

*А. Г. ПАЩЕНКО, канд. физ.-мат. наук, В. М. ВАНЦАН, канд. физ.-мат. наук*

## ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЧАСТИЦ В ДВУХСЛОЙНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ НА ОСНОВЕ GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

**Введение.** В работе [1] на основании решения стационарного уравнения Шредингера для двухслойной наноструктуры на основе GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As получены соотношения, полностью описывающие энергетические состояния и собственные функции частиц и квазичастиц, находящихся в такой структуре. В постановке задачи изначально предполагалось, что барьерные слои структуры как ограничивающие, так и разделительный, созданные на основе Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, имеют одинаковый химический состав, то есть одинаковую молярную долю алюминия – X. Кроме того, ширина квантово-ограниченных слоев двухслойной структуры, созданных на основе GaAs, также предполагается одинаковой, а следовательно структура является симметричной относительно центра разделительного барьера. В данной работе по соотношениям (6) – (17), приведенным в работе [1], проведен численный эксперимент с использованием математического пакета Mathcad 2000 pro для исследования влияния геометрических и энергетических параметров наноструктуры на энергетические состояния и плотность распределения вероятностей состояний частиц и квазичастиц в пространстве квантового ограничения.

**Исходные данные и результаты численного эксперимента.** Материальные параметры арсенида галлия и алюминий-галлий арсенида, используемые в расчетах выбраны согласно данным, приведенным в [2,3]. Используя избранную методику и исходные данные, расчёты проводились во всем диапазоне изменения молярной доли алюминия. Ширина квантово-ограниченного слоя – Lz изменялась в пределах от постоянной кристаллической решетки GaAs до длины волны де-Бройля электронов в данном материале. Ширина разделительного барьерного слоя (барьера) Lb изменялась от постоянной кристаллической решетки до половины ширины квантово-ограниченного слоя – квантовой ямы (в пропорции). Результаты расчётов собственных значений энергии электронов при ширине квантово-ограниченного слоя – Lz=20 Å, разделительного барьерного слоя – Lb=6 Å, молярной доле алюминия в твердом растворе замещения материала барьера x=0,75, которая определяет высоту потенциального барьера для электронов в зоне проводимости, как Ve=0,832 эВ, и высоту потенциального барьера для тяжелых и легких дырок в валентной зоне – Vh=0,448 эВ, показаны на рис. 1. На этом же рисунке для сравнения показаны собственные значения энергии электронов для одиночного квантово-ограниченного слоя. Толстыми пунктирными и штрих – пунктирными линиями показаны решения для двухслойной квантово-размерной структуры, тонкими – для однослойной. На рис. 2 показаны собственные функции электронов в двухслойной наноструктуре (рис. 2 а) и плотности распределения вероятности в пространстве квантового ограничения (рис. 2 б), рассчитанные для стационарного состояния, то есть в отсутствие внешнего электрического и магнитного полей. Из анализа рис. 2 следует, что потоки вероятности распределения частиц, проходя через барьер, могут испытывать отражение от границ раздела «барьер-яма» и «яма-барьер» как в фазе, так и в противофазе, меняя свой знак (свою четность относительно середины разделительного барьера). Подобное поведение волновых функций частиц обуславливает вырождение собственных значений энергии частиц (удвоение энергетического уровня), что и отражено на рис. 1. По результатам расчётов с другими энергетическими и геометрическими параметрами можно утверждать, что с увеличением ширины квантово-ограниченных и барьерных слоёв собственные значения энергии для удвоенных уровней сближаются, и по мере увеличения ширины квантово-ограниченных и барьерных слоев могут сливаться в одну линию.

Кроме описанных расчётов в данной работе по ранее изложенной методике [4, 5] было исследовано воздействие стационарного (постоянного во времени) электрического поля на энергетические состояния и собственные функции частиц и квазичастиц.

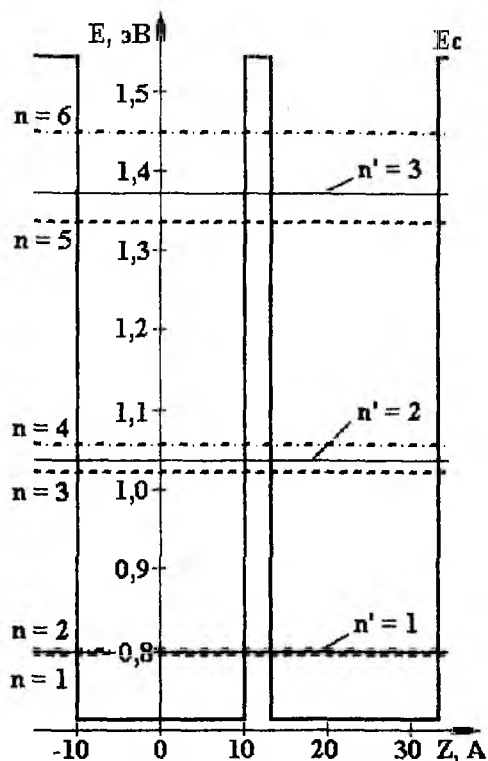


Рис. 1

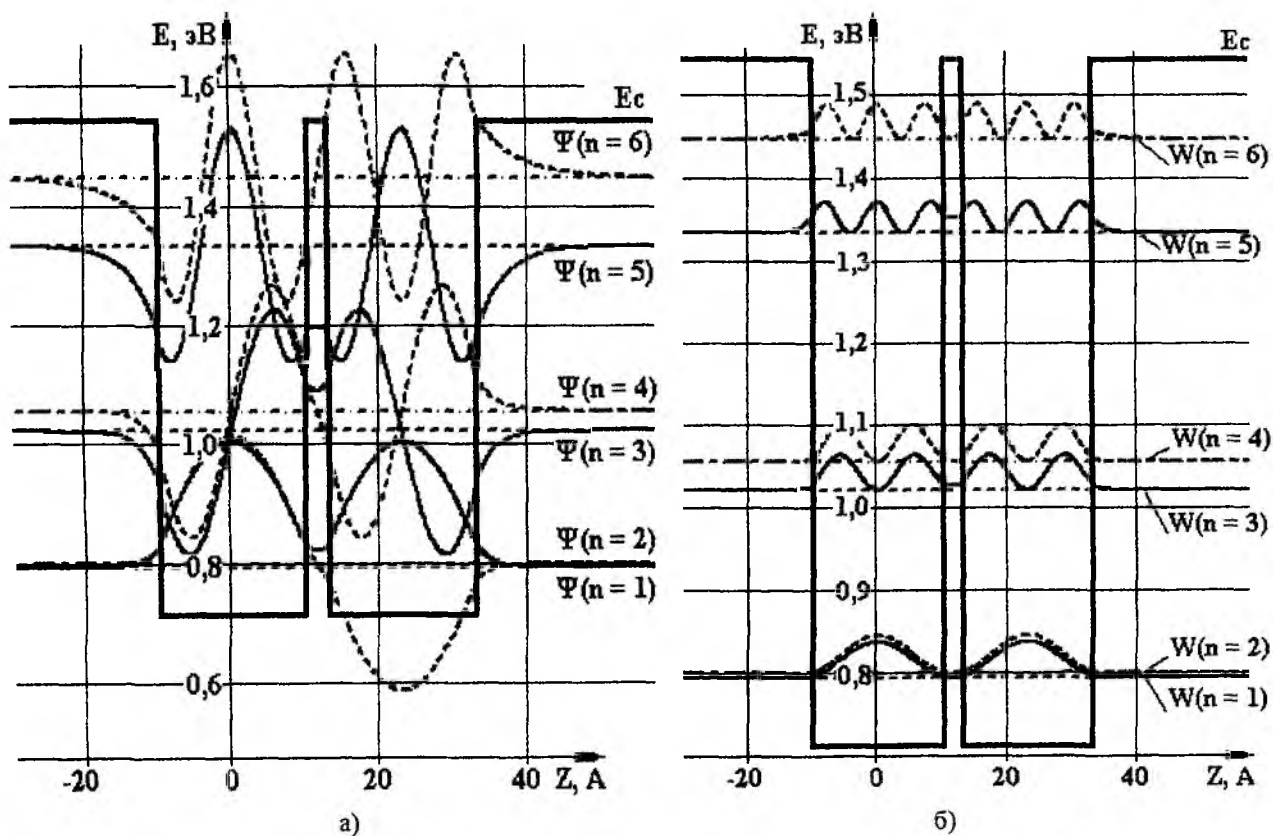


Рис. 2

Результаты исследований влияния постоянного электрического поля на собственные значения энергии, волновые функции частиц и плотности вероятности их распределения показаны соответственно на рис. 3, 4 и 5.

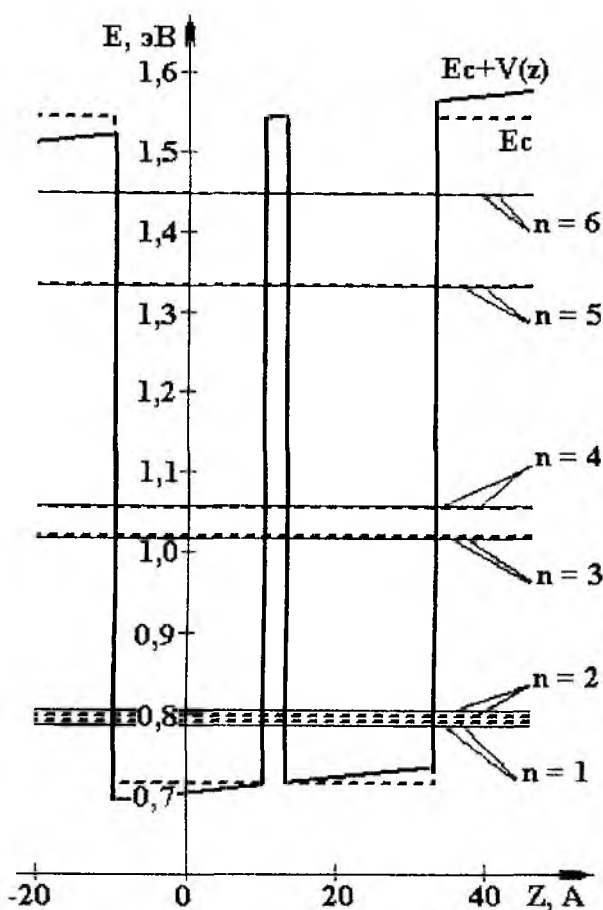


Рис. 3

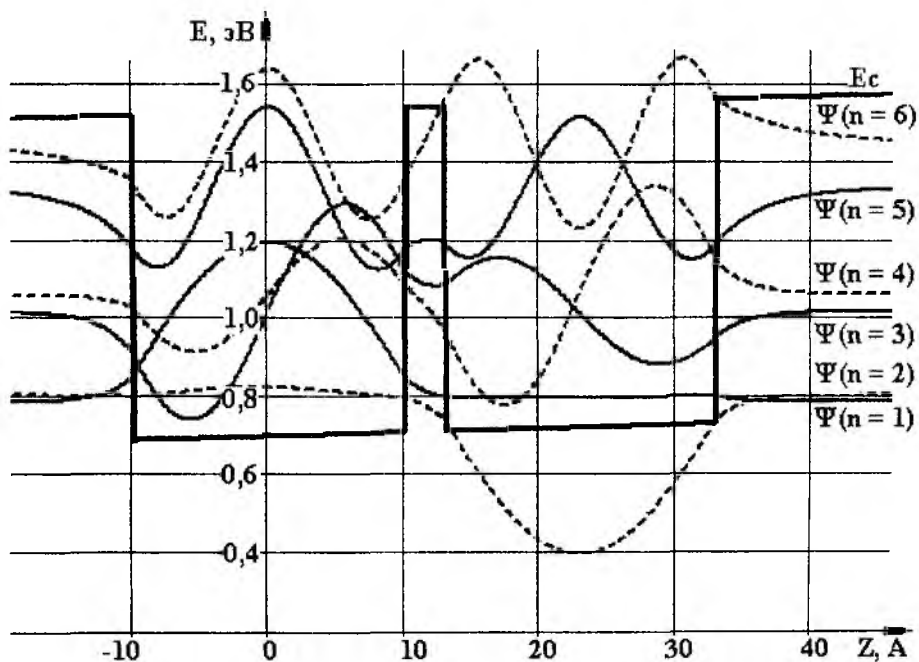


Рис. 4

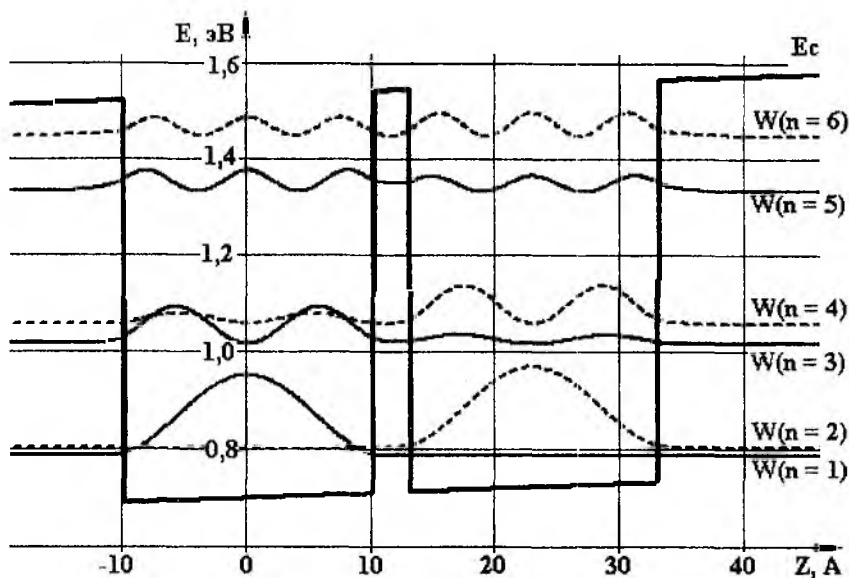


Рис. 5

Из анализа результатов расчёта следует:

1. Воздействие внешнего электрического поля приводит к дополнительному расширению положения энергетических уровней, удвоенных самой структурой (эффект Штарка).

2. Электрическое поле деформирует энергетический профиль структуры, что в свою очередь, при определённом значении напряженности, приводит к делокализации волновых функций частиц и плотностей распределения вероятности по всей структуре.

**Вывод.** Использование двухслойных симметричных квантово-размерных структур (наноструктур) дает возможность спектрально выделить энергетические состояния частиц и квазичастиц, находящихся в соседних квантово-ограниченных слоях. Воздействием внешнего постоянного во времени электрического поля можно делокализовать плотности вероятности распределения частиц и квазичастиц по отдельным слоям и удерживать такое состояние. Это в свою очередь дает возможность реализовать устойчивое логическое состояние, обусловленное усредненным электрическим зарядом частиц, находящихся в том или ином энергетическом состоянии в условно «первом» или «втором» квантово-ограниченном слоях. Подбором параметров внешнего электрического поля (величины и направления вектора напряженности, четности воздействия относительно потенциала квантового ограничения) логическое состояние можно изменять на противоположное, причем, согласно квантово-механическим представлениям данный квантовый переход будет происходить без промежуточных электронных состояний.

**Список литературы:** 1. Пащенко А.Г. Энергетические состояния частиц в многослойных периодических наноструктурах // Радиотехника: Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 2004. Вып. 136. С. 127 – 132. 2. Emmanuel Anemogiannis, Elias N. Glytsis, Tomas 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. 3. J.M. Luttinger, W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // Phys. Rev. Ser. B. 1955. Vol. 97, No 4, P. 869 – 883. 4. Пащенко А.Г. Влияние внешнего стационарного электрического поля на энергетические состояния частиц и квазичастиц в квантоворазмерной структуре. Ч. 1. Постановка задачи // Радиотехника Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 2001. Вып. 117. С. 117 – 120. 5. Пащенко А.Г. Влияние внешнего стационарного электрического поля на энергетические состояния частиц и квазичастиц в квантоворазмерной структуре. Ч. 2. Обсуждение результатов // Радиотехника Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 2001. Вып. 118. С. 55 – 60.