

**ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В МНОГОСЛОЙНЫХ КВАНТОВЫХ
НАНОСТРУКТУРАХ**

Насиров Мурад Закирович

(профессор),

Матбабаева Саида Дилмурад кизи

(докторант),

Жанибекова Севара Дилмурад кизи

(докторант)

Андижанский государственный университет, Узбекистан

Тел.: +99890-549-81-49, e-mail: nmz1964@yandex.ru

Аннотация. В статье использовано аналитическое решение уравнения Шредингера для электрона в каждом слое и граничные условия между слоями для моделирования поведения электронов в многослойных квантовых наноструктурах, а также создана программа на языке Visual Basic для рассматриваемого процесса. В программе имеется возможность изменять эффективную массу электрона в каждом слое, высоту и ширину потенциального барьера в нем, рассчитывать коэффициенты прохождения и возврата электронов через барьеры и вероятность нахождения в них, а также отправлять результаты расчета в MS Excel. С помощью программы исследована зависимость коэффициентов прохождения и отражения электронов из барьеров и вероятность пребывания в них от толщины и ширины барьеров.

Ключевые слова: электрон, потенциальный барьер, уравнение Шредингера, коэффициенты прохождения и отражения.

SIMULATION OF ELECTRON MOVEMENT IN QUANTUM NANOSTRUCTURES

M.Nosirov, S.Matboboyeva, S.Jonibekova

Andijan State University, Uzbekistan

Тел.: +99890-549-81-49, e-mail: nmz1964@yandex.ru

Annotation. The article uses an analytical solution to the Schrödinger equation for an electron in each layer and boundary conditions between layers to simulate the behavior of electrons in multilayer quantum nanostructures, and also creates a Visual Basic program for the process under consideration. The program has the ability to change the effective

mass of an electron in each layer, the height and width of the potential barrier in it, calculate the coefficients of transmission and return of electrons through barriers and the probability of being in them, and also send the calculation results to MS Excel. Using the program, the dependence of the transmission and reflection coefficients of electrons from barriers and the probability of staying in them on the thickness and width of the barriers was studied.

Keywords: electron, potential barrier, Schrödinger equation, transmission and reflection coefficients.

Введение

На заре квантовой механики имели дело только с атомными системами, но в конце прошлого века полупроводниковая технология развилась до такой степени, что стало возможным создавать структуры с размерами, сравнимыми с характерной длиной волны де Бройля электронов, и возрос интерес к квантовой механике [1, 2].

В работе рассмотрено моделирование движения электронов в многослойных квантовых наноструктурах и представлены методы аналитического решения уравнения Шрёдингера для электронов в нескольких одномерных потенциальных барьерах.

Основные уравнения

При решении задач, связанных с движением электронов в многослойных структурах, решение уравнения Шредингера для каждого слоя записывается в виде суммы падающих и отраженных волн де Бройля, а граничные условия между слоями используются для определения амплитуд этих волн.

Рассмотрим наноструктуру, состоящую из N слоев, расположенных между полубесконечными областями, где потенциалы в каждом слое считаются постоянными (рис. 1):

$$U(z) = \begin{cases} U_0, z < z_0, \\ U_k, z_{k-1} < z < z_k \\ U_{N+1}, z > z_N \end{cases} \quad (1)$$

где z_k - координаты границ между слоями k - и $k+1$, $k = 1, \dots, N$.

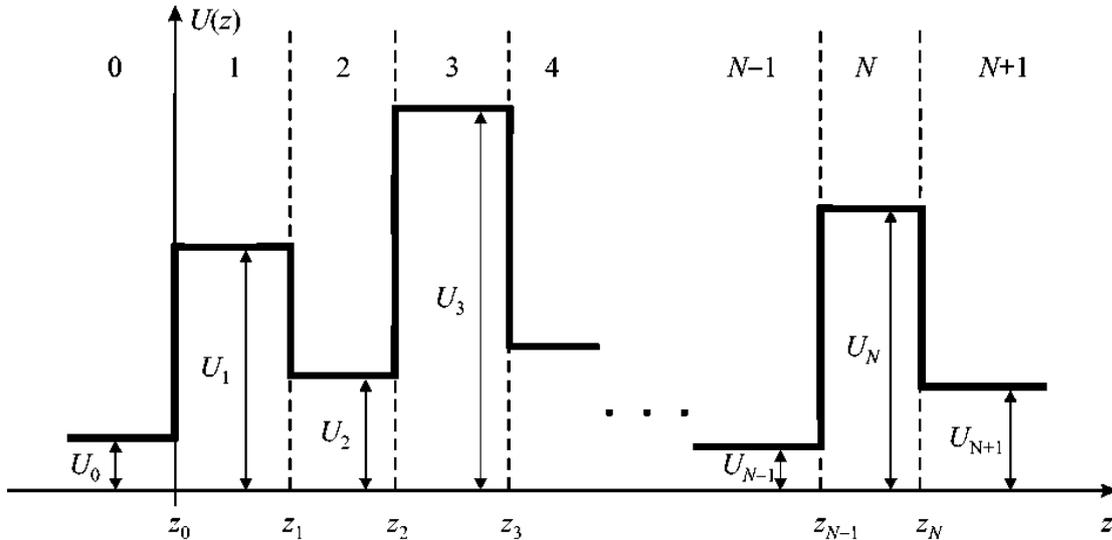


Рис. 1. Потенциальные барьеры, возникающие в многослойных квантовых структурах

Предположим, что источник электронов расположен в области 0 и бесконечно далеко от структуры, а электрон с энергией E движется от источника вдоль оси Oz в положительном направлении.

Решение уравнения Шрёдингера в k -слое пишется в виде

$$\psi_k = A_k e^{i\gamma_k z} + B_k e^{-i\gamma_k z} \quad (2)$$

где A_k и B_k – амплитуды k -падающей и отраженной волны де Бройля,

$$\gamma_k(E) = \frac{\sqrt{2m_k(E - U_k)}}{\hbar}, \quad (3)$$

m_k – эффективная масса электрона в k -слое.

Граничные условия для таких структур пишется в виде

$$\begin{cases} \psi_k(z_k) = \psi_{k+1}(z_{k+1}), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \psi_{k+1}}{\partial z}(z_{k+1}) \end{cases} \quad (4)$$

Подставляя общее решение (2) в эти граничные условия (4) получим систему алгебраических уравнений для определения A_k, B_k .

$$\begin{cases} A_k e^{i\gamma_k z_k} + B_k e^{-i\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}, \\ iA_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{i\gamma_k z_k} - iB_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{-i\gamma_k z_k} = iA_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{i\gamma_{k+1} z_k} - iB_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{-i\gamma_{k+1} z_k} \end{cases} \quad (5)$$

Путем алгебраических преобразований можно привести эту систему в вид

$$\begin{cases} A_{k+1} = \frac{A_k}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} + \frac{B_k}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k}, \\ B_{k+1} = \frac{A_k}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} + \frac{B_k}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} \end{cases} \quad (6)$$

Коэффициенты прохождения и отражения выражаются через коэффициенты A_k, B_k выражениями

$$D = \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|\gamma_{N+1}| |A_{N+1}|^2}{|\gamma_0| |A_0|^2} \quad (7)$$

$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} \quad (8)$$

Для рассмотрения N-слойную (барьерную) структуру, необходимо знать параметры N+2 областей и координаты границ между ними с учетом двух областей вокруг них. Например, для изучения трехслойного структуру необходимо знать параметры пяти областей и координаты четырех границ между ними. Эти данные вместе с уравнением Шредингера и граничных условий позволяют определить коэффициенты прохождения и отражения, а также амплитуды волн де Бройля в каждом слое.

Результаты и обсуждение

Для компьютерного моделирования физических процессов в упомянутых выше многослойных квантовых структурах создана программа на языке Visual Basic. Программа позволяет вводить и изменять количество слоев, эффективную массу электрона в каждом слое, высоту и ширину потенциального барьера для каждого слоя. Результаты расчетов передаются в MS Excel и строятся графики [3, 4].

На рис. 2 показаны энергетические зависимости коэффициентов прохождения и отражения при различных значениях высоты потенциального барьера 1-го слоя, где $m_0=0,067$ эВ, $m_1=0,2$ эВ, $m_2=0,1$ эВ, $m_3=0,2$ эВ, $U_0=0,1$ эВ, $U_2=0,5$ эВ, $U_3=0,7$ эВ, $z_1=2$ нм, $z_2=4$ нм, $z_3=6$ нм. Как видно из рис. 2а, резонанс коэффициента туннелирования наблюдается при значениях энергии $E=0,6$ эВ и $E=0,8$ эВ, амплитуда резонанса при $E=0,6$ эВ уменьшается с увеличением высоты потенциального барьера 1-го слоя, а амплитуда резонанса при $E=0,8$ эВ увеличивается.

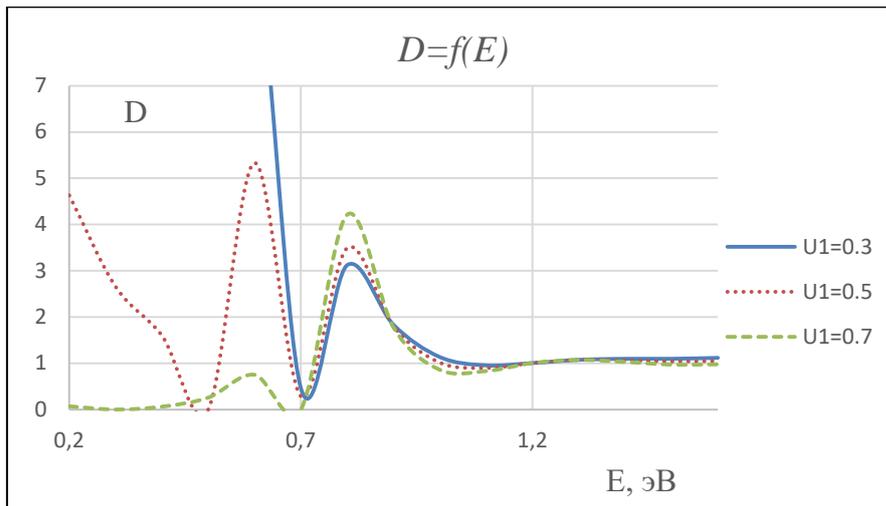


Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения от энергии при различных значениях высоты потенциального барьера 1-слоя ($m_0=0.067$ эВ, $m_1=0.2$ эВ, $m_2=0.1$ эВ, $m_3=0.2$ эВ, $U_0=0.1$ эВ, $U_2=0.5$ эВ, $U_3=0.7$ эВ, $z_1=2$ нм, $z_2=4$ нм, $z_3=6$ нм).

Заключение

Таким образом, в данной работе для моделирования поведения электронов в многослойных квантовых наноструктурах использовались аналитическое решение уравнения Шрёдингера для электрона в каждом слое и граничные условия между слоями, а также создана программа на языке Visual Basic для рассматриваемого процесса.

В программе имеется возможность изменять эффективную массу электрона в каждом слое, изменять высоту и ширину потенциального барьера в нем, коэффициенты прохождения и отражения электронов через барьеры и вероятность нахождения в них, а также отправить результаты расчета в MS Excel.

Результаты расчетов показывают, что при значениях энергии $E=0,6$ эВ и $E=0,8$ эВ наблюдается резонанс коэффициента туннелирования, причем по мере увеличения потенциального барьера 1-го слоя амплитуда резонанса при $E=0,6$ эВ уменьшается, а амплитуда резонанса при $E=0,8$ эВ увеличивается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
2. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. Москва: "Логос", 2000.
3. Насиров М., Юлдашева Н., Матбобоева С., Кучкарова М.

Численное решение уравнения Шредингера для произвольного потенциала//«Научный импульс», 2022, № 4 (100), с. 718-722.

4. Nosirov M., Matbabyeva S., Janibekova S. Simulation of electron movement in quantum nanostructures//Science and innovation. volume 2, issue 12, 2023, pp. 296-301. <https://doi.org/10.5281/zenodo.104332606>