**Моделирование энергетического спектра для электронов в связанных квантовых ямах**

Описание лабораторной работы

Составители: канд. физ.-мат. наук, доцент **Агарев В. Н.**, канд. физ.-мат. наук, доцент **Хазанова С. В.**, магистрант **Абросимов А. С.**, магистрант **Дегтярев В. Е.**

Целью настоящей работы является освоение компьютерного моделирования энергетического спектра для электронов в связанных квантовых ямах на основе полупроводниковых наноструктур.

**Введение**

Энергетический спектр электронов в полупроводниковых наноструктурах определяется их размерами и топологией. Поэтому путем изменения размеров и топологии возможно управление энергетическими спектрами носителей заряда, что представляет большой интерес для практических приложений.

**Постановка задачи**

В связанных симметричных квантовых ямах (рис. 1) энергетические уровни испытывают известное расщепление, величина которого зависит от свойств разделяющих их барьера.



U0

x

U(x)

E2

E1

E0

 Рис. . Вид потенциальной ямы в квазиклассическом приближении.

Волновая функция и энергия расщепления, найденные в [1] в квазиклассическом приближении есть:

где ; - классическая частота периодического движения в одной яме.

*а* - точка поворота, отвечающая энергии E0 (рис. 1).

Квазиклассическое приближение справедливо, когда потенциал меняется достаточно плавно, так, что .

В полупроводниковых наноструктурах связанные квантовые ямы могут быть получены на основе гетероструктур (например, GaAs - AlGaAs [2]), при этом границы слоев резкие (много меньше длины волны Де Бройля). Поэтому, строго говоря, квазиклассическое приближение неприменимо. Такая задача рассмотрена в [3] (рис. 2).



E

III

II

I

x

2a + b

a + b

a

0

V0

U(x)

Рис. 2. Вид потенциальной ямы.

Для уровней энергии в такой яме найдено уравнение:

где ; .

При решение уравнения (3) получают в виде:

где ; ; - значение энергии в потенциальной яме шириной *a*. Тогда, для энергии найдем:

Волновые функции нижнего и верхнего уровня соответственно:

Выражения (5,6) выполнены при условии , то есть при большем затухании волновых функций в области барьера.

Для компьютерного моделирования математическую задачу необходимо поставить в безразмерном виде, чтобы исключить в расчетах ошибки вычислений, связанные с большими и малыми размерными константами, такими как постоянная Планка или масса покоя электрона. Естественным масштабом расстояния в задаче является ширина ямы *L*, которую можно принять за единицу длины.

Тогда единицей измерения энергии будет величина . В безразмерном виде уравнения Шредингера и граничные условия примут вид:

Для ямы с бесконечными стенками (рис. 3), задачу можно решить методом пристрелки, изложенным в [4].

Для симметричной ямы с конечными барьерами задачу также можно решить методом пристрелки. В симметричной яме волновые функции могут быть симметричными или антисимметричными. Поэтому, сместив начало координат в центр ямы, можно для симметричных волновых функций брать начальные условия как: , а для антисимметричных , Критерием правильности волновых функций будет их сходимость в областях вне ямы.

**Пример моделирования в пакете MATHEMATICA**

  x

2 + β

1 + β

1

0

Рис. 3. Вид потенциала в безразмерных единицах двух связанных квантовых ям, ограниченных бесконечными стенками, высота барьера - 0,5 эВ, ширина структуры - 40 нм.

Рис. 4. Зависимость логарифма расщепления уровня от ширины разделяющего барьера.

Рис. 5. Зависимость логарифма расщепления уровня от высоты разделяющего барьера.

**Порядок выполнения работы**

1. Разработать программу моделирования энергетического спектра в потенциальной яме с произвольным потенциалом.
2. Получить у преподавателя вид потенциала в яме.
3. Провести исследование зависимости расщепления уровней в яме от параметров барьера.
4. Найти волновые функции.

**Вопросы для подготовки допуска**

1. Примеры наноструктур c эффектами размерного квантования.
2. Условия проявления эффектов размерного квантования в наноструктурах.
3. Квазиклассические решения для связанных квантовых ям.
4. Решения для прямоугольных барьеров.
5. Применение метода пристрелки к решению задачи моделирования.

**Литература**

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, 1974
2. А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С. Ф. Мушхин, С. А. Рыков. Физика наноразмерных систем. Спб.: Наука, 2001.
3. И. И. Гольдман, В. Д. Кривченков. Сборник задач по квантовой механике. М.: Гос. изд-во технико-теоретической литературы, 1957.
4. В. Н. Агарев. Моделирование энергетического спектра в полупроводниковых наноструктурах методом пристрелки. ННГУ, компьютерный фонд изданий, 2007.