министерство образования и науки

российской федерации

**Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского**

**Моделирование энергетического спектра**

**для электронов в квантовых ямах**

Агарев В.Н.

***Практикум***

Рекомендовано методической комиссией физического факультета для студентов ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»

Нижний Новгород

2017

УКД 537.3

ББК 22.3

 С-43

С-43 Моделирование энергетического спектра для электронов в квантовых ямах. Автор:Агарев В.Н. Практикум.– Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. – 9 с.

Рецензент: к.ф.-м.н., доцент Васин А.С.

Пособие посвящено компьютерному моделированию энергетического спектра для электронов в полупроводниковых квантовых ямах. Приведено описание лабораторной работы и указания к её выполнению.

Практикум предназначен для студентов физического факультета ННГУ в качестве пособия при подготовке и проведении лабораторных работ по курсу «Наноэлектроника».

Ответственный за выпуск:

председатель методической комиссии

физического факультета ННГУ, к.ф.-м.н., доцент Сдобняков В.В.

УКД 537.3

ББК 22.3

**© Нижегородский государственный университет**

**им. Н.И. Лобачевского, 2017**

**Целью** настоящей работы является освоение компьютерного моделирования энергетического спектра для электронов в полупроводниковых квантовых ямах.

**Введение**

Полупроводниковые квантовые ямы являются основой создания новых полупроводниковых приборов. Важным качеством таких структур является зависимость электронного спектра от размеров структуры (размер имеет значение!).

**Постановка задачи**

Энергетический спектр для электронов в квантовой яме мы будем искать как решение уравнения Шредингера в приближении эффективной массы.



Здесь m – эффективная масса носителя заряда.

Перейдем к безразмерным единицам. Примем за единицу длины ширину ямы W, тогда единицей измерения энергии будет величина . В безразмерном виде уравнение Шредингера и граничные условия примут вид:





Волновые функции вне ямы с глубиной V0, соответствующие собственным значениям энергии  , будут иметь вид[2]:



Где ∆x – расстояние до края ямы. На длине  волновая функция спадает в е раз. Если на границе ямы волновая функция имеет порядок единицы, то заданной малой величины  функция достигает на длине  . На такую величину должны отстоять xmin и xmaxот краев ямы.

Для численного решения уравнения Шредингера введем дискретную сетку:

xn=a\*n,гдеn=0, N+1,a=(xmax-xmin)/(N+1), тогда

$$ψ^{″}≈\frac{ψ\_{n+1}+ψ\_{n-1}-2ψ\_{n}}{a^{2}}$$

В результате уравнение Шредингера в дискретном виде будет:

$ψ\_{n+1}+ε\_{n}ψ\_{n}+ψ\_{n-1}=0$ (1)

Где$ε\_{n}=-2+a^{2}(E-V\_{n})$ , $V\_{n}=V(x\_{n})$, $ψ\_{n}=ψ(x\_{n}$).

Граничные условия:

$ψ\_{0}=0; ψ\_{N+1}=0$*.*

В матричном виде уравнение можно записать:

$TΨ=0$ (2)

ЗдесьT – трех диагональная матрица, 𝜳 – вектор волновой функции.

**Решение задачи методом Уилкинсона**

Для того, чтобы однородная система уравнений (2) имела ненулевое решение, необходимо, чтобы det(T)=0.

В методе Уилкинсона[3] трех диагональная матрица Tпредставляется в виде произведения двух матриц:

T=L\*R.

Элементы правой (верхней) двух диагональной матрицы R:

Ri,i=pi i=1,N;p1=𝜀1, pk+1=𝜀k+1 – 1/pk k=1,N-1;

Ri,i+1=1 i=1,N-1;

Элементы левой (нижней) двух диагональной матрицы L:

Li,i=1 i=1,N;

Li+1,i=1/pii=1,N-1;

Определитель матрицы Tможно найти как:

det(T)=det(L\*R)=det(L)\*det(R)=1\*$\prod\_{i=1}^{N}p\_{i}$

Строя зависимость det(T)(E) в интервале от 0 до V0находим значения энергии, где det(T)(E) меняет знак. Используя линейную интерполяцию между знакопеременными точками, находим значения энергии для связанных состояний в квантовой яме.

Волновые функции, соответствующие найденным собственным значениям энергии можно вычислить путем итераций.

Поскольку функции, соответствующие собственным значениям энергии, являются собственными функциями, то любую пробную функцию можно разложить в ряд по собственным функциям.

$$ψ=\sum\_{k}^{}C\_{k}ψ\_{k}$$

Действуя на пробную функцию обратным оператором T-1последовательно М раз получим:

$T^{-M}ψ=\sum\_{k}^{}C\_{k}\frac{1}{(E\_{k}-E)^{M}}ψ\_{k}$ (3)

При E⟶Ekв ряду (3) на каждой итерации возрастает вклад собственной функции 𝟁k , поэтому, если проводить нормировку результирующей функции на каждой итерации, то исходная пробная функция будет приближаться к собственной 𝟁k .

Пробную функцию можно взять в простом виде:

$ψ\_{0}=0; ψ\_{N+1}=0$*.*$ψ\_{k}=1 $при k=1,N.

Тогда процесс итераций можно определить как:

$$ψ^{(n+1)}=T^{-1}ψ^{(n)}$$

где n – номер итерации. Откуда:

$Tψ^{(n+1)}=ψ^{(n)}$, или

$LRψ^{(n+1)}=ψ^{(n)}$ (4)

Решение (4) можно разделить на два этапа:

$Lφ^{(n)}=ψ^{(n)}$ (5)

$Rψ^{(n+1)}=φ^{(n)}$ (6)

Сначала решается первая системаи находится вспомогательный вектор$φ^{(n)}$:

$φ\_{1}^{(n)}=ψ\_{1}^{(n)}$ , $φ\_{k+1}^{(n)}=ψ\_{k+1}^{(n)}-\frac{φ\_{k}^{(n)}}{p\_{k}}$k=1,N-1.

Затем находится вектор $ψ^{(n+1)}$:

$ψ\_{N}^{(n+1)}=\frac{φ\_{N}^{(n)}}{p\_{N}}$ , $ψ\_{k-1}^{(n+1)}=\frac{φ\_{k-1}^{(n)}-ψ\_{k}^{(n+1)}}{p\_{k-1}}$k=N,2 .

Процесс итераций можно закончить, если разница между волновыми функциями на *n*и *n*+1 итерацияхотличаются меньше заданной малой величины 𝜹.

**Алгоритм моделирования**

Алгоритм моделирования рассмотрим на примере в пакете MATHEMATICA.

**Задание потенциала ямы.**

u=100;

xmin=0;

xmax=1.5;

U[x\_]=Which[x<0.5,0,(x>=0.5)&&(x<0.6),u-9,(x>0.6)&&(x<1),0,x>=1,u];

Plot[U[x],{x,0,1.5}];



**Процедура расчета детерминанта.**

NumberOfSteps=100;

EnergyMax=100;

EnergyStep=1;

Step=(xmax-xmin)/(NumberOfSteps+1);

Determinant[Energy\_]:=Module[{

e={},

p={}

},

Do[AppendTo[e,-2+Step^2 (Energy-U[x])],{x,xmin+Step,xmax-Step,Step}];

AppendTo[p,e[[1]]];

Do[AppendTo[p,e[[n+1]]-1/p[[n]]],{n,1,NumberOfSteps-1}];

DT=1;

Do[DT\*=p[[n]],{n,1,NumberOfSteps}];

P=p;

];

**Построение зависимости детерминанта от энергии и нахождение уровней энергии.**

DetEnergy={};

Do[Determinant[Energy];AppendTo[DetEnergy,{Energy,DT}],{Energy,0,EnergyMax,

EnergyStep}];

ListPlot[DetEnergy,PlotJoined->True];



EnergyLevel={};

reshenie[i\_]:=Module[{},x/.FindRoot[Fit[{{DetEnergy[[i,1]],DetEnergy[[i,2]]},

{DetEnergy[[i+1,1]],DetEnergy[[i+1,2]]}},{1,x},x]==0,{x,DetEnergy[[i,2]],

DetEnergy[[i+1,2]]}][[1]]];

Do[If[DetEnergy[[i,2]]\*DetEnergy[[i+1,2]]<0,AppendTo[EnergyLevel,reshenie[i]]],

{i,1,Length[DetEnergy]-1}];

EnergyLevel

{19.8502,32.5314,85.3432}

**Вычислениеволновыхфункций.**

o=1;

For[o==1,o<=Length[EnergyLevel],

PsiError=0.001;

(\*задание начальных значений и текущего уровня энергии\*)

Determinant[EnergyLevel[[o]]];Psi=Table[1,{i,1,NumberOfSteps+2}];

Psi[[1]]=0;

Psi[[NumberOfSteps+2]]=0;

Phi=Table[0,{i,1,NumberOfSteps}];

(\*процедура нормировки волновой функции\*)

NormPsi[Psi[[]]\_]:=Module[{SS=0},

Do[SS+=Psi[[i]]^2,{i,2,NumberOfSteps+1}];

A=Step\*SS;

Do[Psi[[i]]/=Sqrt[A],{i,2,NumberOfSteps+1}]];

NormPsi[Psi];

PsiDelta=1;

(\*итерационныйцикл\*)

While[PsiDelta>PsiError,

PsiPrev=Psi;

Phi[[1]]=Psi[[2]];

Do[Phi[[k+1]]=Psi[[k+2]]-Phi[[k]]/P[[k]],{k,1,NumberOfSteps-1}];

Psi[[NumberOfSteps+1]]=Phi[[NumberOfSteps]]/P[[NumberOfSteps]];

Do[Psi[[k+1]]=(Phi[[k]]-Psi[[k+2]])/P[[k]],{k,NumberOfSteps-1,1,-1}];

NormPsi[Psi];

PsiDelta=0;

Do[PsiDelta=Abs[Psi[[i]]-PsiPrev[[i]]],{i,1,NumberOfSteps}];

];

Fpsi={};

Do[AppendTo[Fpsi,{xmin+Step\*(i-1),Psi[[i]]}],{i,1,NumberOfSteps+2}];

ListPlot[Fpsi,PlotJoined->True];o++];

Print["Energia = ",N[EnergyLevel]];







Energia = {19.8502,32.5314,85.3432}

В пакете MATHEMATICAесть встроенные функции вычисления собственных значений и собственных векторов матрицы[4].

**Пример с использованием встроенных функций**.

av = 50;(\*верхняя граница интервала поиска энергетических уровней\*)

u[z\_] = Which[z < 1/2, 0, 1/2 <= z <= 1, (2\*z - 1)\*av, z > 1,

const = 0.361;(\*h^2/8[Pi]\*m\*a^2,m-эффективнаямасса,a-ширина потенциальной ямы\*)

x = Table[q\*sh, {q, 1, 3/sh}];

matr = Table[ Table[Which[i == k - 1, -1, i == k, 2 + sh^2\*u[i\*sh],

i == k + 1, -1, i>= k + 1, 0, i<= k - 1, 0], {i, 3/sh}], {k, 3/sh}]/sh^2;

gr = N[Eigenvectors[matr]];

en = N[Eigenvalues[matr]];

Do[If[en[[j]] <= av, ris = {};

Do[If[x[[k]] <= 1 + 5/Sqrt[av - en[[j]]],

AppendTo[ris, {x[[k]], gr[[j, k]]}]], {k, Length[x]}];

PrependTo[ris, {0, 0}]; ListPlot[ris];

Print["E=", const\*en[[j]], ",ev"]], {j, Length[en]}];



E=16.3115,ev



E=5.29541,ev

**Порядок выполнения работы**

1. Разработать программу моделирования энергетического спектра в потенциальной яме. Проверить работу программы на модели с плоским дном. Вычислить уровни энергии с заданной погрешностью и проверить их по точным значениям, известным из теории.
2. Получить у преподавателя вид потенциального рельефа ямы и провести расчет энергетических состояний и волновых функций.
3. Провести исследования зависимости энергетических состояний и волновых функций от параметров потенциального рельефа ямы.

**Вопросы для подготовки допуска**

1. Примеры наноструктур с эффектами размерного квантования.
2. Условия проявления эффектов размерного квантования в наноструктурах.
3. Постановка задачи моделирования энергетического спектра.
4. Решение граничной задачи методом Уилкинсона.

**Литература**

1. В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. Физика квантовых низкоразмерных структур. М., «Логос», 2000.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Квантовая механика. М., «Наука», 1974.
3. Дж. Х. Уилкинсон. Алгебраическая проблема собственных значений. М., «Наука», 1970.
4. В.А. Муравьев, Д.Е. Бурланков Практическое введение в пакет MATHEMATICA. Н.Н., Издательство ННГУ, 2000.