министерство образования и науки

российской федерации

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

**Моделирование энергетического спектра**

**для электронов в наноструктурах методом пристрелки**

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 наноструктурах методом пристрелки. 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 наноструктурах методом пристрелки.

**Введение**

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

**Метод компьютерного моделирования**

Поскольку точно могут быть решены только некоторые простые задачи, распространенным методом теоретического анализа наноструктур является метод компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование включает в себя несколько важных этапов:

1. Постановка задачи.

На этом этапе производится теоретический анализ, формулируются основные уравнения физической модели, граничные (начальные) условия и пределы применимости модели.

1. Формулировка математической модели.

Используя характерные единицы измерения физических величин, уравнения модели записываются в безразмерном виде. Это позволяет уменьшить или 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, может, затем, применена к задачам, не имеющим точного решения.

**Постановка задачи**

Для одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими барьерами уравнение Шредингера имеет вид:

 (1)

Здесь *m* – эффективная масса носителя заряда. Из-за невозможности проникновения частицы через бесконечно высокий барьер, волновые функции на границах должны обращаться в ноль. Решением уравнения (1) для ямы с плоским дном ( *U(x)=0 )* являются волновые функции и энергетические состояния, которые даются известными формулами [1]:

 (2)

 (3)

Максимальная высота барьера в полупроводниках ограничивается работой выхода

эВ. Поэтому, для существования связанных состояний в яме необходимо, чтобы << , то есть . Если  , то нм.

Электрическая подвижность носителей заряда в полупроводниках  , где - время релаксации импульса. Неопределенность энергии за время  будет . Для того, чтобы энергетические состояния в яме были разделены, необходимо чтобы  или  , где - длина свободного пробега. В полупроводниках при  и  см2/в сек размер ямы должен быть нм [2].

Квантовые точки (например Siв матрице SiO2) или квантовые ямы в гетероструктурах, таких как GaAs-AlGaASимеют высоту барьера, сравнимую с расстоянием между уровнями размерного квантования. При этом волновые функции для связанных электронов в яме будут распространяться и за пределы ямы.

**Математическая модель**

Естественным масштабом расстояния в задаче является размер ямы , который можно принять за единицу измерения длины. Тогда единицей измерения энергии будет величина . В безразмерном виде уравнение Шредингера и граничные условия примут вид:

 (4)

 (5)

Для ямы с плоским дном ( *V(x)=0 )*, обозначая , из (4) получаем:

 (6)

Решением (6) является собственная функция и собственные значения:

 (7)

;  (8)

Если значения *k1*вычисляются с погрешностью , то погрешность волновой функции при *x=*1 будет .

Погрешность в энергии:

 (9)

Соотношение (9) показывает допустимую погрешность вычисления граничного значения волновой функции  для достижения заданной погрешности вычисления энергии .

Для симметричной ямы с глубиной *V*Уравнения Шредингера внутри и вне ямы имеют вид (6) и (4), соответственно. Поэтомуволновые функции имеют вид:

 при 0<x<1

при x>1

при x<0.

Условия непрерывности для волновой функции и ее производной на границах ямы приводят к трансцендентному уравнению для определения уровней энергии [3].



Фазовый угол также определяется из граничных условий:

**Алгоритм решения**

Одним из методов решения граничной задачи (4), (5) является метод пристрелки. В этом методе граничную задачу заменяют задачей Коши с начальными условиями, которыми являются значения функции и производной на одной границе. Другое граничное условие является условием пристрелки, достижение которого является критерием правильности решения. Параметром пристрелки является значение энергии . Однако, если с начальным условием для функции все ясно: =0, то как выбрать начальное значение ? Обращаясь к уравнению (4), видим, что это уравнение является линейным по  . То есть, если  - решение, то  - тоже решение, где  - любое число. Выбирая произвольные значения  , мы, тем самым, умножаем  на некоторое (неизвестное нам) число. Но, т.к. =0, то это начальное значение остается неизменным. Это особенность задачи с нулевым начальным условием. Если бы 0, то это начальное значение также умножалось бы на произвольное число, и, таким образом, граничное условие было бы нарушено. Если - любое, то, помня о теоретических функциях (7), которые имеют порядок единицы, можно просто принять =1. При разработки программ на языках высокого уровня (DELPHI, C++) для численного интегрирования уравнения (4) можно применить метод Рунге-Кутта. Адаптивная программа РКФ-45 [3] реализует метод 45 порядка, где интегрирование происходит методом 4 порядка, а приближение 5 порядка применяется для контроля точности решения на каждом шаге и выбора оптимального шага интегрирования. Применение адаптивной процедуры обеспечивает достижение заданной точности решения на конце интервала интегрирования, то есть второго граничного условия. При применении пакета MATHEMATICA решение уравнения (4) осуществляется функцией NDSolve [4], в параметрах которой необходимо задать нужную точность вычисления и вывода результатов.

Для симметричной ямы с конечной глубиной начало координат можно перенести в центр ямы. Тогда начальные условия для симметричных волновых функций можно принять =1, =0,а для антисимметричных функций – наоборот =0, =1.

Граничные условия можно определить для логарифмических производных =

При этом правильные знаки следует выбирать исходя из вида волновых функций.

**Указания к разработке программы**

Входными параметрами задачи являются: интервал энергий, в котором производится поиск уровня энергии, и погрешность вычисления уровня энергии . Результатом работы программы являются собственные значения энергии, вычисленные с заданной точностью, и соответствующие им волновые функции. На первом этапе решения производится сканирование всего интервала энергии с большим шагом (однако меньшим, чем расстояние между уровнями) с целью определения интервалов, содержащих искомые уровни энергии. Затем в каждом найденном интервале (например, методом дихотомии) производится поиск значения энергии с заданной погрешностью.

**Порядок выполнения работы**

1. Разработать программу моделирования энергетического спектра в потенциальной яме с бесконечно большими барьерами.
2. Проверить работу программы на модели с плоским дном. Вычислить уровни энергии с заданной погрешностью и проверить их по точным значениям, известным из теории.
3. Получить у преподавателя вид потенциального рельефа ямы и провести расчет энергетических состояний и волновых функций.
4. 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. Решение граничной задачи методом пристрелки.
4. Математическая модель. Погрешность вычисления уровней энергии в яме. Требования к точности интегрирования уравнения.
5. Применение метода пристрелки к моделированию уровней энергии в яме с конечной глубиной.

**Пример моделирования в пакете MATHEMATICA**



Вид потенциала.

Значение энергии основного состояния: 



Волновая функция основного состояния.

**Литература**

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Квантовая механика. М., «Наука», 1974.
2. В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. Физика квантовых низкоразмерных структур. М., «Логос», 2000.
3. Д. Каханер, К. Моулер, С. Нэш Численные методы и программное обеспечение. М., «Мир», 2001.
4. В.А. Муравьев, Д.Е. Бурланков Практическое введение в пакет MATHEMATICA. Н.Н., Издательство ННГУ, 2000.