УДК 621.373.826

А. Г. ПАЩЕНКО, канд. физ.-мат. наук

ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦ И КВАЗИЧАСТИЦ ПРИ КВАНТОВОМ ОГРАНИЧЕНИИ

Широкое использование квантово-размерных приборов в оптоэлектронике и СВЧ микроэлектронике требует непрерывного усовершенствования параметров квантово-размерных структур (КРС), которое может быть достигнуто путём детального изучения таких процессов, как люминесценция, усиление и генерация оптического излучения, резонансного и нерезонансного туннелирования, оптического и электроотражения и т. д.

Исследование квантово-размерных структур начинается с определения энергетических состояний частиц – электронов и дырок, или квазичастиц – экситонов и фононов в квантово-размерных структурах

С точки зрения квантовой теории полупроводников энергетическое состояние частицы считается однозначно определённым, если известны собственные значения и собственные функции оператора Гамильтона, описывающего состояние частиц в рассматриваемой структуре. Как известно, энергетические состояния частиц определяют с помощью стационарного уравнения Шредингера [1, 2, 3]:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi , \tag{1}$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона; Ψ – собственная функция оператора Гамильтона (волновая функция частицы); E – собственное значение оператора Гамильтона (энергия частицы).

В зависимости от характера исследуемых процессов в квантово-размерной структуре, вид оператора Гамильтона будет изменяться и помимо составляющей, описывающей движение частицы вдоль выбранной координаты (в рассматриваемом координатном пространстве) будет содержать составляющие, описывающее тот или другой вид взаимодействия частиц и квазичастиц между собой или с внешними полями, полем объёмных зарядов и т. д. Таким образом $\hat{H}$ в выражении (1) можно переписать в виде [2]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 , \tag{2}$$

где $\hat{H}_0$ – оператор Гамильтона частицы (квазичастицы) без учета внешних воздействий; $\hat{H}_1$ – оператор возмущения, учитывающий взаимодействия частицы (квазичастицы), с внешними электрическими или магнитными полями.

Таким образом, задачи определения собственных функций и собственных значений энергии частиц можно условно разделить на два класса задач.

Первый класс задач связан с определением собственных функций и собственных значений энергии частиц (квазичастиц) в квантовых ямах при отсутствии внешних воздействий, т. е. когда $\hat{H}_1 = 0$:

– в квантовых ямах "бесконечной" глубины $U_0 \to \infty$ (рис. 1, а);

– в ямах конечной глубины $U_1 = U_2 = U_0 = const$ или $U_1 \neq U_2$ (рис. 1, б);

– в двух квантовых ямах разделённых барьером конечной высоты и ограниченных потенциальными барьерами конечной высоты и "бесконечной" ширины (рис. 1, в). При этом, в общем случае, высоты ограничивающих барьеров и разделительного барьера не совпадают по высоте, а квантовые ямы не являются равноширокими;

– в яме, ограниченной потенциальными барьерами конечной высоты и ширины (рис. 1, г);

– в многослойной структуре состоящей из ям и барьеров конечной высоты и ширины (рис. 1, д).

В том случае, когда не учитываются воздействие внешних электрических и магнитных полей, а также поля объёмного заряда и поля кулоновского взаимодействия между частицами, в структурах с одномерным ограничением выражение (1) может быть записано в виде [2, 3, 4]:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + k^2\Psi = 0 , \tag{3}$$

где Ψ – волновая функция частицы (квазичастицы); z – текущая координата в области квантового ограничения.

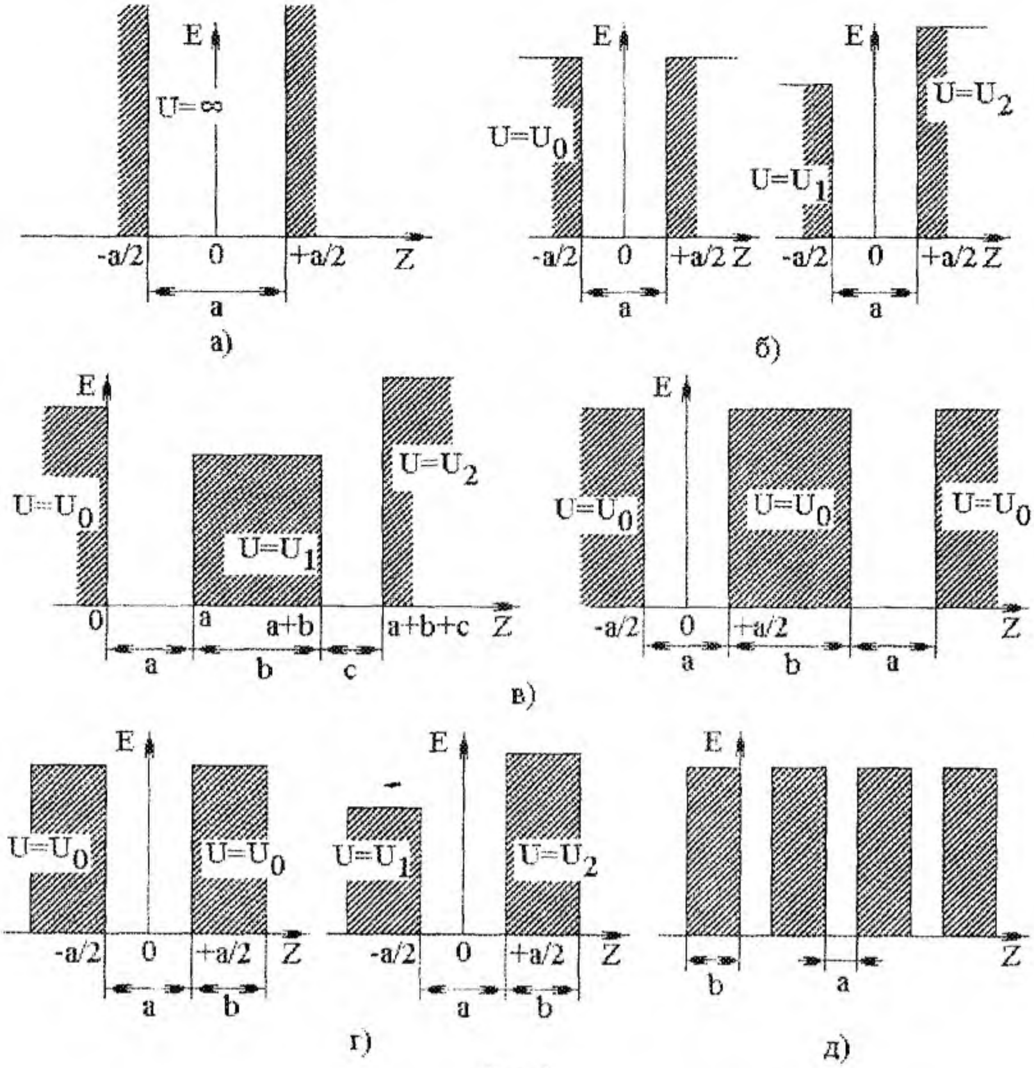

Рис. 1

Для случая, приведенного на рис. 1, а,

$$k^2 = \frac{2 \cdot m^* \cdot E}{\hbar^2}, \tag{4}$$

где m^* – эффективная масса частицы (квазичастицы); $\hbar$ – постоянная Дирака; E – собственное значение энергии частицы (квазичастицы).

Для случая приведенного на рис. 1, б, волновая функция определяется как в яме, так и в барьере вследствие конечной проницаемости реальных потенциальных барьеров, которые находятся в квантово-размерных приборах. Поэтому для частиц, находящихся в яме, выражение (4) останется без изменений:

$$k_1^2 = \frac{2 \cdot m_1^* \cdot E}{\hbar^2}, \tag{4 а}$$

где “1” – индекс, обозначающий принадлежность к яме (см. рис. 1, б); m_1^* – эффективная масса частицы (квазичастицы) в области ямы;
а для области барьера

$$k_2^2 = \frac{2 \cdot m_2^* \cdot (U - E)}{\hbar^2}, \tag{4 б}$$

где “2” – индекс, обозначающий принадлежность к области барьера (рис. 1, б); m_2^* – эффективная масса частицы (квазичастицы) в области барьера; U – высота потенциального барьера.

Для случая, приведенного на рис. 1, в, волновая функция определяется аналогично случаю, приведенному на рис. 1, б, с учётом проницаемости разделительного барьера. Для этих случаев задача на этапе постановки может обладать различной степенью симметрии. При равновысоких барьерах для случаев, приведенных на рис. 1, б и 1, в, а также при ямах одинаковой ширины для случая, проиллюстрированного на рис. 1, в, задача может быть решена с помощью применения стандартных методов и подходов, многократно обсуждавшихся в литературе [1-4].

В том случае, когда барьеры не равновысокие, а ямы не одинаковой ширины – задача полностью несимметрична, поэтому для отыскания волновых функций и собственных значений энергии стационарное уравнение Шредингера должно быть записано для каждой из областей ям и барьеров с учётом граничных условий на каждой границе раздела яма-барьер.

Для случая, представленного на рис. 1, г, квантово-размерный эффект соблюдается только для частиц, находящихся в яме, и частиц, проникающих в потенциальные барьеры. В областях, находящихся слева и справа от ограничивающих потенциальных барьеров, квантово-размерный эффект не соблюдается, поскольку они принадлежат к "объёмным" областям полупроводника. Как и в случае, представленном на рис. 1, в, задача может быть как симметричной, так и несимметричной.

Для многослойной квантово-размерной структуры, показанной на рис. 1, д, в случае соблюдения периодичности слоёв для определения волновых функций частиц возможно применение метода Кронига-Пени, и других классических методов. В случае несоблюдения периодичности структуры наиболее продуктивным оказывается матричный подход.

Второй класс задач связан с учётом влияния на квантово-размерную структуру внешних электрических или магнитных полей, а также поля объёмного заряда и кулоновского взаимодействия различно заряженных частиц (экситонов) [4 - 9].

При наличии внешнего воздействия (электрического или магнитного поля) $\hat{H}_1 \neq 0$.

Если материалы, образующие квантово-размерную структуру, сильно легированы, возникает необходимость учёта влияния поля пространственного заряда как на электрические, так и на оптические свойства прибора, поэтому

$$\hat{H}_1 = V(z), \tag{5}$$

где $V(z)$ – потенциал, создаваемый полем объёмного заряда в области квантового ограничения, который определяется путем решения уравнения Пуассона [7, 8]:

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = \frac{e \cdot \rho(z)}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r}, \tag{6}$$

где e – заряд электрона; $\rho(z)$ – плотность заряда; ε_0 – универсальная диэлектрическая постоянная; ε_r – диэлектрическая проницаемость материала квантово ограниченного слоя.

Список литературы: **1.** *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика нерелятивистская теория. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1963. 704 с. **2.** *Андо Т. и др.* Электронные свойства двумерных систем. Пер с англ. М.: Мир, 1985. 416 с. **3.** *Бузанёва Е. В.* Микроструктуры интегральной электроники. М.: Радио и связь,1990. 304 с. **4.** *Физика полупроводниковых лазеров.* / Под ред. Х. Такумы. М.: Мир, 1989. 310 с. **5.** *E. Herbert Li.* Optical Properties of an InGaAs-InP Interdiffused Quantum Wells // IEEE J. Quantum Electronics. 1997. Vol. 34. N 6. P. 982-990. **6.** *Emmanuel Anemogiannis, Elias N. Glytsis, Thomas V. Gaylord.* Quasi - Bound States Determination Using a Perturbed Wavenumbers Method in a Large Quantum Box // IEEE J. Quantum Electronics. 1998. Vol. 34. N 5. P. 742-752 **7.** *Fanyao Qu, P. C. Morais.* The 2-D – 3-D Crossover in Modulation Doped GaAs-Al_xGa_{1-x}As Quantum Wells // IEEE J. Quantum Electronics. 1997. Vol. 33. N 9. P. 1492-1497. **8.** *Fanyao Qu, P. C. Morais* Investigation of the Magnetic Field Dependence of Electronic and Optical Properties in One-Side Modulation Doped GaAs-Al_xGa_{1-x}As Quantum Wells // IEEE J. Quantum Electronics. 1998. Vol. 34. N 8. P. 1419-1425. **9.** *Absorption coefficients and exciton oscillator strengths in GaAs/AlGaAs superlattices* /W. T. Masselink, P. J. Pearah, J. Klem, C. K. Peng, H. Markoc, G. D. Sanders, Yia-Chung Chang //Phys. Rev. B. Vol. 32. N 12. P. 8027 – 8034.

Харьковский государственный технический университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 5.07.2000