

Влияние электрического поля на движение электрона в многослойных квантовых наноструктурах

М. З. Насиров*, С. Д. Матбабаева, Р. Алиев

Андижанский государственный университет,

г. Андижан, 170100, Узбекистан

**e-mail: nmz1964@yandex.ru*

Поступила в редакцию 28.03.2024

После доработки 16.01.2025

Принята к публикации 23.01.2025

Использованы 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 трансформировать результаты расчета в MS Excel. С помощью программы исследована зависимость коэффициентов прохождения электронов и их отражения от барьеров и вероятность пребывания в них от толщины, ширины барьеров и от электрического поля.

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

УДК 530.145

<https://doi.org/10.52577/eom.2025.61.1.065>

ВВЕДЕНИЕ

Многослойные структуры для микро- и нанооптоэлектронных различных устройств все шире применяются в качестве новых материальных баз [1]. Поверхность полупроводника, в частности кремния, непосредственно контактирует с другими материалами, за счет чего достигаются необходимые электронные и оптические эффекты в созданных устройствах. В прикладных задачах физики поверхности встречаются локальные границы с размерами порядка нескольких нанометров. При этом движение электронов может ограничиваться выбранными направлениями электрических полей. Также вероятны ограничения за счет внешних электрических полей. Локальные участки типа квантовых точек могут размещаться в объеме кристаллической решетки материала. Для решения физических задач в таких условиях используются методы квантовой механики.

При работе с кремниевыми квантовыми точками наблюдается некоторая пассивация поверхностных рекомбинационных потерь за счет улучшения квантового выхода [2]. Было показано, что для наноразмерных кристаллов характерно короткое время квантового выхода для определенной области спектра. Это вызывает

некоторое сужение их функционального применения [3]. Квантовые точки прямозонных полупроводников характеризуются более высокой фотоэлектрической устойчивостью и более широкой областью спектра [4].

Квантовая механика, созданная в прошлом столетии, (изначально ее принципы и методы) вызвала много споров, но в 21 веке ее используют для изучения интересных эффектов в наноустройствах, моделирования физических процессов, создания новых электронных устройств и все чаще рассматривают как прикладную науку, позволяющую создавать микро- и наноэлектронные устройства и т.д. [5].

При решении большинства задач квантовой механики используются точные решения уравнения Шредингера. Точное решение уравнения Шредингера легко реализовать для систем с высокой симметрией. Для реальных физических систем уравнение Шредингера сложно интегрировать, и для его анализа необходимо использовать различные приближенные и численные методы [6, 9].

В настоящее время разработаны различные методы компьютерного моделирования квантовых состояний в наноструктурах, основанные на разных микроскопических моделях сильной связи. В работе [7] представлено многообразие типов квантовых точек и их технологий, возможностей

применения в электронике, энергетике, биологии, медицине. Показано, что использование мельчайших, по сути, 0-мерных частиц приводит к значительному повышению эффективности материалов, используемых в названных отраслях. Предложенная в работе [8] многоуровневая математическая модель позволяет в динамике описать процессы формирования, взаимодействия и конденсации наноструктур в газовой среде, начиная от атомарно-электронного состояния и заканчивая верхним масштабным уровнем наноструктурных материалов, а также исследовать реальные технологические процессы и технические системы на наноуровне.

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

ТЕОРИЯ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В приближенных подходах решение в каждом слое многослойных структур записывается в виде линейной комбинации независимых решений и вводятся граничные условия для электронной волновой функции и ее производных по нормальной координате для согласования на гетерогранице.

Расчет электронных состояний в полупроводниковых наноструктурах методом эффективной массы основан на решении стационарного уравнения Шредингера, которое является одномерным для движения электронов в направлении, перпендикулярном плоскости слоев [10]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(z, E)}{\partial z^2} + U(z) \Psi(z, E) = E \Psi(z, E), \quad (1)$$

где m и E – эффективная масса и полная энергия электрона соответственно; $U(z)$ – потенциал. Решением этого уравнения является z -компонента волновой функции $\Psi(z, E)$, квадрат которой определяет вероятность обнаружения электрона в точке с координатой z .

При выполнении 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):

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & z < z_0, \\ U_k, & z_{k-1} < z < z_k, \\ U_{N+1}, & z > z_N \end{cases}, \quad (2)$$

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

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 Шредингера в k -слое пишется в виде:

$$\Psi_k = A_k e^{i\gamma_k z} + B_k e^{-i\gamma_k z}, \quad (3)$$

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

$$\gamma_k(E) = \sqrt{2m_k(E - U_k)}, \quad (4)$$

m_k – эффективная масса электрона в k -слое.

Граничные условия для таких структур можно записать в виде:

$$\begin{cases} \Psi_k(z_k) = \Psi_{k+1}(z_{k+1}), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \Psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \Psi_{k+1}}{\partial z}(z_{k+1}). \end{cases} \quad (5)$$

Тогда, подставляя общее решение (3) в эти условия, получим систему алгебраических уравнений относительно A_k, B_k .

$$\begin{cases} A_k e^{i\gamma_k z_k} + B_k e^{-i\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{i\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}, \\ iA_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{i\gamma_k z_k} - iB_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{-i\gamma_k z_k} = iA_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{i\gamma_{k+1} z_k} - iB_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{-i\gamma_{k+1} z_k}. \end{cases} \quad (6)$$

Путем алгебраических преобразований можно привести эту систему в вид:

$$\begin{cases} A_{k+1} = \frac{A_k}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} + \frac{B_k}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{-i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k}, \\ B_{k+1} = \frac{A_k}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} + \frac{B_k}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k m_{k+1}}{\gamma_{k+1} m_k} \right) e^{i(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k}. \end{cases} \quad (7)$$

Коэффициенты прохождения и отражения выражаются через коэффициенты A_k, B_k соотношениями:

$$D = \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|\gamma_{N+1}| |A_{N+1}|^2}{|\gamma_0| |A_0|^2}, \quad (8)$$

$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2}. \quad (9)$$

Современные методы роста многослойных квантовых структур со сложными потенциальными рельефами позволяют формировать связанные квантовые ямы, которые в свою очередь позволяют создавать структуры с заданным энергетическим спектром и скоростью

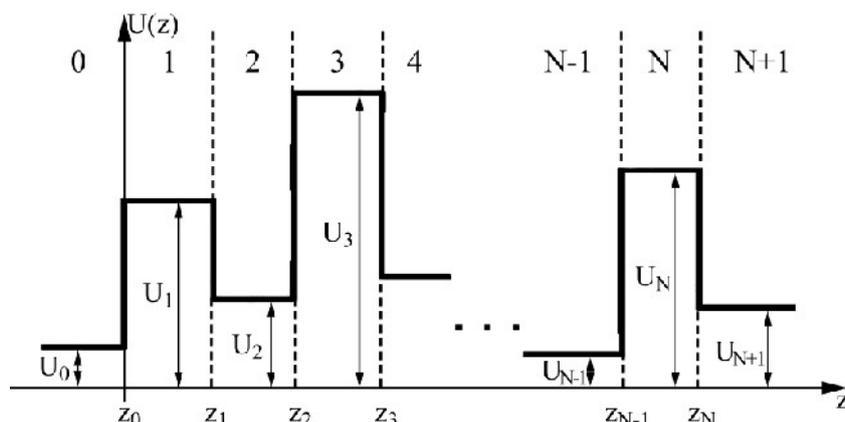


Рис. 1. Потенциальные барьеры, возникающие в многослойных квантовых структурах.

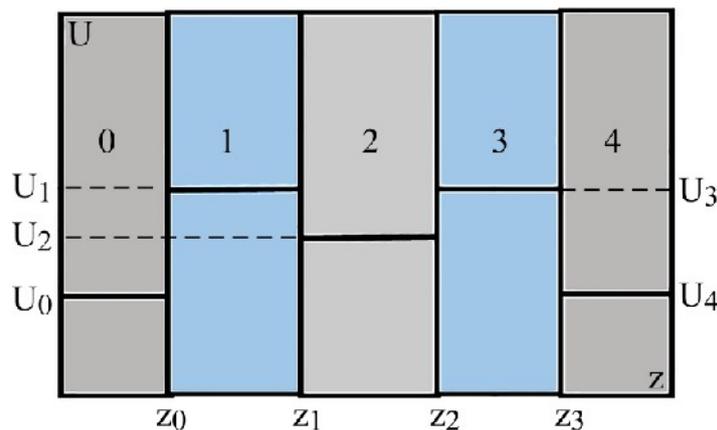


Рис. 2. Трехслойная квантовая структура.

рассеяния электронов не только за счет формы потенциальных ям, но и за счет изменения связей между ними. Кроме того, коэффициент прохождения через многобарьерную структуру в ряде случаев превышает коэффициент прохождения через одиночный барьер в несколько раз. Это результат интерференции прошедших и отраженных волн де Бройля.

Чтобы рассмотреть N -слойную (барьерную) структуру, необходимо знать параметры $N+2$ областей и координаты границ между ними с учетом двух областей вокруг них. Например, для изучения трехслойной структуры необходимо знать параметры пяти областей и координаты четырех границ между ними. Эти данные позволяют определить коэффициенты прохождения и отражения, а также амплитуды волн де Бройля в каждом слое.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

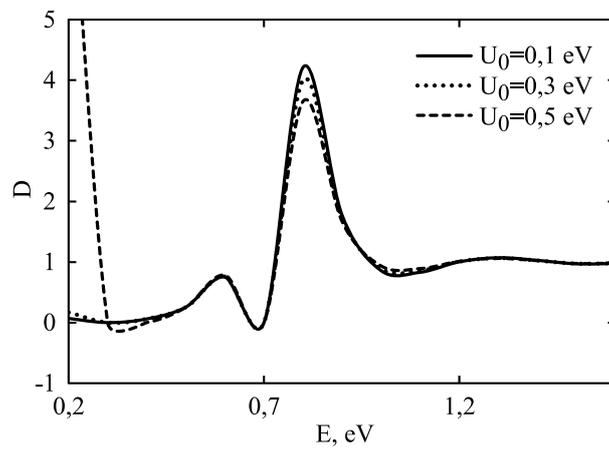
На языке Visual Basic создана программа для компьютерного моделирования физических процессов в упомянутых выше многослойных квантовых структурах, в частности в трехслойной структуре, изображенной на рис. 2, при этом $m_0 = 0,067$ эВ, $m_1 = 0,2$ эВ, $m_2 = 0,1$ эВ, $m_3 = 0,2$ эВ, $m_4 = 0,067$ эВ, $U_0 = 0,1$ эВ, $U_1 = 0,7$ эВ, $U_2 = 0,5$ эВ, $U_3 = 0,7$ эВ, $U_4 = 0,1$ эВ, $z_0 = 0$, $z_1 = 2$ нм, $z_2 = 4$ нм, $z_3 = 6$ нм.

Программа позволяет вводить и изменять количество слоев, эффективную массу электрона, высоту и ширину потенциального барьера в каждом слое. Результаты расчетов передаются в MS Excel, по которым и строятся графики.

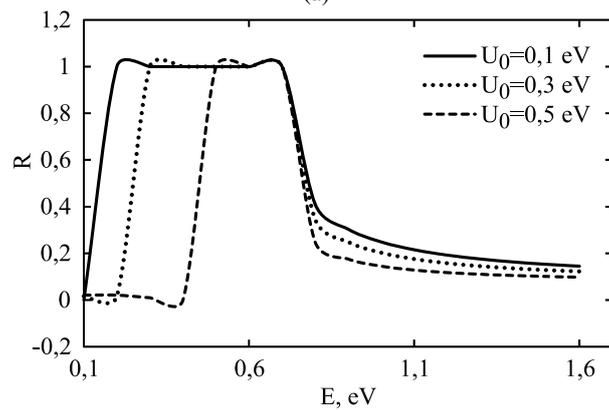
На рис. 3 показаны энергетические зависимости коэффициентов перехода и отражения при различных значениях высоты потенциального барьера 0-области. Из рис. 3а видно, что с увеличением потенциального барьера 0-области амплитуда резонанса коэффициента туннелирования несколько уменьшается при значении энергии $E = 0,8$ эВ. Из рис. 3б следует, что ширина коэффициента отражения уменьшается с увеличением потенциального барьера 0-области.

На рис. 4 показаны энергетические зависимости коэффициентов перехода и отражения при различных значениях высоты потенциального барьера 1-го слоя. Как видно из рис. 4а, резонанс коэффициента туннелирования наблюдается при значениях энергии $E = 0,6$ эВ и $E = 0,8$ эВ, а амплитуда резонанса при $E = 0,6$ эВ уменьшается с ростом потенциального барьера 1-го слоя. Амплитуда резонанса при $E = 0,8$ эВ увеличивается. Как следует из рис. 4б, ширина резонанса коэффициента отражения увеличивается с увеличением потенциального барьера 1-го слоя.

На рис. 5 представлена энергетическая зависимость коэффициента перехода при

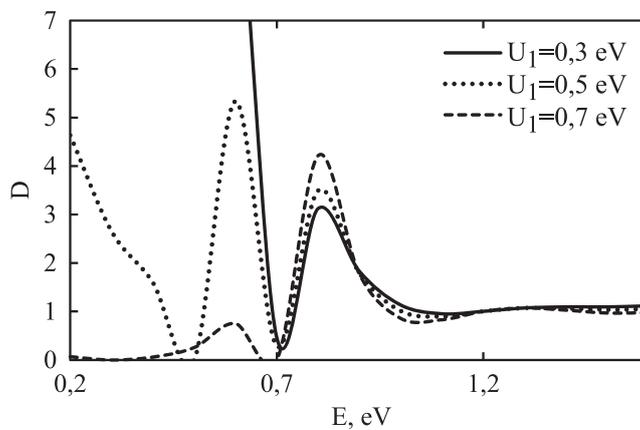


(a)

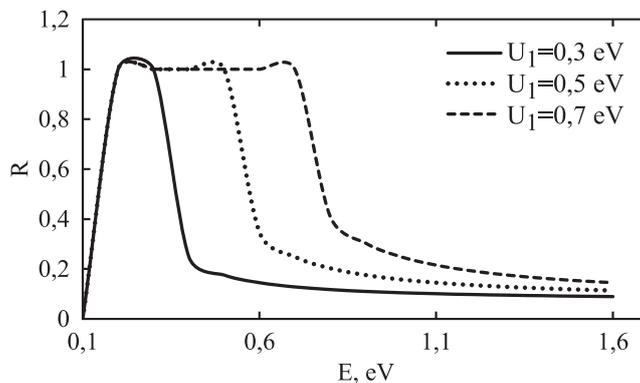


(б)

Рис. 3. Энергетические зависимости коэффициента перехода (а) и отражения (б) при различных значениях высоты потенциального барьера 0-области.



(a)



(б)

Рис. 4. Энергетические зависимости коэффициента перехода (а) и отражения (б) при различных значениях высоты потенциального барьера 1-го слоя.

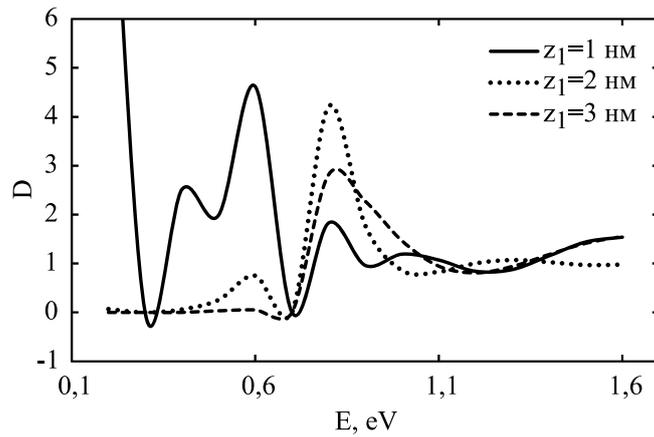


Рис. 5. Энергетическая зависимость коэффициента перехода при различных значениях ширины потенциального барьера 1-го слоя.

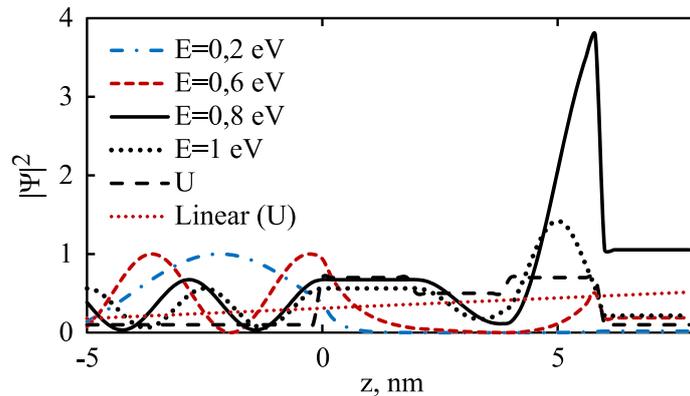


Рис. 6. Зависимость квадрата модуля волновой функции от координаты при различных значениях энергии электронов.

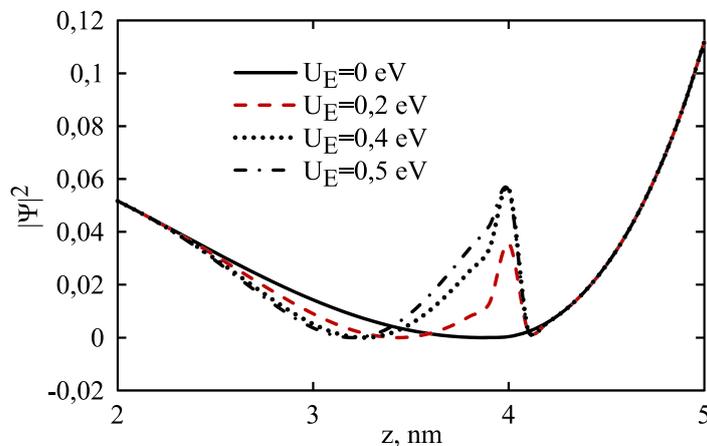


Рис. 7. Координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной ко 2-му слою.

различных значениях ширины потенциального барьера 1-го слоя. Из рисунка видно, что резонанс коэффициента туннелирования наблюдается при значениях энергии $E = 0,6$ эВ и $E = 0,8$ эВ, причем по мере увеличения ширины потенциального барьера 1-го слоя амплитуда резонанса при $E = 0,6$ эВ уменьшается, амплитуда резонанса при $E = 0,8$ эВ увеличивается. Увеличение ширины потенциального барьера слоя 1 существенно не влияет на коэффициент отражения.

На рис. 6 представлена зависимость квадрата модуля волновой функции от координаты при

различных значениях энергии электронов. Как видно из рисунка, резонанс возникает в результате интерференции проходящих и отраженных волн де Бройля на $z = 6$ нм при значении энергии $E = 0,8$ эВ. Также при значении энергии $E = 1,2$ эВ вероятность нахождения электрона после потенциального барьера отлична от нуля.

Программа также позволяет изучать, как изменяются разные слои под воздействием внешних воздействий, в частности, электрического поля. На рис. 7 представлена координатная зависимость квадрата волновой

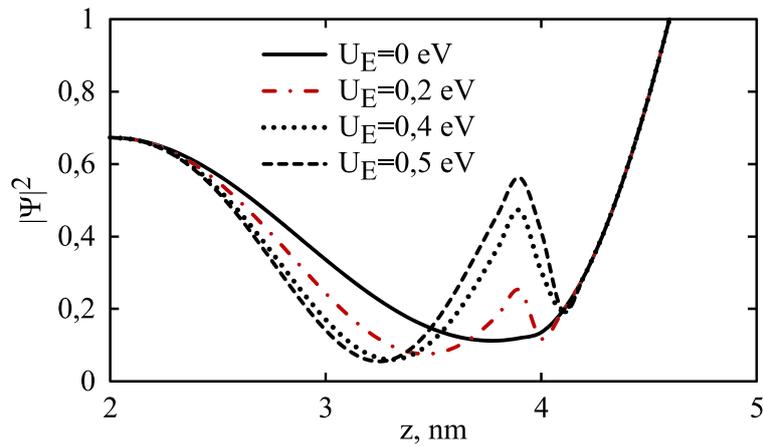


Рис. 8. Координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,8$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной ко 2-му слою.

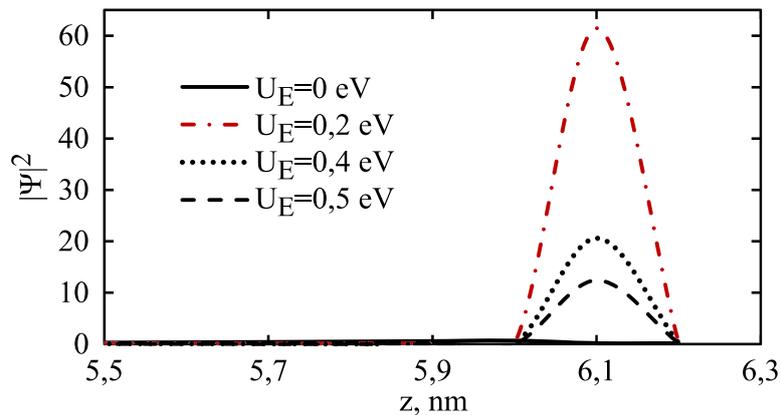


Рис. 9. Координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной к 3-му слою.

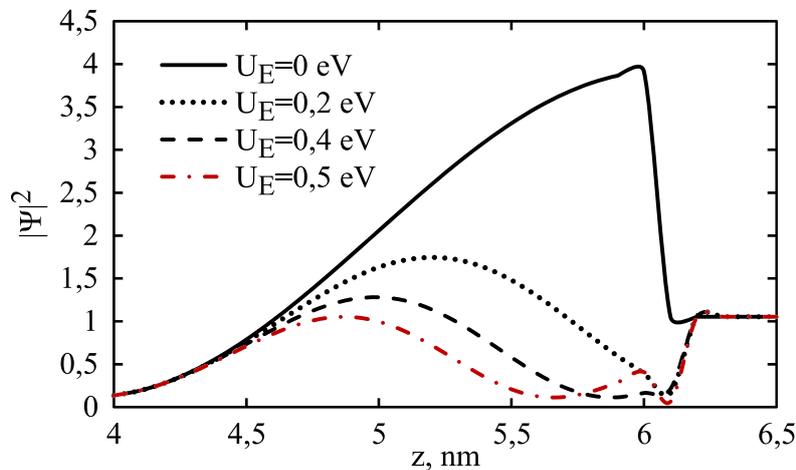


Рис. 10. Координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,8$ эВ при различных значениях энергии электрического поля (напряжения), приложенной к 3-му слою.

функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной ко 2-му слою. Как видно из рисунка, максимум при $z = 4$ нм также увеличивается с ростом энергии (напряженности) электрического поля.

На рис. 8 представлена координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,8$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной ко 2-му слою. Как видно из

рисунка, максимум при $z = \sim 4$ нм также увеличивается с ростом энергии (напряженности) электрического поля. Только если максимум при энергии $E = 0,6$ эВ равен $\sim 0,06$, то максимум при энергии $E = 0,6$ эВ составит $\sim 0,6$, то есть будет в 10 раз больше.

На рис. 9 представлена координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ при различных значениях энергии (напряженности) электрического поля, приложенной к 3-му слою. Как видно из рисунка,

энергия электрического поля (напряжение) увеличивается до 60 раз по сравнению с максимумом при $z = \sim 6,1$ нм при $U_E = 0,2$ эВ.

На рис. 10 представлена координатная зависимость квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,8$ эВ при различных значениях энергии электрического поля (напряжения), приложенной к 3-му слою. Как видно из рисунка, величина максимума при $z = \sim 6,1$ нм уменьшается с увеличением энергии (напряженности) электрического поля.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе для моделирования поведения электронов в многослойных квантовых наноструктурах использовались аналитическое решение уравнения Шредингера для электрона в каждом слое (одномерный потенциальный барьер) и граничные условия между слоями, а также была создана программа на языке Visual Basic для рассматриваемого процесса. Программа может изменять эффективную массу электрона в каждом слое, высоту и ширину потенциального барьера в нем, рассчитывать коэффициенты прохождения и отражения электронов от барьеров и вероятность нахождения в них, а также отправлять результаты в MS Excel и строить графики. Результаты расчетов показали, что амплитуда резонанса коэффициента туннелирования при значении энергии $E = 0,8$ эВ несколько уменьшается, а ширина коэффициента возврата уменьшается с увеличением потенциального барьера 0-области.

При значениях энергии электронов $E = 0,6$ эВ и $E = 0,8$ эВ наблюдается резонанс коэффициента туннелирования, а с увеличением высоты потенциального барьера 1-го слоя амплитуда резонанса при $E = 0,6$ эВ уменьшается, амплитуда резонанса при $E = 0,8$ эВ увеличивается и при этом увеличивается ширина коэффициента отражения. С увеличением ширины потенциального барьера 1-го слоя амплитуда резонанса при $E = 0,6$ эВ уменьшается, а амплитуда резонанса при $E = 0,8$ эВ увеличивается. Увеличение ширины потенциального барьера 1-го слоя существенно не влияет на коэффициент отражения. Резонанс возникает в результате интерференции проходящих и отраженных волн де Бройля на $z = 6$ нм при энергии $E = 0,8$ эВ. Также при значении энергии $E = 1,2$ эВ вероятность нахождения электрона после потенциального барьера отлична от нуля.

Программа также позволяет изучать изменение слоев под воздействием внешних воздействий, в частности, электрического поля. С увеличением энергии (напряженности)

электрического поля, приложенной ко 2-му слою, увеличивается и максимум квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ и $E = 0,8$ эВ при $z = 4$ нм. Причем если максимум при энергии $E = 0,6$ эВ равен $\sim 0,06$, то максимум при энергии $E = 0,6$ эВ составит $\sim 0,6$, то есть будет в 10 раз больше. При энергии $U_E = 0,2$ эВ электрического поля (напряжении), приложенной к 3-му слою, максимум квадрата волновой функции электронов с энергией $E = 0,6$ эВ при $z = \sim 6,1$ нм увеличивается до 60 раз. При энергии электронов $E = 0,8$ эВ величина максимума при $z = \sim 6,1$ нм уменьшается по мере увеличения энергии (напряженности) электрического поля.

Рассмотренная программа и полученные с ее помощью результаты могут быть использованы для проектирования и изготовления полупроводниковых многослойных квантовых наноструктур.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алексеев, В., Квантовые электронные компоненты. Часть 1. Молекулярная электроника и квантовые точки. *Современная электроника*, 2023, № 3, с. 38.
2. Кучменко, Т.А., Хмелевская, Т.Н., Квантовые точки: опыт и перспективы применения в аналитических системах, *Аналитика и контроль*, 2023, т. 27, № 2, с. 76.
3. Potrick, K., Schmidt, T., Bublitz, S., Mühligh, Chr., et al., Determination of the photoluminescence quantum efficiency of silicon nanocrystals by laser-induced deflection, *Appl. Phys. Lett.*, 2011, vol. 98, art. ID 083111.
4. Bian, F., Sun, L., Cai, L., Wang, Y., et al., Quantum dots from microfluidics for nanomedical application, *WIRE's Nanomed. Nanobiotechnol.*, 2019, vol. 11, no. 5, art. ID e1567.
5. Алексеев, В., Квантовый компьютер: где предел искусственного интеллекта? Часть 3. Современные квантовые вычислители, *Современная электроника*, 2022, № 9, с. 8.
6. Ландау, Л.Д., Лифшиц, Е.М., *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, т. 3. 2021, М.: Физматлит. 800 с.
7. Беляев, В., Квантовые точки: свойства, технологии, рынок, *Электроника: наука, технология, бизнес*, 2020, № 7, с. 152.
8. Вахрушев, А.В., Федотов, А.Ю., Теоретические основы моделирования процессов формирования и взаимодействия наночастиц в газовой среде, *Химическая физика и мезоскопия*, 2020, т. 22, № 1, с. 70.

9. Насиров, М., Юлдашева, Н., Матбобоева, С., Кучкарова, М., Численное решение уравнения Шредингера для произвольного потенциала, *Научный импульс*, 2022, № 4 (100), с. 703.
10. Nosirov, M., Matbabayeva, S. and Janibekova, S., Simulation of electron movement in quantum nanostructures, *Science and Innovation*, 2023, vol. 2, no. 12, p. 296.
<https://doi.org/10.5281/zenodo.10433260>

Summary

The article uses an analytical solution to the Schrödinger equation for an electron in each layer and the 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, to calculate the coefficients of transmission and the return of electrons through barriers and the probability of being in them, and also to 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, the width of the barriers and the electric field was studied.

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