))\psi = 0\,.$$

Именно такое одномерное уравнение Шредингера будет использовано для нахождения коэффициентов прохождения и отражения в настоящем занятии.

Коэффициент прохождения через потенциальную ступеньку.

Рассмотрим наиболее простой, но не тривиальный пример объекта, для которого можно сформулировать задачу по нахождению коэффициентов прохождения и отражения – потенциальный рельеф в виде ступеньки. Такой рельеф может быть создан путем выращивания на массивном слое GaAs массивного слоя AlAs. Потенциальный рельеф, получаемый при этом изображен на рис. 1.3.

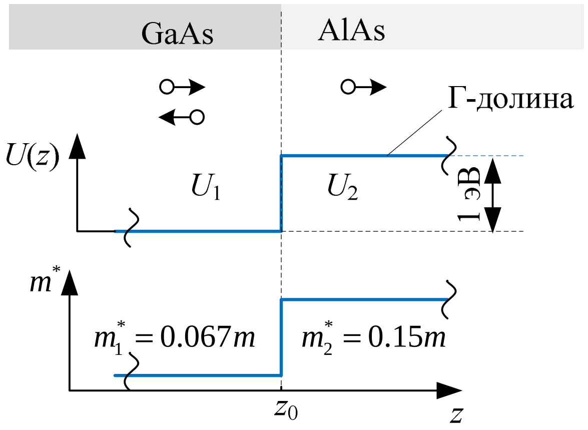

Рис. 1.3. Потенциальная ступенька, образующаяся на границе гетероперехода GaAs/AlAs.

Считаем, что левее и правее от гетерограницы z_0 потенциальная энергия остается постоянной, и равна U_1 и U_2 соответственно. Эффективные массы в GaAs и AlAs обозначены m_1 и m_2, и также постоянны левее и правее точки z_0.

Уравнения Шредингера для правой и левой части рассматриваемой системы запишутся:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k_1^2\psi = 0\,, \tag{0.2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k_2^2\psi = 0\,. \tag{0.3}$$

где $k_{1(2)}^2 = \frac{2m_{1(2)}^*}{\hbar^2}(E - U_{1(2)}(z))$.

Общие решения (0.4) и (0.5) назовем ψ_1 и ψ_2. Они будут состоять из суммы линейно плоских волн, умноженных на постоянные интегрирования.

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}\,, \tag{0.6}$$

$$\psi_2 = A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z}\,. \tag{0.7}$$

Заметим далее, что плоские волны $\psi_1^{\rightarrow} \equiv A_1 e^{ik_1 z}$, $\psi_1^{\leftarrow} = B_1 e^{-ik_1 z}$, $\psi_2^{\rightarrow} = A_2 e^{ik_2 z}$ $\psi_2^{\leftarrow} = B_1 e^{-ik_1 z}$ описывают движущийся в направлении 0z (против этой оси) электрон в первой области и во второй области. Однако по условиям задачи электрон налетает на потенциальную ступеньку слева. Поэтому амплитуда волны $\psi_2^{\leftarrow}$ должна равна нулю; противоположное означало бы, что электрон налетает на потенциальную ступеньку справа. Пользуясь тем, что согласно квантовой механике волновые функции, которые отличаются на произвольную комплексную постоянную, описывают одно и то же состояние, перепишем выражение (0.6) и (0.7) так:

$$\psi_1 = e^{ik_1 z} + re^{-ik_1 z}, \tag{0.8}$$

$$\psi_2 = te^{ik_2 z}. \tag{0.9}$$

где *r, t* – новые постоянные интегрирования.

По определению коэффициента прохождения *T* и коэффициента отражения *R* [1 стр. 100]:

$$T = \frac{\left|\mathbf{j}_2^{\rightarrow}\right|}{\left|\mathbf{j}_1^{\leftarrow}\right|}.\ R = \frac{\left|\mathbf{j}_1^{\leftarrow}\right|}{\left|\mathbf{j}_2^{\rightarrow}\right|},$$

где поток плотности вероятности в волне ψ [1 стр. 101]:

$$\mathbf{j} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m^*}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right), \tag{0.10}$$

где через $\nabla\psi$ обозначено $\mathrm{grad}\psi$, который, в силу независимости огибающей волновой функции от *x* и *y* будет равен $\mathbf{e}_z \dfrac{d\psi}{dz}$. Вычисление плотностей потоков вероятности в интересующих нас волнах дает: $\mathbf{j}_1^{\rightarrow} = \mathbf{e}_z \dfrac{\hbar k_1}{m_1^*}$, $\mathbf{j}_2^{\rightarrow} = \mathbf{e}_z \left|t\right|^2 \dfrac{\hbar k_2}{m_2^*}$, $\mathbf{j}_1^{\leftarrow} = -\mathbf{e}_z \dfrac{\hbar k_1}{m_1^*}$. Подставляя эти выражения в (0.10), получим:

$$R = \left|r\right|^2, T = \frac{k_2}{k_1}\frac{m_1^*}{m_2^*}\left|t\right|^2 \tag{0.11}$$

из которых следует, что необходимо еще найти *r* и *t*. Связь между ними может быть получена из граничных условий, который накладываются на огибающую на границах (в остальных точках эти условия выполняются автоматически):

$$\begin{cases} \psi_1(z_{0-}) = \psi_1(z_{0-}) \\ \dfrac{1}{m_1^*}\psi_1(z_{0-}) = \dfrac{1}{m_2^*}\psi_2(z_{0+}) \end{cases} \tag{0.12}$$

Из (1.12) получим:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\,,\; t = \frac{m_2^*}{m_1^*}\frac{2k_2}{k_1 + k_2}\,, \tag{0.13}$$

откуда

$$R = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2, T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{2k_2}{k_1 + k_2}\right|^2. \tag{0.14}$$

Все расчеты произведены, считая, что частица имеет энергию, выше высоты потенциальной ступеньки. В противном случае вероятности прохождения и отражения равны нулю и единице соответственно.

Домашнее задание:

1. Читать: основные свойства одномерного движения (Ландау, с. 83 (параграф 21))
Глава 1 (Ландау).
2. Коэффициент отражения (Ландау, с.100 (параграф 25)).
3. Прохождение через потенциальные барьеры (Блохинцев…)