УДК 621.373.826

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

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО СТАЦИОНАРНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦ И КВАЗИЧАСТИЦ В КВАНТОВОРАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЕ. Часть 2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для определения влияния внешнего стационарного электрического поля на энергетические состояния электронов, тяжёлых и лёгких дырок в квантово-размерной структуре необходимо, прежде всего, найти собственные значения энергии и собственные функции этих частиц в стационарном состоянии, т.е. в отсутствие внешнего электрического поля.

Собственные значения энергии и собственные функции частиц, которые находятся в квантово-ограниченном слое, получены в результате решения уравнения Шредингера для областей ямы и барьера, показанных на рис. 1, приведены в работе [1].

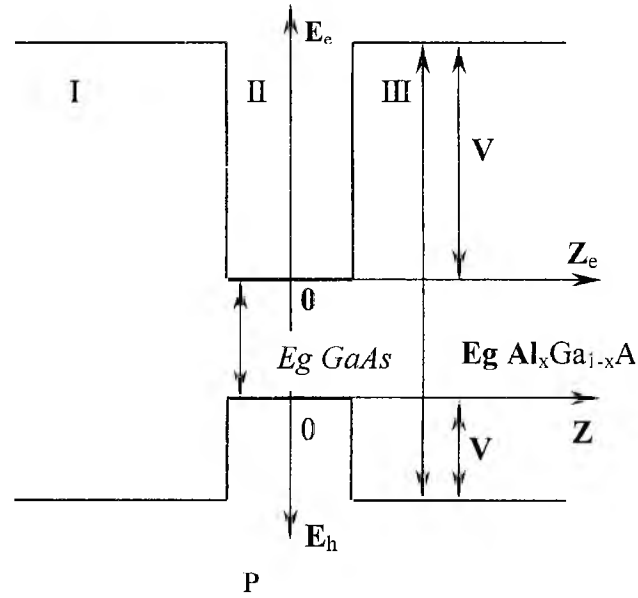

Рис. 1

После несложных преобразований собственные функции могут быть представлены в виде:

чётные решения

$$\Psi^{+}(Z)=\begin{cases} A^{+}\cos(k_2\cdot Z), & -a\le Z\le a,\\ A^{+}\cos(k_2\cdot a)\cdot e^{k_1\cdot(a-Z)}, & a\le Z,\\ A^{+}\cos(k_2\cdot a)\cdot e^{-k_1\cdot(a-Z)}, & Z\le -a;\ n=1,3,5,\ \dots, \end{cases} \tag{1}$$

нечётные решения

$$\Psi^{-}(Z)=\begin{cases} A^{-}\sin(k_2\cdot Z), & -a\le Z\le a,\\ A^{-}\sin(k_2\cdot a)\cdot e^{k_1\cdot(a-Z)}, & a\le Z,\\ A^{-}\sin(k_2\cdot a)\cdot e^{-k_1\cdot(a-Z)}, & Z\le -a;\ n=2,4,6,\ \dots, \end{cases} \tag{2}$$

где Z – текущая координата в области решения; a – полуширина квантово-ограниченного слоя (квантовой ямы); A^{+} A^{-} – коэффициенты, определяемые из условия нормировки волновой функции на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(Z)|^2\,dz=1, \tag{3}$$

$$\frac{1}{\left(A^{\pm}\right)^2}=a+\frac{1}{k_1}, \tag{4}$$

величины k_1 и k_2 рассчитываются по формулам [1]:

$$k_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_1^{*}(V_0-E)}, \tag{5}$$

$$k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_2^* E}\,. \qquad (6)$$

Зависимости волновых функций Ψ^+ и Ψ^-, а также функций распределения вероятности $w(Z) = \left|\Psi^{\pm}\right|^2$ для электрона, представлены на рис. 2 а и 2 б.

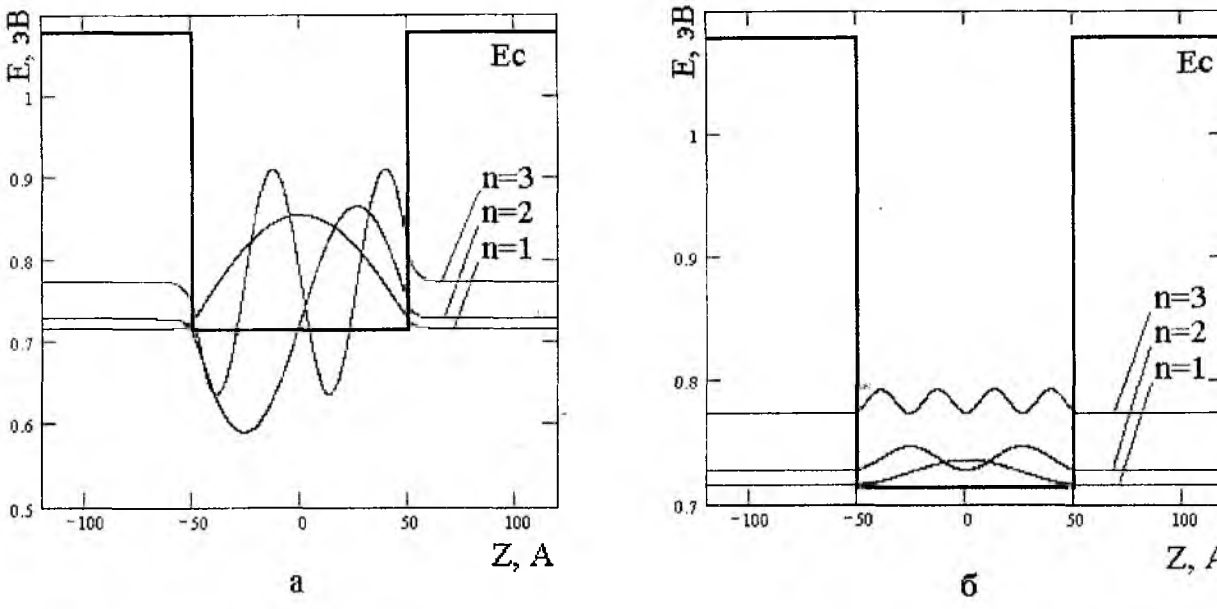

Рис. 2

Представленные функции во всех случаях симметричны относительно центра ямы ($Z = 0$). Это следует ожидать, так как барьеры, ограничивающие яму, равновысокие и создаваемое ими поле Ve симметрично относительно центра ямы. Эффективные массы частиц как в яме, так и в барьере рассчитывались на основании соотношений и данных, приведенных в работах [2, 3]. Расчёт проводился для молярной доли алюминия в материале барьера x = 0,45, исходя из этого, соответствующим образом выбиралась ширина запрещённой зоны ограничивающего материала и эффективные массы частиц в нём. Ширина квантово-ограниченного слоя для данного случая выбрана равной 100 А, при таком размере структуры квантовые эффекты выражены достаточно чётко. Количество энергетических состояний электронов в квантовой яме, ограниченной барьерами высотой Ve=0,365 эВ, достигает девяти, и будет изменяться в зависимости от высоты барьера и ширины квантовой ямы. На рис. 2 а и 2 б, приведены волновые функции и функции распределения вероятности только для трёх первых значений n, т.е. из множества функций (1) учтены только два состояния n=1,3, а из множества функций (2) – только одно значение n=2. Расчёты могут быть выполнены для всех значений n как чётных, так и нечётных решений, помещающихся в яме, однако для практически важных случаев интерес представляют первые два – три уровня как для электронов, так и для дырок. На рис. 3 а, б и рис. 4 а, б, представлены $\Psi^{\pm}$ и $w(Z)$ для лёгких и тяжёлых дырок.

В отсутствие внешнего стационарного электрического поля свойства волновых функций тяжёлых и лёгких дырок аналогичны свойствам волновых функций электронов.

Рассмотрим случай, когда к квантово-размерной структуре приложено внешнее стационарное электрическое поле, направленное перпендикулярно плоскости квантового ограничения (вдоль оси z рис. 1). Приложенное поле можно рассматривать как возмущение, оператор которого имеет вид [1]:

$$\hat{V}' = -e\,\vec{E}\,\vec{z}\,, \qquad (7)$$

где e – заряд электрона; $\vec{E}$ – напряженность приложенного электрического поля; $\vec{z}$ – текущая координата.

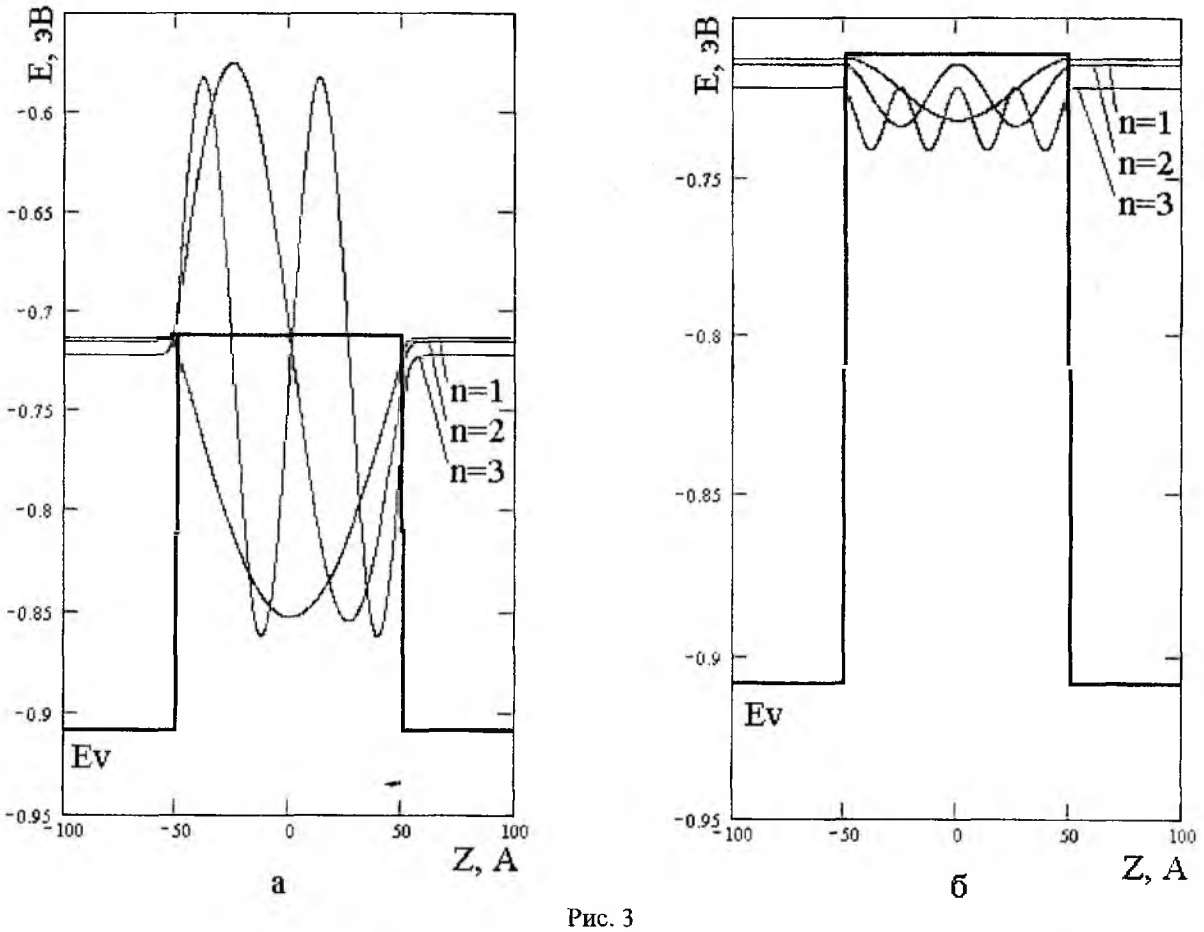

Рис. 3

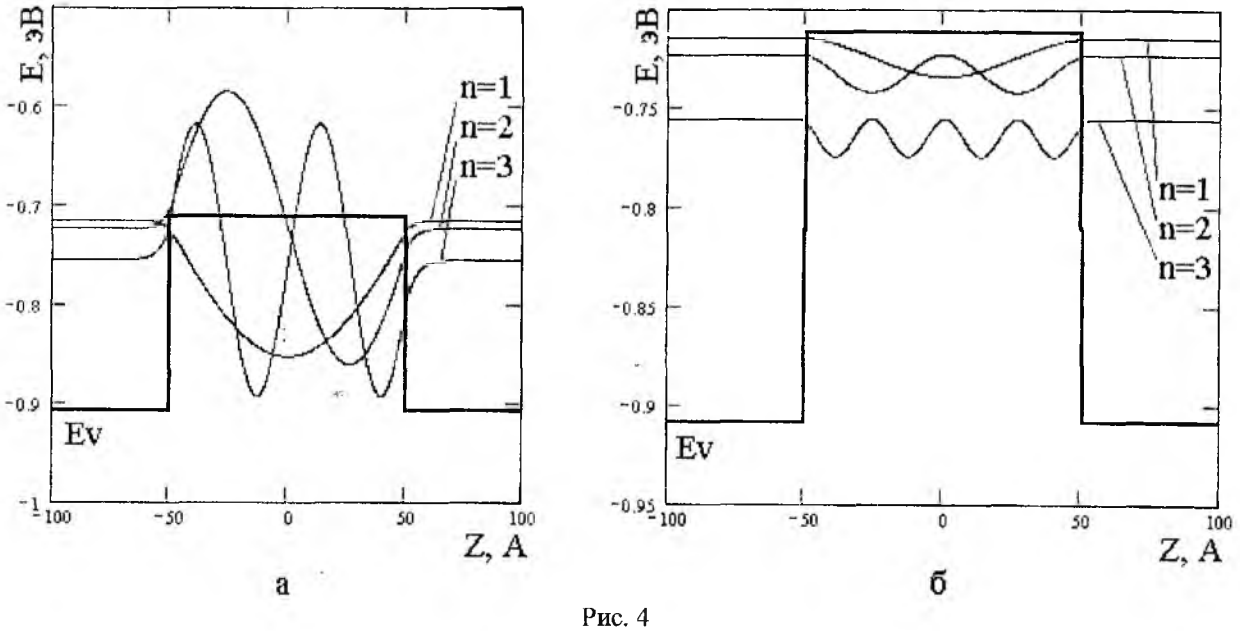

Рис. 4

При наличии внешнего возмущения уравнение Шредингера для частиц и квазичастиц, находящихся в квантово-размерной структуре записывается так:

$$\left(\hat{H}^0 - e\vec{E}\vec{z}\right)\Psi = E\Psi\,. \tag{8}$$

Для нахождения собственных функций и собственных значений энергии электронов, тяжёлых и лёгких дырок в работе [1] было предложено применить теорию возмущений, широко используемую в квантовой механике [4, 5, 6].

Для определения собственных значений энергии и волновых функций частиц в рассматриваемой квантово-размерной структуре (рис. 1) используем первое приближение теории возмущений. В этом случае:

$$E_n = E_n^0 + \lambda \cdot E_n^1 = E_n^0 + V_{nn}, \tag{9}$$

где

$$V_{nn} = \int \Psi_n^{0*} \cdot \hat{V}' \cdot \Psi_n^0 \, dz. \tag{10}$$

Подставляя в выражение (10) значения волновых функций Ψ_n^0 из (1) или (2) и интегрируя по всему пространству определения волновых функций Ψ_n^0, получим, что $V_{nn} = 0$, т.е. поправка первого приближения теории возмущений равна нулю, следовательно, $E_n = E_n^0$.

Определим волновые функции электронов, лёгких и тяжёлых дырок с учётом первого приближения теории возмущений. В этом случае:

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi_n^{(1)}, \tag{11}$$

где

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{\substack{m \\ m \neq n}} \left(\frac{V_{mn}}{E_m^0 - E_n^0} \Psi_m^0 \right). \tag{12}$$

Подставляя в выражения (11) и (12) значения волновых функций Ψ_n^0 из (1) или (2) и значения E_n^0, которые для рассматриваемой задачи определены в работах [1, 2], получим зависимости волновых функций и функций распределения вероятностей для электронов – рис. 5 а, б, для тяжёлых дырок – рис 6, а, б, для лёгких дырок – рис. 7, а, б. Здесь, как и в случае отсутствия возмущения учтены первые три состояния частиц (n = 1, 2, 3).

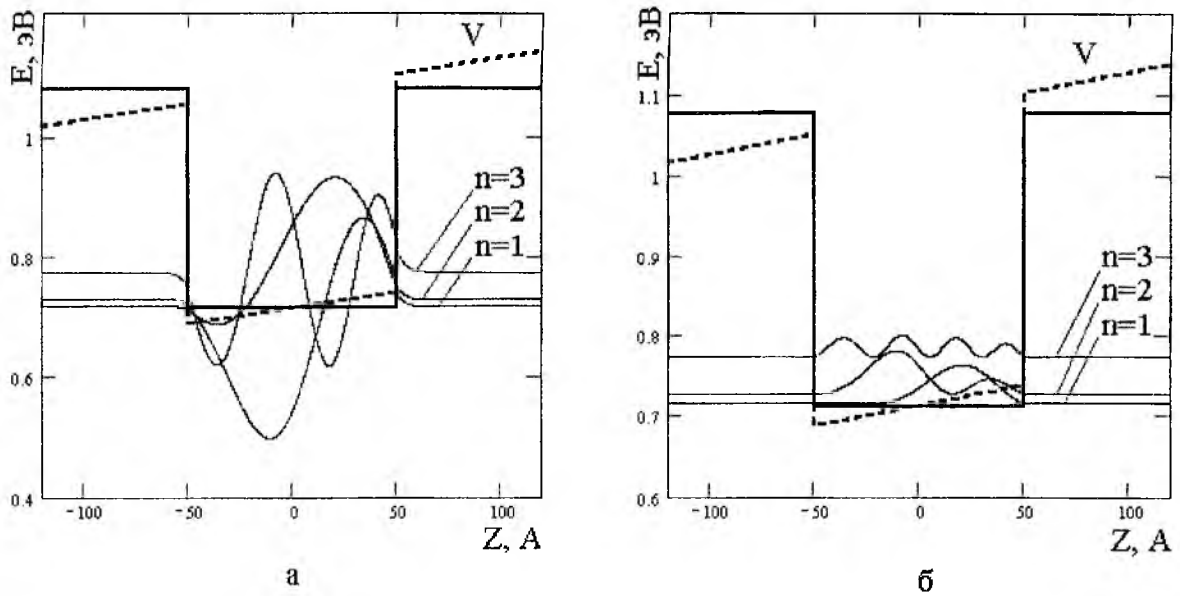

Рис. 5

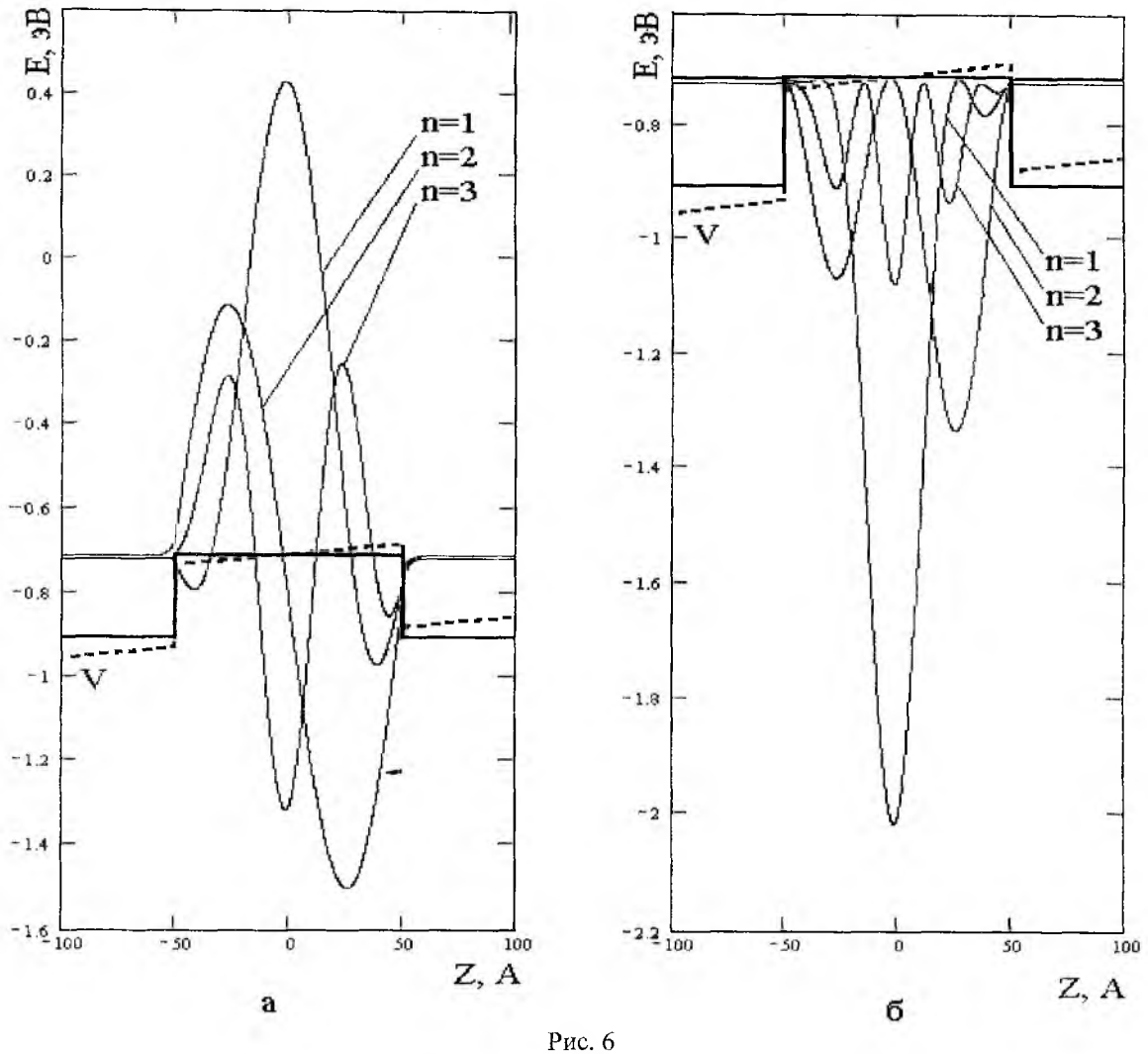

Рис. 6

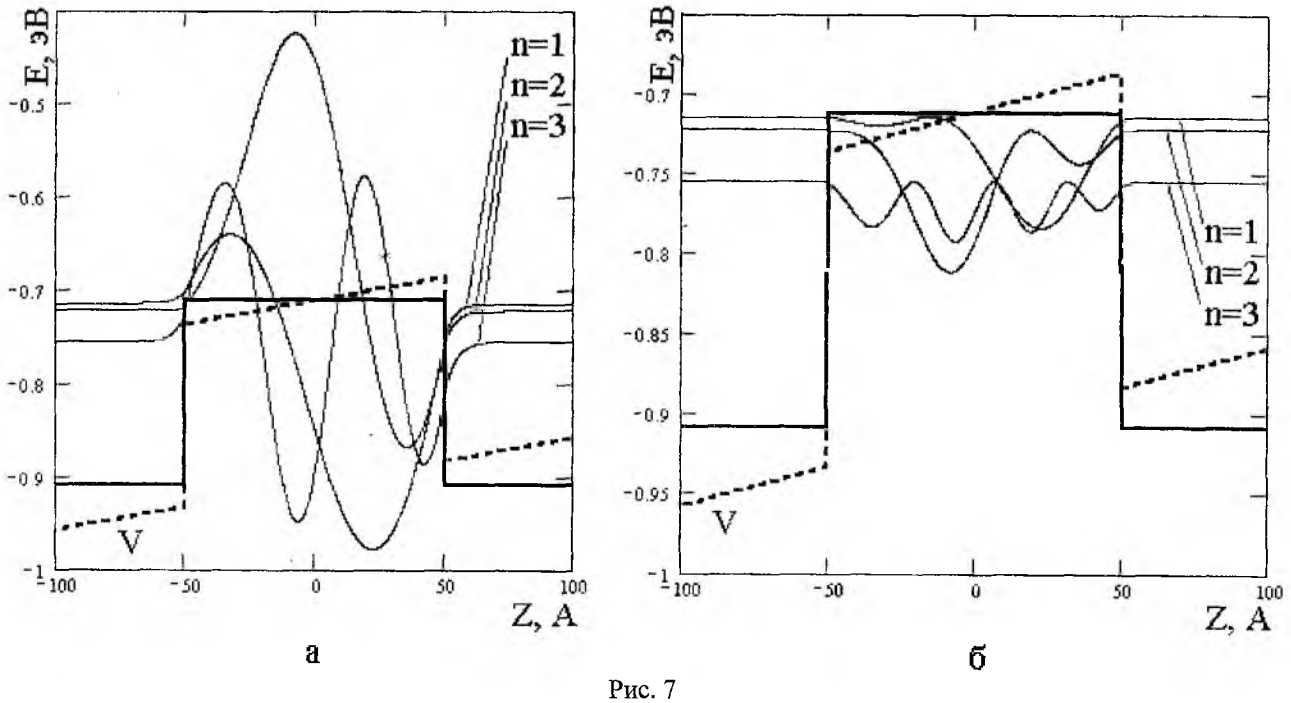

Рис. 7

Анализируя полученные результаты можно сделать вывод о том, что наличие внешнего возмущения – стационарного электрического поля приводит к изменению чётности волновых функций для

электронов и дырок. Также наблюдается смещение максимумов волновых функций и функций распределения вероятностей для каждой из рассматриваемых частиц и квазичастиц. Для электронов волновые функции и функции распределения вероятностей смещаются в направлении, противоположном направлению приложенного внешнего поля. Для тяжёлых и лёгких дырок смещение происходит в направлении поля.

Список литературы: 1. *Пащенко А.Г.* Влияние внешнего стационарного электрического поля на энергетические состояния частиц и квазичастиц в квантоворазмерной структуре. Часть 1. Постановка задачи // Радиотехника: Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 2001. Вып. 117. С. 117 — 120. 2. *Пащенко А.Г., Ванцан В.М.* Исследование стационарных энергетических состояний экситонов Ванье-Мотта в полупроводниковых инжекционных лазерах на основе квантоворазмерных структур // Радиотехника: Всеукр. межвед. науч.-техн. сб. 1997. Вып. 102. С. 85 — 92. 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. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория) Изд. 2-е М.: Физматгиз, 1963. 704 с. 5. *Борисоглебский Л. А.* Квантовая механика: Учеб. пособие для физ. спец. вузов. 2-е изд., перераб. и доп. Минск: Университетское, 1988. 623 с. 6. *Киттель Ч.* Квантовая теория твёрдых тел. М.: Наука, 1967. 491 с.

Харьковский государственный технический университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 15.03.2001