

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Д.А. Усанов, Ал.В. Скрипаль,
Ан.В. Скрипаль, А.В. Абрамов

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРО И НАНОСТРУКТУР

Учебное пособие

для студентов факультета нано- и биомедицинских технологий

УДК 621.372.542
У74

Усанов Д.А., Скрипаль Ал.В., Скрипаль Ан.В., Абрамов А.В.
У74 Компьютерное моделирование микро и наноструктур: Учеб.
пособие для студентов факультета нано- и биомедицинских
технологий – Саратов, 2008. –100 с.: ил. Электронное издание.

Приведены некоторые задачи из физики твердого тела, физики полупроводников, физики квантоворазмерных структур. Для каждой задачи студентам предлагается краткое теоретическое описание физической проблемы и её математической модели, базирующееся на имеющихся у студентах знаниях в соответствующих областях, формулируется задача для моделирования, включающая реализацию математической модели в математическом пакете, а также предлагается с помощью данной реализации проиллюстрировать те или иные известные студенту факты, касающиеся рассматриваемой проблемы. Приведены примеры программ в системе *MathCAD*.

Для студентов университета, обучающихся по направлениям 210601– «Нанотехнология в электронике», 550700 – «Электроника и микроэлектроника», специальностям 010410 – «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы», 200100 – «Микроэлектроника и твердотельная электроника», 071000 – «Материаловедение и технология новых материалов», а также научных сотрудников, аспирантов, инженеров, интересующихся проблемами использования современных программных средств для проведения компьютерного моделирования физических процессов и технических устройств.

Рекомендуют к печати:

Кафедра физики твердого тела
Саратовского государственного университета
Доктор физико-математических наук *В.Б. Байбурин*

УДК 621.372.542
ББК 22.379

ISBN 5-292-02653-0

© Усанов Д.А., Скрипаль Ал.В.,
Скрипаль Ан. В., Абрамов А.В.,
2008

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
1. КРАТКИЕ СВЕДЕНИЯ О КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ	9
1.1. Гетероструктуры и их классификация.....	9
1.2. Квантоворазмерные гетероструктуры на основе твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$	12
2. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ И КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ	18
2.1. Моделирование энергетического спектра электрона в твердом теле (модель Кронига-Пенни).....	20
2.2. Моделирование энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме.....	25
2.2.1. С бесконечно высокими стенками	25
2.2.2. Со стенками конечной высоты	27
2.3. Моделирование движения электрона вблизи потенциальной ступеньки.....	31
2.4. Моделирование движения электрона в слоистых квантоворазмерных структурах	37
2.4.1. Моделирование движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины.....	38
2.4.2. Метод матриц переноса и его применение для моделирования движения электрона в сложном потенциальном рельефе	43
2.4.3. Моделирование движения электрона через двухбарьерную квантоворазмерную структуру (ДБКС).....	47

4	Компьютерное моделирование микро и наноструктур	
	2.4.4. Моделирование движения электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру	51
	2.4.5. Моделирование движения электрона при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв	52
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	57
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	58
	ПРИЛОЖЕНИЯ.....	60
	<i>Приложение 1.</i> Программа для моделирования энергетического спектра электрона в твердом теле.....	60
	<i>Приложение 2.</i> Программа для моделирования энергетического спектра электрона энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме с бесконечно высокими стенками	63
	<i>Приложение 3.</i> Программа для моделирования энергетического спектра электрона энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме со стенками конечной высоты	65
	<i>Приложение 4.</i> Программа для моделирования движения электрона вблизи потенциальной ступеньки.....	68
	<i>Приложение 5.</i> Программа для моделирования движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины	70
	<i>Приложение 6.</i> Программа, реализующая метод матриц переноса при моделировании энергетического спектра электрона в слоистых квантоворазмерных структурах.....	74
	<i>Приложение 7.</i> Программа для моделирования движения электрона через двухбарьерную квантоворазмерную структуру.....	79
	<i>Приложение 8.</i> Программа для моделирования движения электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру	84
	<i>Приложение 9.</i> Программа для моделирования движения электрона при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв.....	88
	<i>Приложение 10.</i> Свойства твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$	93
	<i>Приложение 11.</i> Работа в математическом пакете <i>MathCAD</i> . Описание используемых в примерах функций.....	95
	<i>Приложение 12.</i> Работа в математическом пакете <i>MathCAD</i> . Комбинации клавиш.....	98

ВВЕДЕНИЕ

Характеристические размеры полупроводниковых структур современной микро- и наноэлектроники составляют 100...10 нм. Такой диапазон линейных размеров элементов – это фундаментальный физический барьер, за которым резко меняются все свойства твердого тела, включая электропроводность. В полной мере начинают проявляться квантовые эффекты, и физика проводимости определяется квантово-механической интерференцией электронных волн. Кроме того, помимо традиционного перехода к наноструктурам путем уменьшения линейных размеров элементов в чипе, имеется и другой путь, восходящий к идеям изготовления искусственных периодических слоистых структур [1–3] со слоями нанометровой толщины. В таких слоях открывается возможность формировать заданный энергетический спектр электронов и с появлением технологической возможности изготавливать такие структуры появился даже термин «зонная инженерия».

Физическое и математическое описание таких структур и их свойств широко представлено в литературе, как в периодической, так и в различных монографиях. Попытка систематического изложения основных свойств наноэлектронных структур сделана, например, в монографии [4].

Предлагаемое вниманию читателя учебное пособие призвано помочь в использовании такого рода физико-математических описаний наност-

руктур для разработки компьютерных программ, моделирующих эти структуры и их свойства.

Кроме того, хочется отметить, что на современном этапе перед исследователем стоит задача не только построить теоретическую модель физического процесса или технического устройства и провести расчет в рамках этой модели, но и наглядно представить, визуализировать результаты расчета в виде схем и графиков. Наглядность представления результатов играет немаловажную роль в успехе научного исследования. В связи с этим формирование у студентов навыков и умений наглядно представить результаты своих расчетов является актуальной задачей. И хотя такие математические пакеты, как *MathCAD*, *MatLab*, *Mathematica* и др. предлагают достаточно широкие возможности визуализации, студентам требуется грамотно использовать эти возможности для представления результатов своих расчетов, применяя не только знания математических пакетов, но и творческие способности.

В данном учебном пособии приведены некоторые задачи из физики твердого тела, физики полупроводников, физики квантоворазмерных структур. Для каждой задачи студентам предлагается краткое теоретическое описание физической проблемы и её математической модели, базирующееся на имеющихся у студентах знаниях в соответствующих областях, формулируется задача для моделирования, включающая реализацию математической модели в математическом пакете, а также предлагается с помощью данной реализации проиллюстрировать те или иные известные студенту факты, касающиеся рассматриваемой проблемы. При этом в данном учебном пособии при изложении задач акцент смещается от выведения аналитических выражений (аналитическое рассмотрение квантоворазмерных эффектов достаточно широко освещено в литературе и лекционных курсах) к программной реализации. Это позволяет студентам нау-

читься формулировать численные алгоритмы для задач, не имеющих точных аналитических решений.

При выполнении вычислительного практикума, студенты обладают свободой в выборе среды для проведения моделирования. В приложениях приведены примеры реализации представленных математических моделей в среде *MathCAD*, а также описано использование возможностей этой среды для иллюстрации описанных в задаче фактов.

В первой главе даются некоторые сведения о строении и свойствах слоистых гетероструктур, описываются свойства гетероструктур на основе твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$.

Во второй главе приводятся описания некоторых задач, связанных с физикой кристаллов и слоистых квантоворазмерных гетероструктур. Формулируются задачи для проведения компьютерного моделирования на практических занятиях.

В приложениях 1–9 приводятся примеры программ, реализованных в математическом пакете *MathCAD*, демонстрирующих методы решения поставленных во второй главе задач.

В приложении 10 приводятся основные свойства твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$.

Приложения 11–12 посвящены краткому описанию некоторых вопросов работы в математическом пакете *MathCAD*, использующихся в примерах программ, приведенных в приложениях 1–9.

Для студентов университета, обучающихся по направлениям 210601 – «Нанотехнология в электронике», 550700 – «Электроника и микроэлектроника», специальностям 010410 – «Микроэлектроника и полупроводниковые приборы», 200100 – «Микроэлектроника и твердотельная электроника», 071000 – «Материаловедение и технология новых материалов», а также научных сотрудников, аспирантов, инженеров, интересую-

8 Компьютерное моделирование микро и наноструктур

щихся проблемами использования современных программных средств для проведения компьютерного моделирования физических процессов и технических устройств.

1 ● КРАТКИЕ СВЕДЕНИЯ О КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

1.1. Гетероструктуры и их классификация

Физика полупроводников последних 10–15 лет, благодаря успехам технологии и, прежде всего метода МВЕ (Molecular Beam Epitaxy — молекулярно-лучевая эпитаксия), это главным образом физика полупроводниковых низкоразмерных структур (наноструктур). Современные методы эпитаксии позволяют создавать монокристаллические слои и многослойные гетероструктуры с толщиной слоёв 1–10 нм, сравнимой с длиной волны де Бройля носителей заряда:

$$\Lambda = \frac{h}{m_n^* v} \quad (1.1)$$

Это открывает принципиальную возможность наблюдения и использования явлений, обусловленных волновой природой электрона. К ним, в частности, относятся интерференция электронных волн и вызванные ею размерные квантовые эффекты, например, такие, как квантование энергии и импульса носителей заряда в тонких слоях, резонансный характер прохождения электронов через эти слои и т.п. [5–7]. Размерное квантование кардинально меняет энергетический спектр носителей заряда, фононов,

квазичастиц, и возникновению целого ряда новых физических явлений и свойств полупроводниковых наноструктур.

Важное достоинство наноструктур связано с тем, что, изменяя геометрические размеры и конфигурацию нанообъектов, можно управлять свойствами системы. Открывается широкая возможность конструирования параметров структур и, прежде всего, энергетического спектра носителей заряда.

Энергетические схемы некоторых гетероструктур изображена на рис. 1.1 и 1.2. Верхняя и нижняя линии показывают зависимость положения дна зоны проводимости и потолка валентной зоны от координаты в направлении главной оси структуры, или оси роста, перпендикулярно плоскостям слоёв.

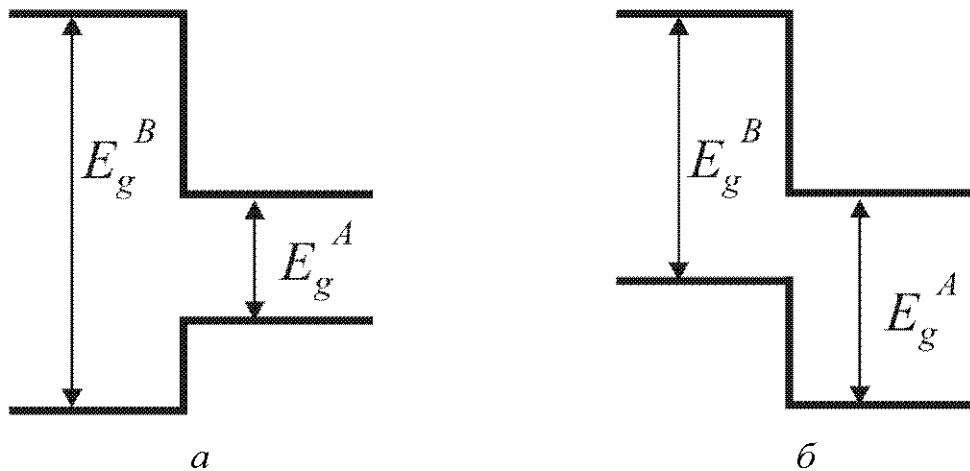


Рис. 1.1. Зонная схема одиночного гетероперехода типа I (а) и типа II (б)

Одиночный гетеропереход между двумя материалами — полупроводниками A и B изображен на рис. 1.1. Различают гетеропереходы первого и второго типа в зависимости от того, лежит запрещенная зона E_g одного из композиционных материалов внутри запрещенной зоны другого материала, как например для гетеропары $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ (рис. 1.1, а), или

дно зоны проводимости ниже в одном, а потолок валентной зоны выше в другом материале, как в случае *InAs/AlSb* или *ZnSe/BeTe* (рис. 1.1, б).

На рис. 1.2 изображен двойной гетеропереход.

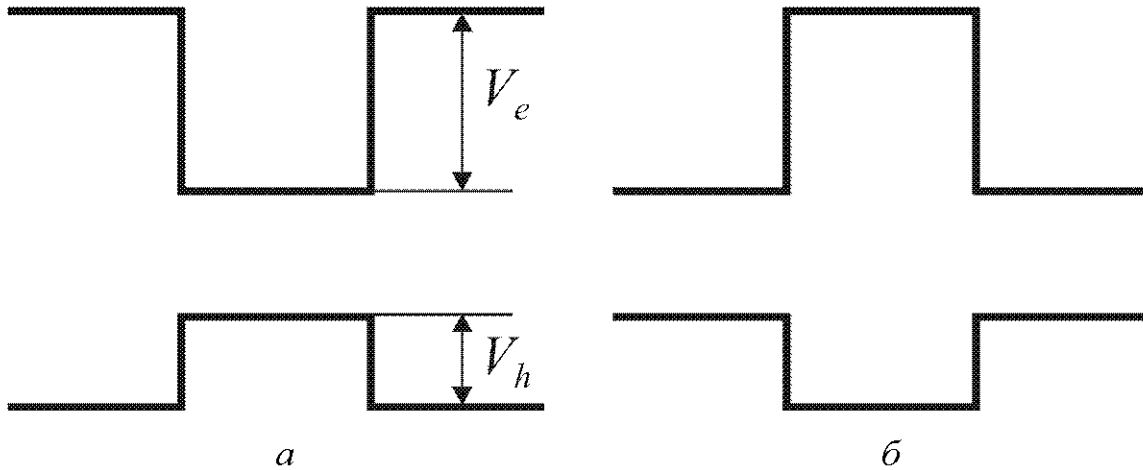


Рис. 1.2. Зонная схема двойного гетероперехода первого рода с квантовой ямой (а) или барьером (б); $V_{e,h}$ – высота потенциального барьера (глубина квантовой ямы) или разрыв зон на интерфейсе в зоне проводимости и валентной зоне соответственно

Двойной гетеропереход первого рода *B/A/B* представляет структуру с одиночной квантовой ямой, если ширина запрещенной зоны в материале *A* меньше, чем в материале *B*, т.е. $E_g^A < E_g^B$ или структуру с одиночным барьером, если $E_g^A > E_g^B$. В первом случае внутренний слой *A* образует потенциальную яму (рис. 1.2, а), в которой происходит размерное квантование электронных и дырочных состояний. Во втором случае слой *A* образует потенциальный барьер для электронов и дырок (рис. 1.2, б). На рис. 1.2, а схематически показана структура с прямоугольной ямой. Используя в качестве композиционного материала *A* твердый раствор и изменяя его состав в процессе роста, можно создавать ямы другой формы — параболические, треугольные и т. п.

Логическим развитием однобарьерной структуры являются двухбарьерные и трехбарьерные структуры, то есть одиночная или двойная квантовые ямы, отделенные барьерами конечной толщины от полубесконечных слоёв с меньшей шириной запрещенной зоны. А периодическая структура с квантовыми ямами, разделенными не очень широкими потенциальными барьерами, образует сверхрешетку, в которой носители заряда могут туннелировать из ямы в яму и длина свободного пробега этого носителя вдоль оси, перпендикулярной плоскостям слоёв, превышает период структуры.

1.2. Квантоворазмерные гетероструктуры на основе твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$

Как правило, квантоворазмерные эффекты наблюдаются в слоистых гетероструктурах, составленных из материалов, различающихся расположением и шириной энергетических зон [8–9]. В таких структурах в поперечном к плоскости слоёв направлении потенциальный рельеф для электронов имеет форму потенциальных ям и барьеров, что существенно влияет на их энергетический спектр и характер движения. Особенно сильно квантование поперечных значений импульса и энергии сказывается на поперечном транспорте электронов в гетероструктурах. Интерференция электронных волн, отраженных от границ слоёв, приводит к резонансным осцилляциям тока, протекающего в поперечном к слоям направлении под действием приложенной к ним разности потенциалов, и появлению на вольт-амперных характеристиках слоистых структур участков с отрицательным дифференциальным сопротивлением.

Поскольку характерные времена процесса формирования особенностей ВАХ ограничивается снизу временем туннелирования электронов,

движущихся с тепловой скоростью ($\sim 5 \cdot 10^5$ м/с) через слой толщиной менее 10^{-8} м, и составляющим, следовательно, менее 10^{-13} с, естественно пытаться использовать эти эффекты для создания сверхбыстродействующих приборов с рабочими частотами более 10^3 ГГц.

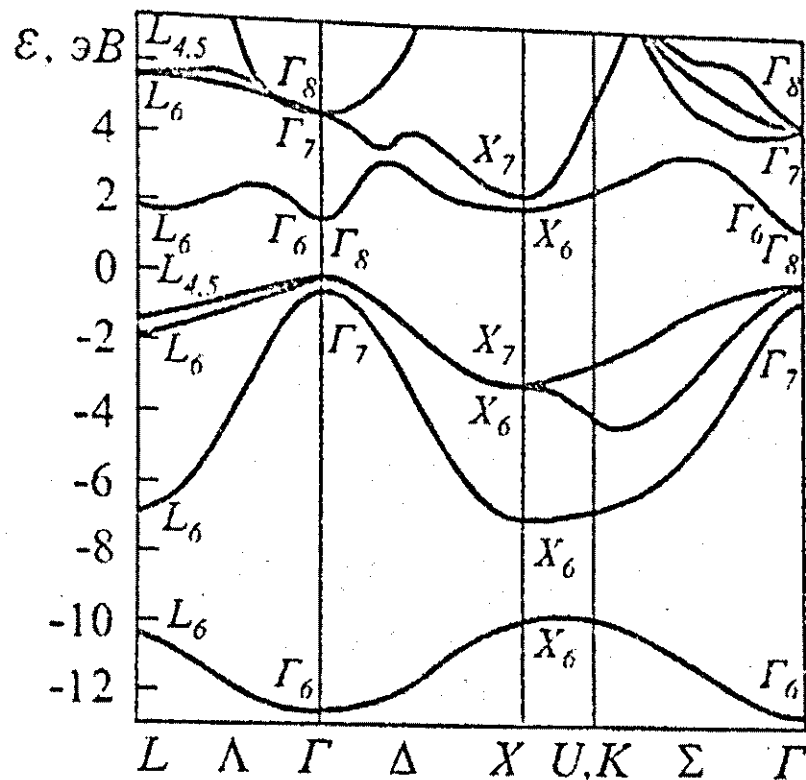
Впервые, по-видимому, на такую возможность указал Л.В. Иогансен [10–12], который предложил использовать эффект резонансного туннелирования электронов в слоистых тонкопленочных структурах металл–диэлектрик для создания целого ряда твердотельных электронных приборов. Теоретические работы Л.В. Иогансена намного опередили аналогичные зарубежные публикации. Однако они длительное время не находили экспериментального подтверждения из-за отсутствия достаточно развитой тонкопленочной технологии. Лишь в 70-х годах XX века с развитием молекулярной эпитаксии появилась возможность реализации гетероструктур, подобных предложенным Л.В. Иогансеном. Правда, вместо структур со слоями металл–диэлектрик были созданы структуры с эпитаксиальными слоями различных полупроводниковых материалов, прежде всего гетероструктуры $GaAs$ — $Al_xGa_{1-x}As$ [13, 14].

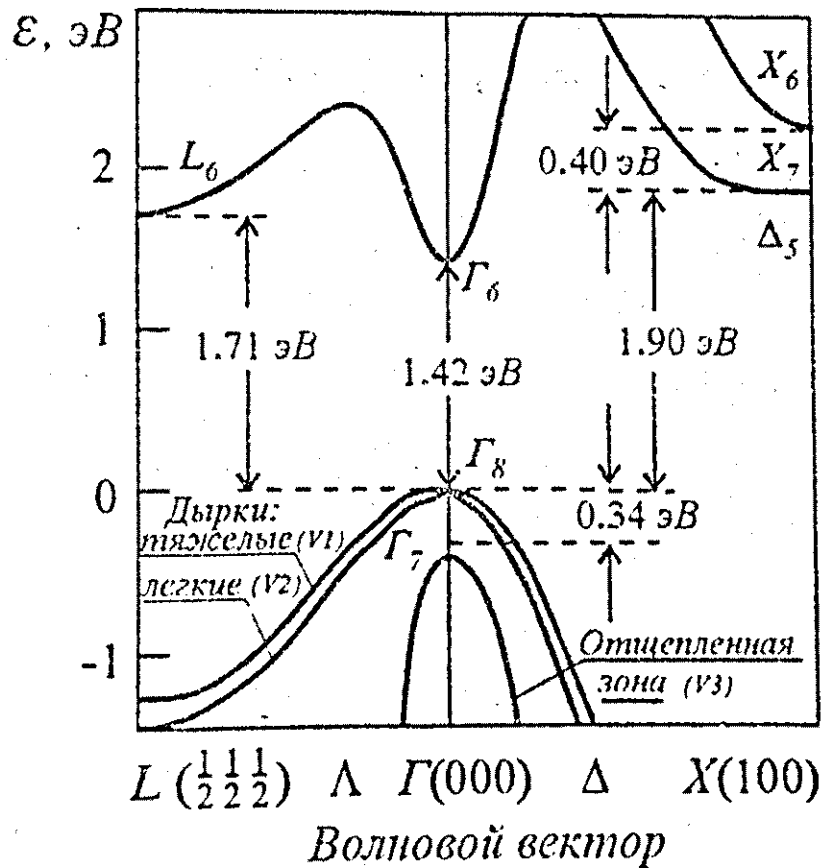
Для изготовления подобных структур к настоящему времени разработано несколько совершенных технологических процессов, однако наилучшие результаты в приготовлении квантовых структур достигнуты с помощью метода молекулярно–лучевой эпитаксии. Метод молекулярно–лучевой эпитаксии позволяет выращивать совершенные монокристаллические слои толщиной всего несколько периодов решетки. Чрезвычайно важно, чтобы периоды кристаллических решеток двух соседних слоев, имеющих различный химический состав, были почти одинаковыми. Тогда кристаллическая решетка выращенной структуры не будет содержать дефектов. В этом смысле, наиболее удачной как раз и оказалась пара $GaAs$ — $Al_xGa_{1-x}As$.

Поскольку гетероструктуры на основе твердых растворов $Al_xGa_{1-x}As$, в котором часть атомов галлия замещена атомами алюминия, были исторически первыми и остаются по сей день наиболее изученными и распространенными, компьютерное моделирование квантоворазмерных эффектов мы будем проводить именно на их примере. Величина x — это доля атомов галлия, замещенных атомами алюминия, обычно она изменяется в пределах от 0,15 до 0,35.

Зонная структура $GaAs$ представлена на рис. 1.3.

Наибольшее внимание уделяется структурам, у которых главную роль играют состояния в центре зоны Бриллюэна (точка Γ) — структурам с гетерограницами по плоскости (001).



Рис. 1.3. Зонная диаграмма $GaAs$.

Эффективная масса электронов в Γ -минимуме таких структур определяется выражением:

$$m_n(x) = (0.067 + 0.083x)m_e, \quad (1.2)$$

ширина запрещенной зоны (в эВ) — выражением:

$$E_g(x) = \begin{cases} 1.424 + 1.247x, & \text{если } x < 0.45 \\ 1.9 + 0.125x + 0.143x^2, & \text{если } x \geq 0.45 \end{cases}, \quad (1.3)$$

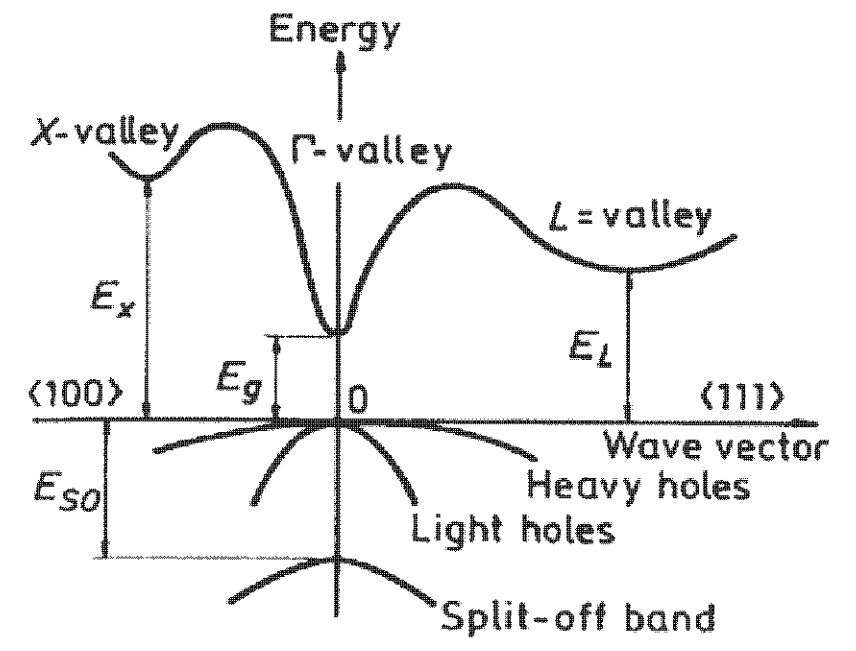
а постоянная решетки — выражением:

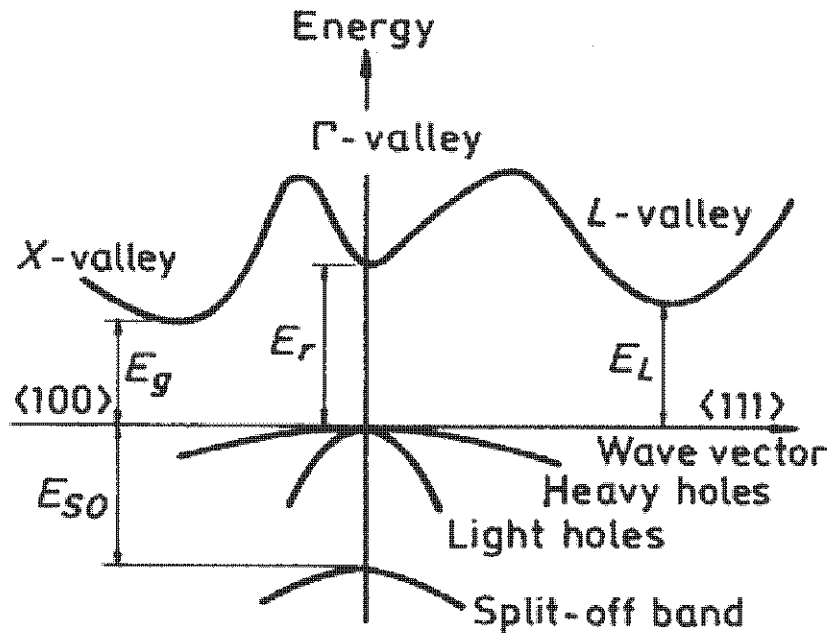
$$a_0(x) = 0.56533 + 0.00078x \text{ нм}. \quad (1.4)$$

Таким образом, варьируя долю замещения атомов галлия алюминием x можно изменять такие важные параметры полупроводникового материала как эффективную массу носителей заряда, ширину запрещенной зоны и постоянную решетки. Заметная зависимость ширины запрещенной

зоны от параметра x позволяет при выращивании монокристаллических слоистых структур получать заданный потенциальный рельеф для электронов в нормальном к плоскости слоёв направлении. При этом в силу того, что зависимость постоянной решетки от параметра x слабая, кристаллическая структура на интерфейсе между слоями характеризуется минимальными нарушениями — кристаллические решетки различных слоёв практически идеально подходят друг другу. Из-за практически полного согласования постоянных решёток слои имеют малые напряжения и могут выращиваться произвольной толщины.

На рис. 1.4. представлена зонная структура твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$ для двух поддиапазонов значений величины x : меньше и больше 0.45.





б

Рис. 1.4. Зонная структура твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$: а - $x < 0.45$, б - $x > 0.45$

Основные параметры этого соединения представлены в Приложении 10.

2 • КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ И КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

С общетеоретической точки зрения, расчет электронных состояний в слоистых структурах должен проводиться путем решения соответствующей трехмерной задачи о зонной структуре материала. В настоящее время разработаны изощренные методы компьютерного расчета квантовых состояний в наноструктурах, основанные на микроскопических моделях псевдопотенциала или сильной связи. Тем не менее эти методы пока не всесильны и не всемогущи, и при конкретной работе именно приближенные методы эффективной массы (в случае простых энергетических зон), эффективного гамильтониана (для вырожденных зон) и плавных огибающих (в многозонной модели, например в модели Кейна) оказываются более удобными и результативными.

В приближенных подходах решение внутри каждого слоя многослойной структуры (или композиционной области меньшей размерности в квантовых проволоках или точках) записывается в виде линейной комбинации независимых объемных решений, а для сшивки на гетерограницах вводятся граничные условия для огибающих волновой функции электрона и их производных по нормальной координате.

Расчеты электронных состояний в полупроводниковых наноструктурах, выполняемые в методе эффективной массы, основаны на решении стационарного (исключая экзотические случаи, когда потенциальный рельеф является функцией времени) уравнения Шредингера, которое для движения электронов в перпендикулярном плоскости слоёв направлении является одномерным:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} + U(z) \cdot \psi(z, E) = E \cdot \psi(z, E), \quad (2.1)$$

здесь m — эффективная масса электрона, E — его полная энергия, $U(z)$ — потенциальный рельеф для электрона вдоль оси z направленной в перпендикулярном к плоскости слоёв направлении. Решением данного уравнения Шредингера является z -составляющая огибающей волновой функции $\psi(z, E)$, характеризующая движение электронов в перпендикулярном плоскости слоёв направлении и определяющая, с точностью до нормировки, вероятность нахождения электрона с энергией E движения вдоль оси Oz в точке с координатой z .

Для простой зонной структуры граничные условия на интерфейсе между слоями A и B в общем случае имеют вид:

$$\begin{cases} \Psi_A = t_{11} \cdot \Psi_B + t_{12} \cdot \tilde{\Psi}_B, \\ \tilde{\Psi}_A = t_{21} \cdot \Psi_B + t_{22} \cdot \tilde{\Psi}_B, \end{cases} \quad (2.2)$$

где $\Psi_{A,B}$ — значения огибающей волновой функции на интерфейсе со стороны слоя A и со стороны слоя B соответственно,

$$\tilde{\Psi}_A = l \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_A, \quad \tilde{\Psi}_B = l \cdot \frac{m_A}{m_B} \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_B, \quad (2.3)$$

$m_{A,B}$ — эффективные массы электронов в слоях A и B соответственно, l — произвольный параметр с размерностью длины, введенный чтобы элементы матрицы t_{ij} были безразмерными. Выбор значений t_{ij} обычно по-

стигуруется или осуществляется путем сравнения с результатами эксперимента или расчета в рамках какой-либо микроскопической модели. Чаще других используются граничные условия, связанные с именем Бастарда:

$$\begin{cases} \Psi|_A = \Psi|_B \\ \frac{1}{m_A} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \Big|_A = \frac{1}{m_B} \frac{\partial \Psi}{\partial z} \Big|_B \end{cases} \quad (2.4)$$

Решая уравнение (2.1) с граничными условиями (2.2), можно построить огибающие волновых функций электронов с различными значениями энергии E .

2.1. Моделирование энергетического спектра электрона в твердом теле (модель Кронига-Пенни)

Однако прежде чем приступить к моделированию энергетического спектра электронов в гетероструктурах, рассмотрим движения электрона в обычном кристалле. Потенциальная энергия электронов в кристалле является функцией координат с периодом, равным расстоянию между атомами. Электрон в периодическом поле обладает рядом общих свойств, не зависящих от конкретной формы периодического потенциала [15–17]. Большинство из них можно выяснить при рассмотрении упрощенной модели кристалла, представляя его в виде цепочки атомов. При этом периодический потенциал становится одномерным. Форма периодического потенциала выбирается такой, чтобы расчет оказался наиболее простым [18, 19]. В этом случае возможно проведение строгого решения уравнения Шредингера. В модели Кронига—Пенни потенциал имеет вид прямоугольных ям (рис. 2.1), которые чередуются с прямоугольными потенциальными барьерами:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } nc < z < nc + a \\ U_0, & \text{если } (nc + a) < z < (n+1)c \end{cases} \quad (2.5)$$

где a — ширина ямы, b — ширина барьера, $c = a + b$ — постоянная кристаллической решетки, U_0 — высота барьера, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Решения уравнения Шредингера (2.1) при $E < U_0$ могут быть записаны в виде:

$$\Psi_n(z) = \begin{cases} A_n e^{j\alpha(z-nc)} + B_n e^{-j\alpha(z-nc)}, & \text{если } nc < z < nc + a \\ C_n e^{\beta[z-(nc+a)]} + D_n e^{-\beta[z-(nc+a)]}, & \text{если } (nc + a) < z < (n+1)c \end{cases} \quad (2.6)$$

где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n E}, \quad (2.7)$$

$$\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n (U_0 - E)}, \quad (2.8)$$

m_n — эффективная масса электрона в кристалле, j — мнимая единица.

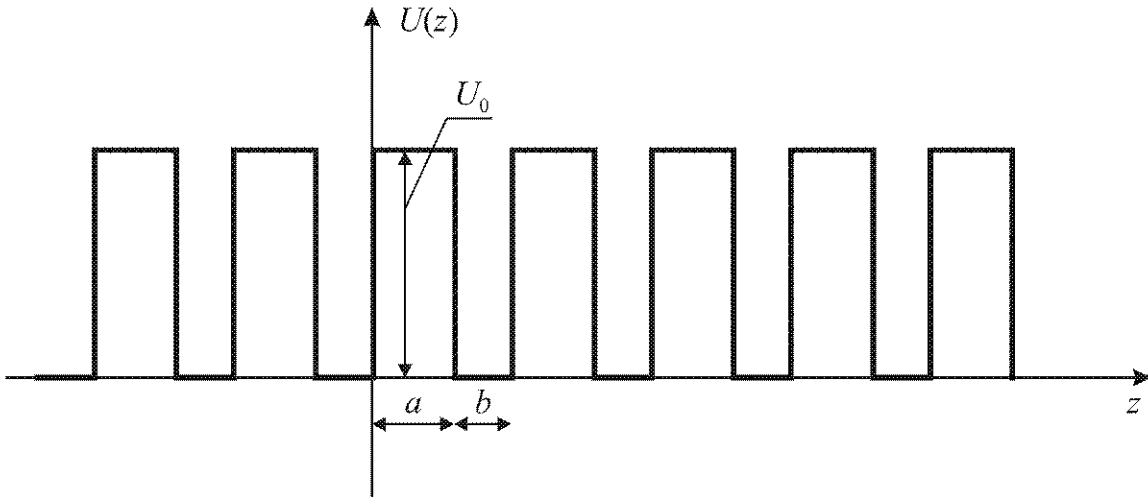


Рис. 2.1. Потенциальный рельеф для электрона в кристалле (модель Кронига–Пенни).

Из граничных условий (2.2), принимая во внимание постоянство эффективной массы во всем кристалле, получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}
A_n + B_n &= C_{n-1}e^{\beta b} + D_{n-1}e^{-\beta b}, \\
j\alpha A_n - j\alpha B_n &= C_{n-1}\beta e^{\beta b} - D_{n-1}\beta e^{-\beta b}, \\
A_n e^{j\alpha a} + B_n e^{-j\alpha a} &= C_n + D_n, \\
j\alpha A_n e^{j\alpha a} - j\alpha B_n e^{-j\alpha a} &= \beta C_n - \beta D_n.
\end{aligned} \tag{2.9}$$

При этом между коэффициентами C_{n-1}, D_{n-1} и C_n, D_n существует связь, вытекающая из связи между волновыми функциями ψ_{n-1} и ψ_n . Так как функции ψ_{n-1} и ψ_n являются решениями одного и того же уравнения Шредингера, то они могут отличаться друг от друга только постоянным множителем, квадрат которого равен единице. То есть:

$$\Psi_n = \Psi_{n-1}e^{j\lambda}, \tag{2.10}$$

где λ — некоторый вещественный параметр.

Отсюда

$$\begin{aligned}
C_{n-1} &= C_n e^{-j\lambda}, \\
D_{n-1} &= D_n e^{-j\lambda}.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Подставляя значения (2.3) в систему уравнений (2.0.), получим систему из четырех однородных уравнений с четырьмя неизвестными A_n, B_n, C_n и D_n . Для того, чтобы эта система имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы определитель, составленный из коэффициентов этих уравнений, был равен нулю. Записав и раскрыв определитель, получим уравнение, определяющее значения энергии электрона E (входящей в выражения для α и β), для которых существуют нетривиальные решения системы (2.0.):

$$\cos(\alpha a)\cosh(\beta b) + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a)\sinh(\beta b) = \cos(\lambda). \tag{2.12}$$

Анализ уравнения (2.4) затруднен тем, что энергия входит в α и β , однако его можно упростить, представив потенциал в ещё более идеализи-

рованном виде. Произведение βb определяет степень прозрачности потенциального барьера для электронов, в него входит ширина барьера b и высота барьера U_0 . Рассмотрим случай, когда ширина барьера устремляется к нулю, а высота — к бесконечности, причем так, что произведение $U_0 b$ остается постоянным. При этом, так как $U_0 \sim \beta^2$, то при $b \rightarrow 0$ и $U_0 \rightarrow \infty$ произведение $\beta b \rightarrow 0$. Тогда, вводя обозначение

$$P = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty \\ U_0 b = \text{const}}} \frac{\beta^2 a b}{2}, \quad (2.13)$$

от уравнения (2.4) перейдем к более простому:

$$\cos(\alpha a) + P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} = \cos(\lambda). \quad (2.14)$$

Уравнение (2.5) называется уравнением Кронига–Пенни. Параметр P пропорционален площади потенциального барьера; он характеризует степень прозрачности барьера для электронов или степень связанности электрона внутри потенциальной ямы.

Для анализа уравнения (2.5) изобразим графически его левую часть как функцию аргумента αa (рис. 2.2, сплошная линия). Действительные корни этого уравнения существуют только при тех значениях αa , при которых левая часть уравнения принимает значения в интервале $[-1; 1]$. На рис. 2.2 заштрихованы области допустимых значений αa . Их ширина зависит от параметра P : чем он меньше, тем они шире и при фиксированном значении P становятся шире с увеличением αa , а значит и энергии.

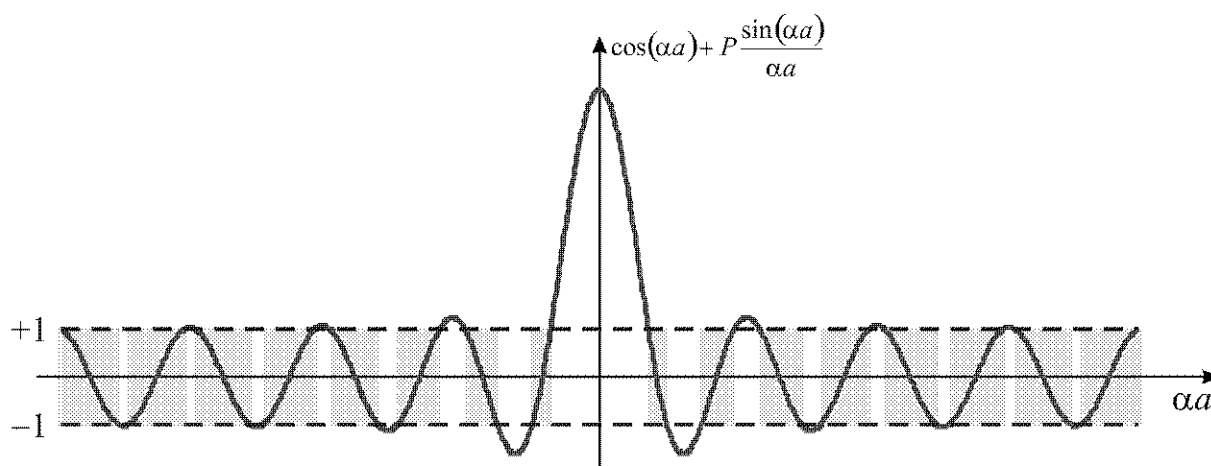


Рис. 2.2. Графический анализ уравнения Кронига–Пенни.

Таким образом, энергия электрона в периодическом поле не может принимать любое значение, как для свободного электрона. Она ограничена рядом полос (зон) разрешенных значений, отделенных друг от друга запрещенными зонами — энергетический спектр электрона в периодическом поле имеет зонную структуру. Ширина разрешенных зон определяется степенью связанности электрона внутри потенциальной ямы.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Изобразить графически левую часть уравнения (2.5), схематически изобразить на получившемся графике зоны разрешенных и запрещенных значений αa . Проиллюстрировать, как изменяется ширина разрешенных зон при изменении параметра P .
2. Проанализировать два крайних случая: $P = 0$ (электрон совершенно свободен) и $P = \infty$ (барьер совершенно непроницаем, электрон заперт в пределах одной потенциальной ямы).

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 1.

2.2. Моделирование энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме

Если сформировать тонкий слой узкозонного материала между двумя достаточно толстыми слоями широкозонного материала, то для электрона, движущегося в поперечном к плоскостям слоёв направлении, может быть сформирован потенциальный рельеф, изображенный на рис. 2.3 (энергия отсчитывается от дна зоны проводимости материала ямы). Такого рода рельеф носит название прямоугольной потенциальной ямы. В данном разделе мы будем рассматривать симметричную потенциальную яму (рис. 2.3, б).

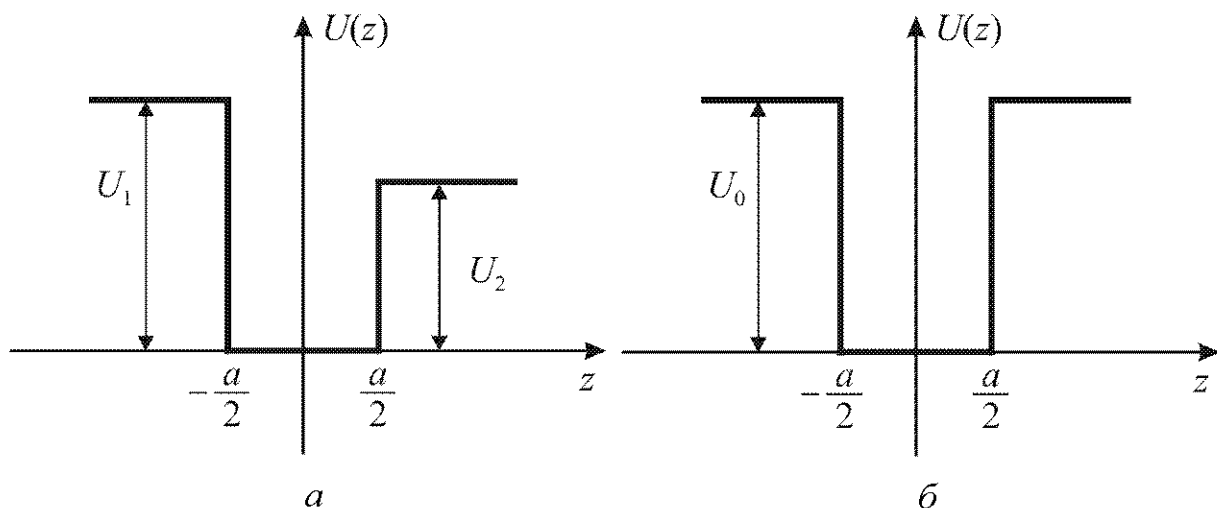


Рис. 2.3. Энергетическая диаграмма прямоугольной потенциальной ямы: *a* – несимметричной, *б* – симметричной.

2.2.1. С бесконечно высокими стенками

Рассмотрение начнем с идеализированного случая потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. В этом случае вне ямы функция $\psi(z, E)$ тождественно равна нулю, а внутри ямы удовлетворяет уравнению Шредингера вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} = E \cdot \psi(z, E) \quad (2.15)$$

с граничными условиями

$$\psi\left(\pm \frac{a}{2}, E\right) = 0, \quad (2.16)$$

где a — ширина потенциальной ямы (толщина среднего слоя рассматриваемой трехслойной структуры). Тогда $\pm a/2$ — координаты интерфейсов между слоями.

Из математической физики известно [20], что уравнение (2.0.) имеет решение лишь при дискретных значениях энергии E — собственных значениях данного уравнения:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu\pi}{a} \right)^2. \quad (2.17)$$

Система обладает симметрией по оси Oz относительно начала координат, поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера (2.0.) разбивается на подгруппы четных и нечетных решений:

$$\psi(z, E) = \begin{cases} C \cos\left(\frac{\pi\nu}{a}\right), & \text{если } \nu = 1, 3, 5, \dots \\ C \sin\left(\frac{\pi\nu}{a}\right), & \text{если } \nu = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (2.18)$$

Здесь C — нормировочный коэффициент.

Графики огибающих волновых функций электрона в квантовой яме шириной 20 атомных монослоёв (11.3 нм) для первых четырех разрешенных уровней энергии представлены на рис. 2.4, а, а энергетический спектр электрона в такой яме — на рис. 2.4, б. Материал ямы — *GaAs*.

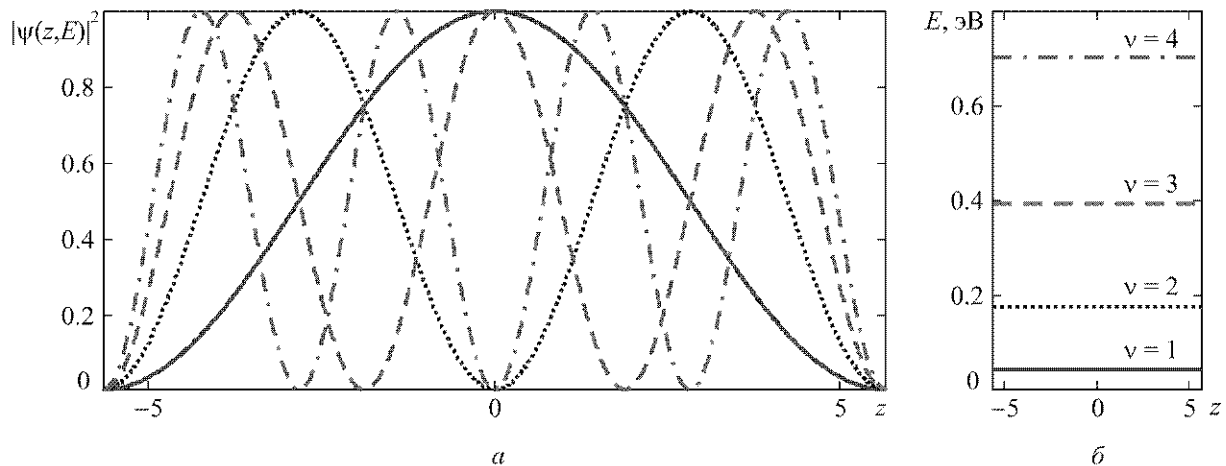


Рис. 2.4. Огибающие волновых функций (а) и квантованные уровни энергии (б) электрона в прямоугольной квантовой яме.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Построить огибающие волновых функций и квантованные уровни энергии в прямоугольной квантовой яме с бесконечно высокими стенками для различных значений ширины ямы: 10, 20 и 30 атомных монослоёв *GaAs*.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 2.

2.2.2. Со стенками конечной высоты

В реальном случае стенки потенциальной ямы имеют конечную ширину, и для симметричной потенциальной ямы потенциал $U(z)$ в уравнении (2.1) имеет вид:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } |z| \leq \frac{a}{2}, \\ U_0, & \text{если } |z| > \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (2.19)$$

Решения уравнения Шредингера (2.1) записываются отдельно в каждой из трех областей, где потенциал $U(z)$ постоянен, в виде:

$$\begin{aligned}
 \Psi_1(z) &= A_1 e^{\beta z}, \\
 \Psi_2(z) &= A_2 e^{j\gamma z} + B_2 e^{-j\gamma z}, \\
 \Psi_3(z) &= B_3 e^{-\beta z}.
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Здесь $\beta = \sqrt{\frac{2m_B(U_0 - E)}{\hbar^2}}$, $\gamma = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}}$, m_A и m_B — эффективные

массы электронов в материале A , образующем яму, и в материале B , образующем барьеры, соответственно. Решения ψ_1 и ψ_2 записаны с учетом того, что они должны равняться нулю на бесконечности. Значения констант A_1 , A_2 , B_2 и B_3 находятся из граничных условий (2.2), которые после подстановки туда решений (2.7) принимают вид:

$$\begin{cases}
 A_1 e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\
 A_1 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\
 A_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = B_3 e^{-\frac{a}{2}\beta}, \\
 A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = -B_3 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta}.
 \end{cases} \tag{2.21}$$

Система алгебраических уравнений (2.8) имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда её определитель равен нулю:

$$\text{Det} \begin{pmatrix}
 e^{-\frac{a}{2}\beta} & -e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & -e^{j\gamma\frac{a}{2}} & 0 \\
 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} & -\frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} & 0 \\
 0 & e^{j\gamma\frac{a}{2}} & e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & -e^{-\frac{a}{2}\beta} \\
 0 & \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} & -\frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} & \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta}
 \end{pmatrix} = 0. \tag{2.22}$$

Раскрывая определитель и упрощая полученное выражение, приходим к уравнению

$$\beta^2 m_A^2 \sinh(j\gamma a) + 2j\gamma\beta m_A m_B \cosh(j\gamma a) - \gamma^2 m_B^2 \sinh(j\gamma a) = 0, \quad (2.23)$$

определяющему разрешенные значения энергии электрона в квантовой яме. Уравнение (2.9) является трансцендентным и требует численного или графического решения.

Система (2.8) имеет бесконечное множество решений, отличающихся друг от друга произвольным множителем. Выражая из этой системы константы A_2 , B_2 и B_3 через A_1 , получим частное решение в виде:

$$\begin{aligned} A_2 &= A_1 \cdot \frac{1}{2} \left(1 - j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{\frac{(j\gamma - \beta)a}{2}}, \\ B_2 &= A_1 \cdot \frac{1}{2} \left(1 + j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-\frac{(j\gamma + \beta)a}{2}}, \\ B_3 &= A_1 \cdot \left[\frac{1}{2} \left(1 - j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{j\gamma a} + \frac{1}{2} \left(1 + j \frac{\beta m_A}{\gamma m_B} \right) e^{-j\gamma a} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Графики огибающих волновых функций электрона в квантовой яме шириной 20 атомных монослоёв (11.3 нм) для первых трех разрешенных уровней энергии, рассчитанных из уравнения (2.9), представлены на рис. 2.5. Графики схематично наложены на зонную диаграмму гетеропереходов, образующих квантовую яму, при этом начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме. Материал ямы — $GaAs$, материал барьеров — $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

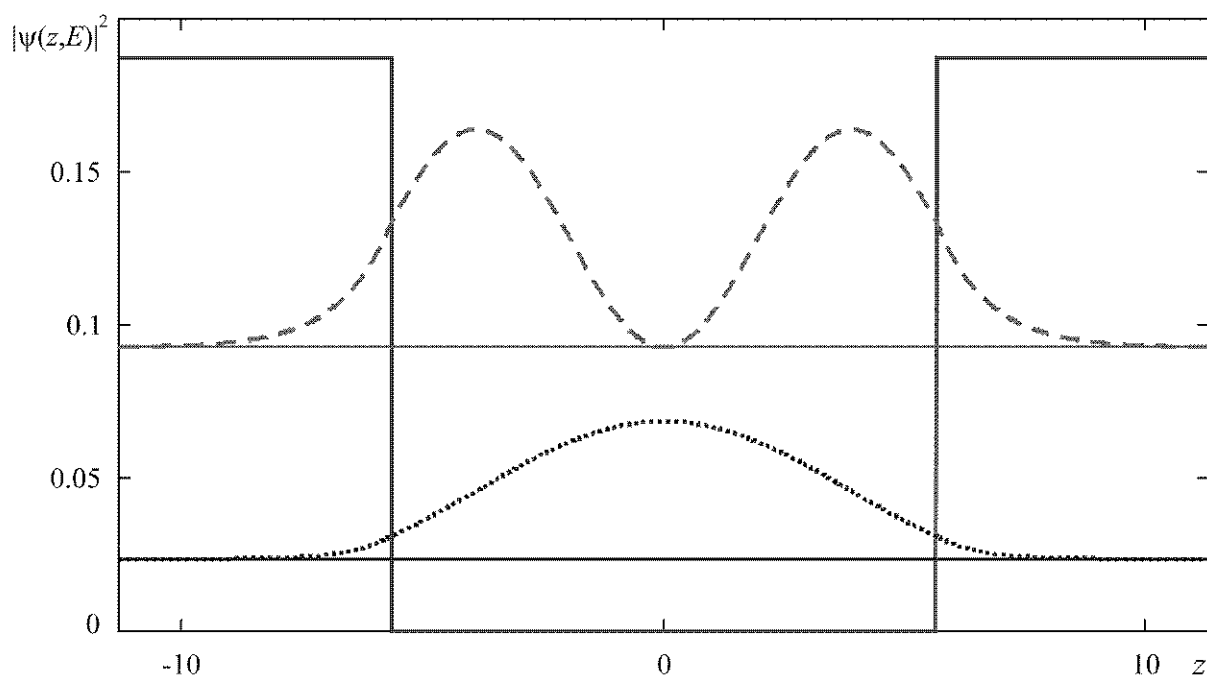


Рис. 2.5. Огибающие волновых функций и квантованные уровни энергии электрона в прямоугольной квантовой яме со стенками конечной высоты.

Как видно из рис. 2.5, в областях барьеров имеется определенная, хоть и весьма малая, вероятность нахождения электрона, то есть электрон, преимущественно локализованный в квантовой яме, проникает и в области барьеров.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Построить огибающие волновых функций и квантованные уровни энергии в прямоугольной квантовой яме, образованной слоем $GaAs$, заключенным между слоями $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, для различных значений ширины ямы: 10, 20 и 30 атомных монослоёв.
2. Сравнить положения энергетических уровней в такой квантовой яме с энергетическими уровнями бесконечно глубокой квантовой ямы.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 3.

2.3. Моделирование движения электрона вблизи потенциальной ступеньки

Рассмотрим модель рассеяния электрона на потенциальном рельефе, описываемом следующим выражением:

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } z < 0, \\ U_0, & \text{если } z \geq 0, \end{cases} \quad (2.25)$$

и изображенном на рис. 2.6. Область 1 сформирована узкозонным материалом A , область 2 — широкозонным материалом B .

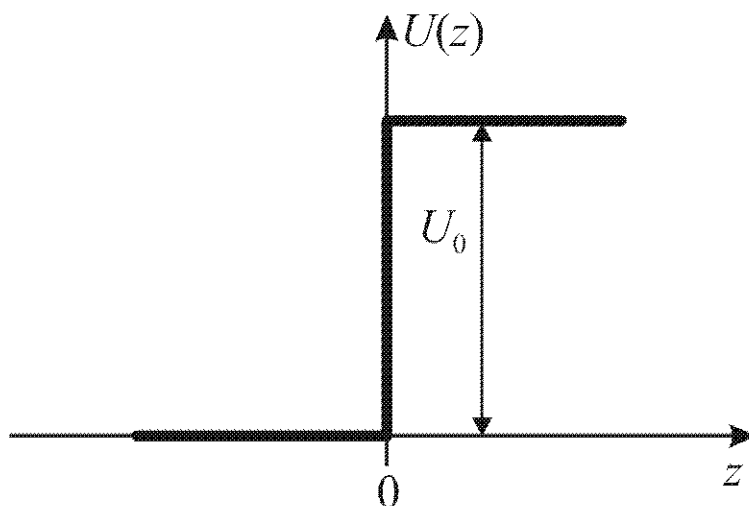


Рис. 2.6. Энергетическая диаграмма потенциальной ступеньки.

Будем считать, что источник электронов находится в области 1 и бесконечно удален от границы раздела (интерфейса) между областями 1 и 2. Электроны движутся от источника в положительном направлении оси Oz , обладая энергией E .

Решение уравнения Шредингера (2.1) с потенциалом вида (2.10) в области 1 будет иметь вид:

$$\psi_1(z, E) = A_1 e^{j\gamma_1 z} + B_1 e^{-j\gamma_1 z}, \quad (2.26)$$

где $\gamma_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}}$, m_1 — эффективная масса электрона в материале A . То

есть, ψ_1 представляет собой суперпозицию падающей и отраженной волны де Бройля, A_1 – амплитуда волны, распространяющейся от источника электронов к потенциальной ступеньке, B_1 – амплитуда волны, отраженной от потенциальной ступеньки.

Учитывая однородность среды в области 2 (по постановке задачи в области 2 нет источников электронов и нет неоднородностей, от которых они могли бы отразиться) и условие конечности волновой функции во всех точках пространства, в том числе и в точке $z = +\infty$, решение уравнения Шредингера (2.1) с потенциалом вида (2.10) в области 2 можно записать в виде:

$$\psi_2(z, E) = A_2 e^{j\gamma_2 z}, \quad (2.27)$$

где $\gamma_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E - U_0)}{\hbar^2}}$, m_2 – эффективная масса электрона в материале B .

То есть, в области 2 имеет место только волна де Бройля, распространяющаяся в положительном направлении оси Oz , A_2 – амплитуда этой волны.

Коэффициенты A_2 и B_1 могут быть выражены через коэффициент A_1 с использованием граничных условий (2.2). Подставляя выражения (2.11) и (2.12) в (2.2), получим:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2, \\ \gamma_1 A_1 - \gamma_1 B_1 = \gamma_2 A_2, \end{cases} \quad (2.28)$$

откуда

$$B_1 = A_1 \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad A_2 = A_1 \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (2.29)$$

Коэффициент A_1 может быть найден из условия нормировки волновой функции, которая имеет смысл вероятности. При изображении графиков огибающих волновых функций его можно положить равным произ-

вольному числу, поскольку физический интерес представляет не амплитуда падающей электронной волны, а отношения амплитуд волн прошедших и отраженных к амплитуде волны падающей.

На рис. 2.7 представлены графики огибающих волновых функций для различных значений энергии электрона E вблизи интерфейса между областями 1 и 2, образованными материалами $GaAs$ и $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ соответственно.

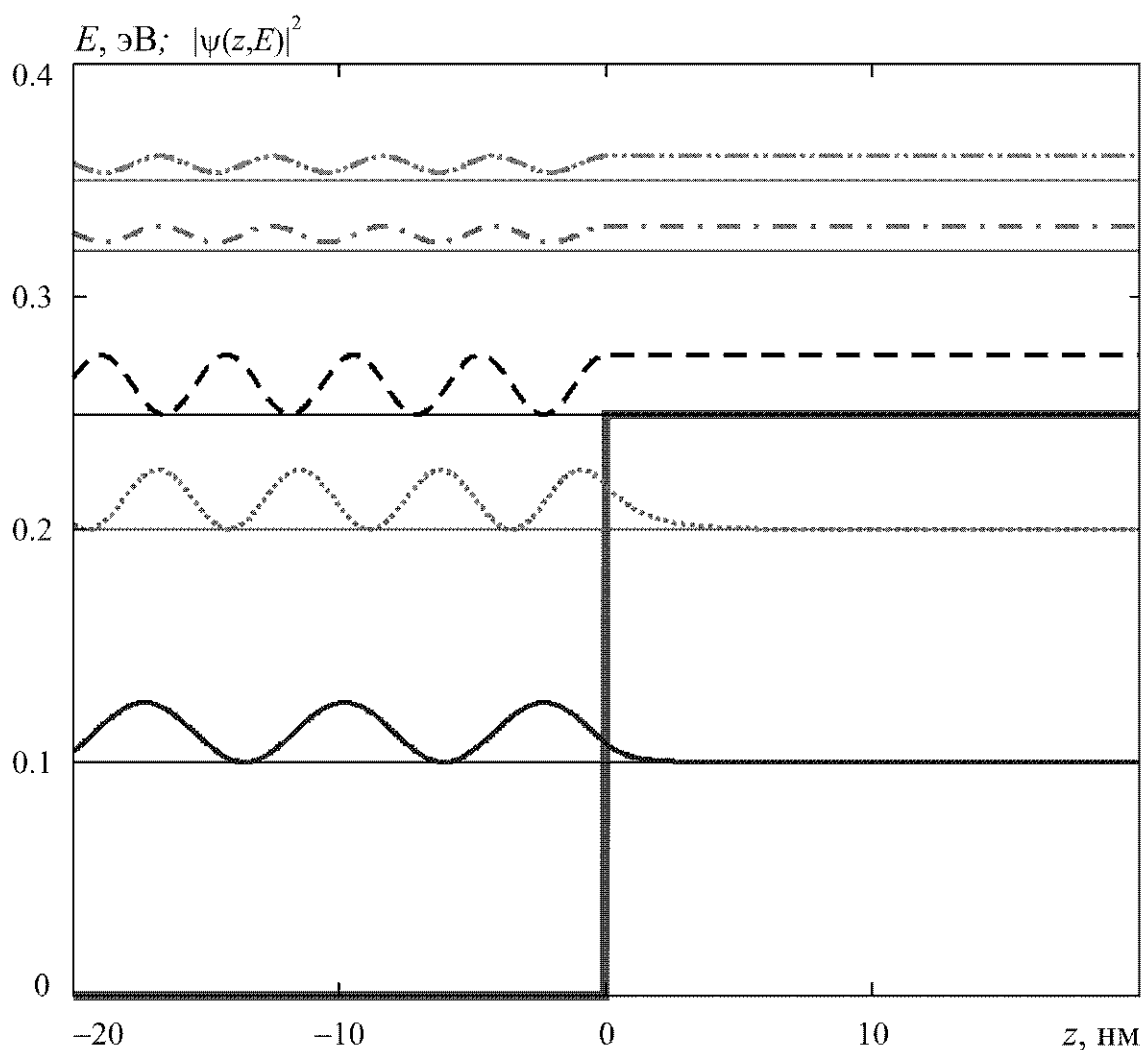


Рис. 2.7. Графики огибающих волновых функций электрона вблизи потенциальной ступеньки для различных значений энергии электрона, наложенные на потенциальный рельеф. Начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме.

Графики схематично наложены на зонную диаграмму гетероперехода, при этом начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме. Такое представление результатов расчетов позволяет наглядно проиллюстрировать особенности интерференции электронных волн на границе раздела двух материалов при различных характерных значениях энергии электрона.

Физический интерес представляют коэффициенты отражения и прохождения, определяемые отношением плотностей потоков отраженных и прошедших через интерфейс электронов к плотности потока падающих на интерфейс электронов. Определим вектор плотности потока вероятности \mathbf{J} следующим образом (в нашем одномерном случае это будет скаляр):

$$J = \frac{j\hbar}{2m} (\psi \cdot \psi^{*'} - \psi^* \psi'). \quad (2.30)$$

Тогда коэффициент прохождения D и коэффициент отражения R определяются следующим образом:

$$D = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_2^+|}{|J_1^+|}, \quad (2.31)$$

$$R = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_1^-|}{|J_1^+|}, \quad (2.32)$$

где J_1^+ – вектор плотности потока вероятности для электронов, падающих на границу раздела со стороны области 1, J_1^- – вектор плотности потока вероятности для электронов, отраженных от границы раздела обратно в область 1, J_2^+ – вектор плотности потока вероятности для электронов, прошедших через границу раздела в область 2. Следует отметить, что дан-

ная постановка задачи не предусматривает рекомбинацию (поглощение) электронов как на границе между областями 1 и 2, так и в самих областях.

Подставляя выражения (2.11) и (2.12) в (2.13), получим:

$$J_1^+ = \hbar \frac{\gamma_1}{m_1} |A_1|^2, \quad J_1^- = -\hbar \frac{\gamma_1}{m_1} |B_1|^2, \quad J_2^+ = \hbar \frac{\gamma_2}{m_2} |A_2|^2. \quad (2.33)$$

Тогда выражения для коэффициентов прохождения и отражения от потенциальной ступеньки примут вид:

$$D = \frac{|\gamma_2| m_1 |A_2|^2}{|\gamma_1| m_2 |A_1|^2}, \quad (2.34)$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad (2.35)$$

или, с учетом (2.0.),

$$D = \frac{m_1}{m_2} \frac{4|\gamma_1 \gamma_2|}{|\gamma_1 + \gamma_2|^2}, \quad (2.36)$$

$$R = \frac{|\gamma_1 - \gamma_2|^2}{|\gamma_1 + \gamma_2|^2}. \quad (2.37)$$

Графики зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона представлены на рис. 2.8.

Отметим, что в случае, когда энергия электрона $E < U_0$, величина γ_2 становится мнимой и функция ψ_2 принимает вид спадающей экспоненты:

$$\psi_2(z, E) = A_2 e^{-\beta z}, \quad (2.38)$$

где $\beta = j\gamma_2 = \sqrt{\frac{2m_2(U_0 - E)}{\hbar^2}}$.

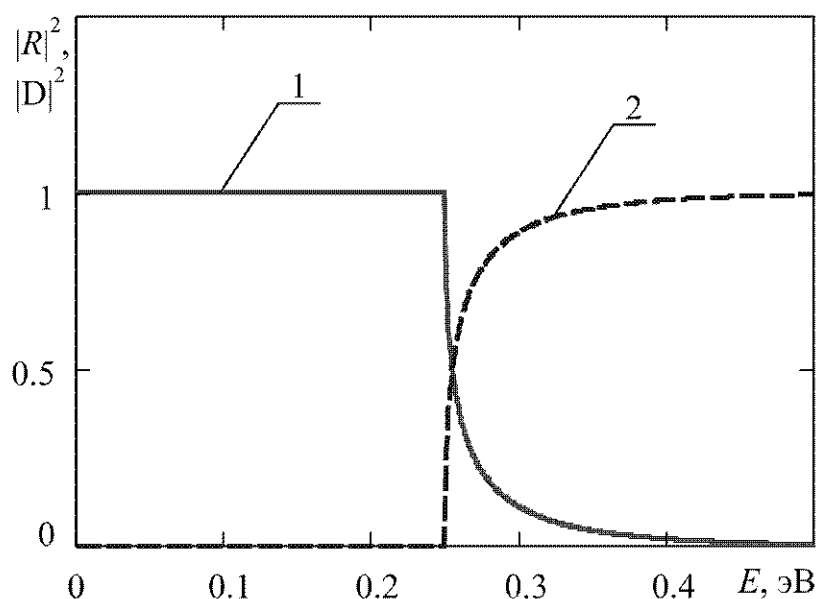


Рис. 2.8. Зависимость коэффициентов отражения (кривая 1) и прохождения (кривая 2) электронов через потенциальную ступеньку от энергии.

В этом случае, в соответствии с (2.13), поток частиц в области 2 отсутствует ($J_2^+ = 0$), а коэффициент отражения $R = \left| \frac{\gamma_1 - j\beta}{\gamma_1 + j\beta} \right|^2 = 1$.

Несмотря на это, в области 2 волновая функция отлична от нуля (рис. 2.7), то есть имеется определенная, хотя и малая, вероятность того, что электрон проникает под потенциальный барьер. Кроме того, когда энергия электрона $E > U_0$, имеется конечная вероятность отражения частицы от потенциального барьера.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Рассмотреть структуру, представляющую собой интерфейс между двумя полубесконечными областями $Al_xGa_{1-x}As$ и $GaAs$ для значения параметра $x = 0,4$.
2. Построить потенциальный профиль для электронов в рассматриваемой структуре, определить высоту потенциального барьера U_0 , отсчитывая энергию от дна зоны проводимости $GaAs$.

3. Построить зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0 до $3U_0$.
4. Построить огибающие волновых функций вблизи интерфейса между областями 1 и 2 для различных значений энергии электрона и схематически наложить их на потенциальный профиль структуры; проиллюстрировать следующие факты:
 - 1) при энергии электрона $E > U_0$ имеется конечная вероятность отражения частицы от потенциального барьера, то есть перед барьером есть встречный поток частиц;
 - 2) при $E < U_0$ все частицы отражаются от потенциальной ступеньки, то есть в области барьера поток частиц отсутствует;
 - 3) имеется определенная вероятность проникновения частицы с энергией $E < U_0$ внутрь потенциального барьера.
5. Оценить эффективную глубину проникновения электрона под потенциальный барьер, то есть глубину, на которой вероятность обнаружения электрона уменьшается в e раз.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 4.

2.4. Моделирование движения электрона в слоистых квантоворазмерных структурах

Как уже отмечалось, возможность формирования заданного энергетического спектра электронов появляется в слоистых гетероструктурах. С методами расчета энергетического спектра в таких структурах мы и познакомимся в данном параграфе.

2.4.1. Моделирование движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины

Рассмотрим структуру, образованную тонким слоем широкозонного материала, заключенного между двумя практически полубесконечными областями узкозонного материала. Зонная диаграмма такой структуры изображена на рис. 2.9.

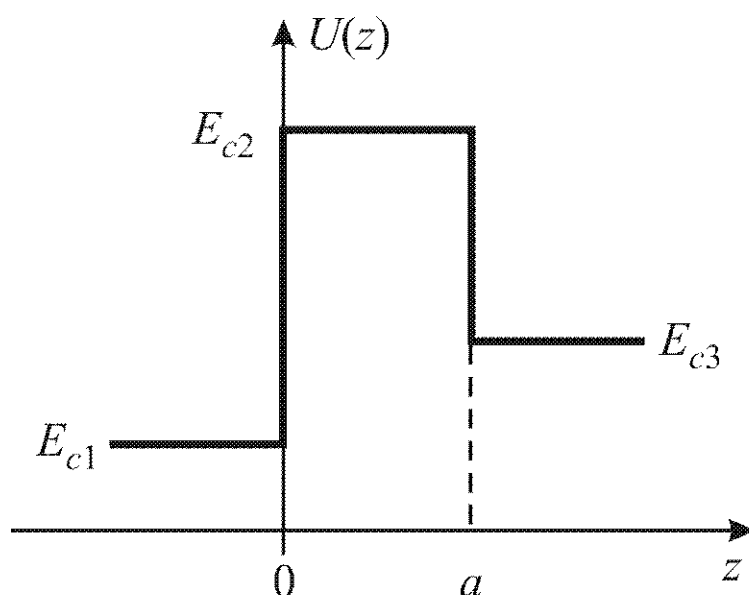


Рис. 2.9. Энергетическая диаграмма прямоугольного потенциального барьера.

Потенциальный рельеф для электрона в такой структуре можно записать в виде:

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1}, & \text{если } z < 0, \\ E_{c2}, & \text{если } 0 < z < a, \\ E_{c3}, & \text{если } z > a, \end{cases} \quad (2.39)$$

где a – толщина слоя широкозонного материала.

Как и в предыдущем случае будем считать, что источник электронов находится в области 1 и бесконечно удален от границы раздела между областями 1 и 2. Электроны движутся от источника в положительном направлении оси Oz , обладая энергией E . Решения уравнения Шредингера в

областях 1, 2 и 3, в каждой из которых потенциал $U(z)$ постоянен, можно записать в виде, соответственно:

$$\begin{aligned}\psi_1(z, E) &= A_1 e^{j\gamma_1 z} + B_1 e^{-j\gamma_1 z}, \\ \psi_2(z, E) &= A_2 e^{j\gamma_2 z} + B_2 e^{-j\gamma_2 z}, \\ \psi_3(z, E) &= A_3 e^{j\gamma_3 z},\end{aligned}\tag{2.40}$$

где $\gamma_i = \sqrt{\frac{2m_i(E - E_{ci})}{\hbar^2}}$, $i = 1, 2, 3$, m_i и E_{ci} – эффективная масса и энергия дна зоны проводимости в i -ой области.

Коэффициенты B_1 , A_2 , B_2 и A_3 могут быть выражены через коэффициент A_1 с использованием граничных условий (2.2). Подставляя выражения (2.14) в (2.2), получим:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ \frac{\gamma_1}{m_1} (A_1 - B_1) = \frac{\gamma_2}{m_2} (A_2 - B_2), \\ A_2 e^{j\gamma_2 a} + B_2 e^{-j\gamma_2 a} = A_3 e^{j\gamma_3 a}, \\ \frac{\gamma_2}{m_2} (A_2 e^{j\gamma_2 a} - B_2 e^{-j\gamma_2 a}) = \frac{\gamma_3}{m_3} A_3 e^{j\gamma_3 a}, \end{cases},\tag{2.41}$$

откуда

$$A_3 = 4 \frac{\gamma_1}{m_1} \frac{\gamma_2}{m_2} \frac{1}{\zeta} \cdot A_1,\tag{2.42}$$

где

$$\zeta = \left(\frac{\gamma_1}{m_1} + \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} + \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{j(\gamma_3 - \gamma_2)a} + \left(\frac{\gamma_1}{m_1} - \frac{\gamma_2}{m_2} \right) \left(\frac{\gamma_2}{m_2} - \frac{\gamma_3}{m_3} \right) e^{j(\gamma_3 + \gamma_2)a},\tag{2.43}$$

и

$$A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \frac{m_2}{m_3} \right) e^{j(\gamma_3 - \gamma_2)a} \cdot A_3, \quad B_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_3}{\gamma_2} \frac{m_2}{m_3} \right) e^{j(\gamma_3 + \gamma_2)a} \cdot A_3,\tag{2.44}$$

$$B_1 = A_2 + B_2 - A_1.\tag{2.45}$$

Коэффициенты прохождения и отражения от потенциального барьера могут быть вычислены следующим образом с учетом выражений (2.15)–(2.16):

$$D = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_3^+|}{|J_1^+|} = \frac{|\gamma_3| m_1 |A_3|^2}{|\gamma_1| m_3 |A_1|^2}, \quad (2.46)$$

$$R = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_1^-|}{|J_1^+|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}; \quad (2.47)$$

Графики огибающих волновых функций электрона в структуре $GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs$ с толщиной среднего слоя в 20 атомных монслоёв (11.3 нм) для различных значений энергии электрона представлены на рис. 2.10. Графики схематично наложены на зонную диаграмму гетероструктуры, при этом начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме. Энергия электронов отсчитывается от середины запрещенной зоны узкозонного материала ($GaAs$). Тогда, поскольку середина запрещенной зоны в твердом растворе $Al_xGa_{1-x}As$ совпадает с серединой запрещенной зоны $GaAs$, потенциальный профиль данной структуры (она является симметричной) можно описать выражением:

$$U(z) = \frac{E_g(z)}{2} = \begin{cases} \frac{E_{g GaAs}}{2}, & \text{если } |z| > a \\ \frac{E_{g Al_{0.3}Ga_{0.7}As}}{2}, & \text{если } |z| < a \end{cases}. \quad (2.48)$$

Графики зависимости коэффициента прохождения от энергии электрона для этой структуры представлен на рис. 2.11.

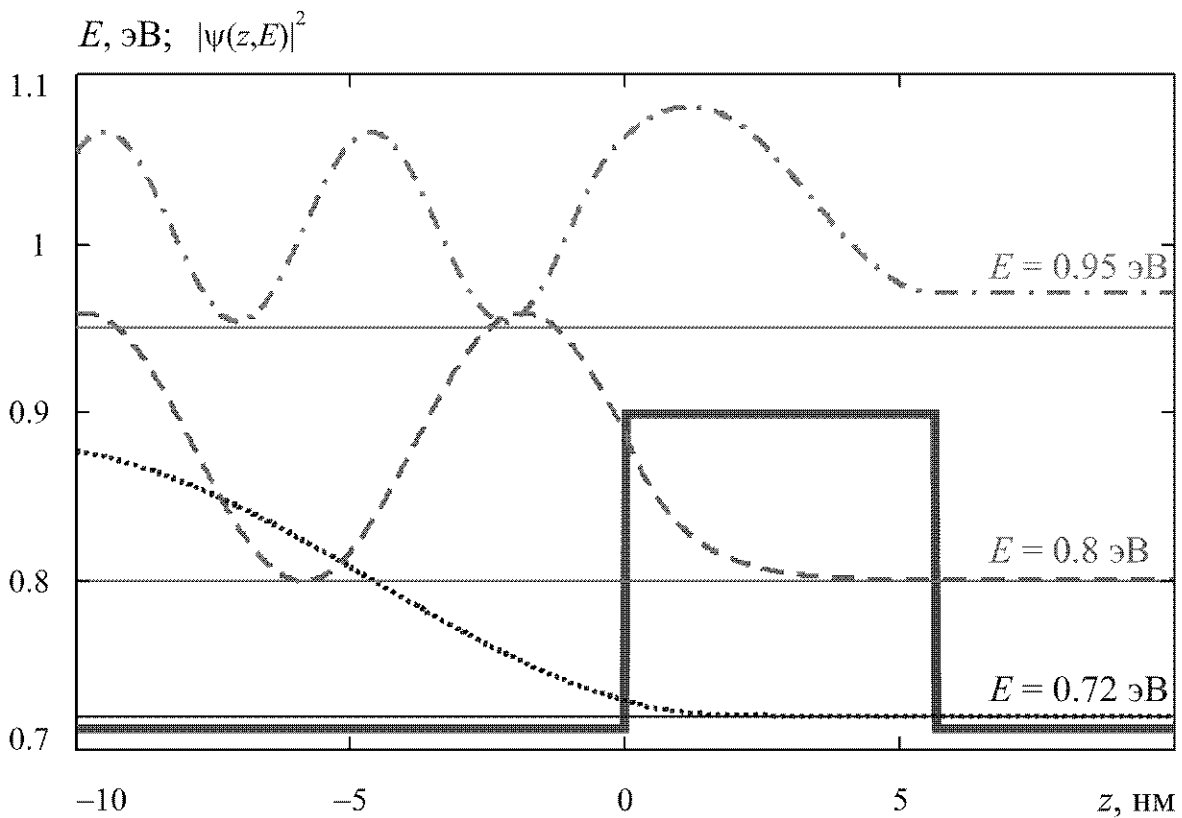


Рис. 2.10. Графики огибающих волновых функций электрона в структуре $GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs$.

Таким образом, расчеты показывают, что при достаточно тонком потенциальном барьере для значений энергии электрона $E < U_0$ имеется конечная вероятность его прохождения через потенциальный барьер из области 1 в область 3. Это явление носит название туннельного эффекта и является чисто квантово-механическим. Также следует отметить, что при энергии электрона $E > U_0$ зависимость коэффициента прохождения от энергии имеет вид квазипериодической осциллирующей функции (рис. 2.11). При этом существуют избранные значения энергии электрона, для которых вследствие интерференции электронных волн, отраженных от границ барьера, амплитуда волновой функции в области барьера будет больше, чем в других областях (рис. 2.10, штрихпунктирная кривая).

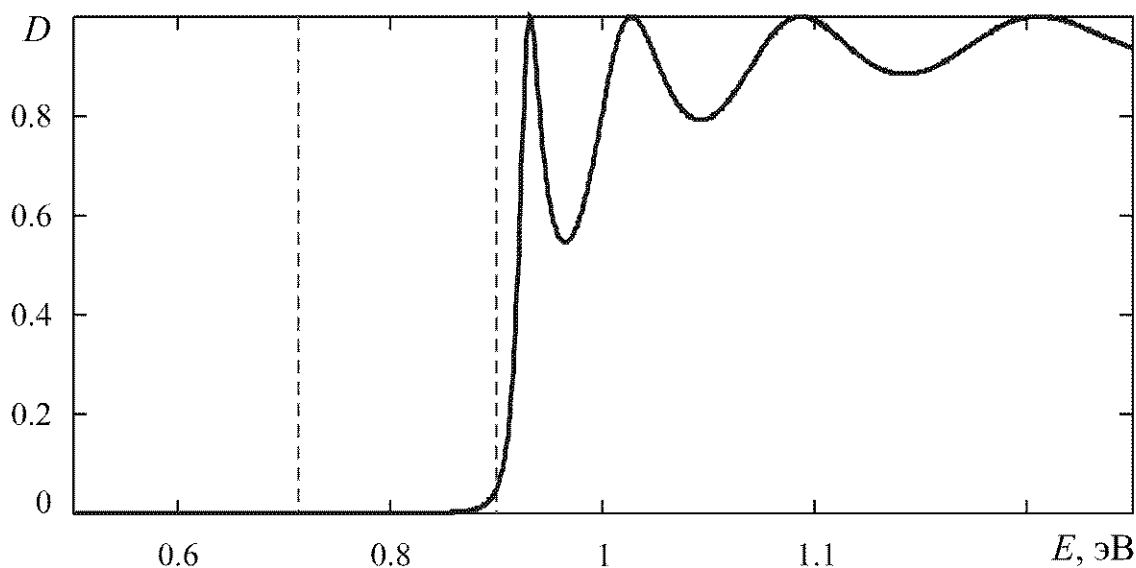


Рис. 2.11. Графики зависимости коэффициента прохождения от энергии электрона для структуры $GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs$.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из трех слоёв: $GaAs - Al_xGa_{1-x}As - GaAs$. Слои 1^й и 3^й — полубесконечные, слой 2^й — туннельно-тонкий.
2. Построить семейство графиков зависимости коэффициентов прохождения электронов из слоя 1 через слой 2 в слой 3 от энергии электрона в диапазоне от 0 до $3U_0$ для различных значений параметра x , определяющего высоту потенциального барьера, и для различных толщин слоя 2.
3. Построить огибающие волновых функций в гетероструктуре для различных значений энергии электрона, в том числе, для энергий, соответствующих минимумам и максимумам коэффициента прохождения, и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры.
4. Проиллюстрировать следующие факты:

- 1) в случае достаточно тонкого потенциального барьера для частиц с энергией, меньшей его высоты, существует конечная вероятность прохождения электрона из области 1 в область 3;
- 2) при прохождении электрона над потенциальным барьером существует конечная вероятность того, что электрон отразится от слоя 2;
- 3) существуют избранные значения энергии электрона, при которых амплитуда волновой функции в области барьера будет больше, чем в других областях.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 5.

2.4.2. Метод матриц переноса и его применение для моделирования движения электрона в сложном потенциальном рельефе

Как можно заметить из уже рассмотренных примеров, при решении задач о движении электронов в слоисто-неоднородных средах решения уравнения Шредингера записываются отдельно в каждой из областей, где потенциал $U(z)$ постоянен, в виде суперпозиции падающей и отраженной волн де Бройля, а для нахождения амплитуд этих волн используются граничные условия на интерфейсах между слоями. Такой подход позволяет легко формализовать расчет амплитуд волн де Бройля и коэффициентов отражения и прохождения в многослойных средах с использованием метода матриц переноса.

Рассмотрим структуру, состоящую из N слоёв, заключенных между полубесконечными областями, причем в каждом слое и в крайних областях потенциал $U(z)$ постоянен (рис. 2.12):

$$U(z) = \begin{cases} U_0, & \text{если } z < z_0, \\ U_i, & \text{если } z_{i-1} < z < z_i, i = 1, \dots, N, \\ U_{N+1}, & \text{если } z > z_N, \end{cases} \quad (2.49)$$

где z_k – координата границы между k -ой и $(k+1)$ -ой областями, $k = 0, \dots, N$.

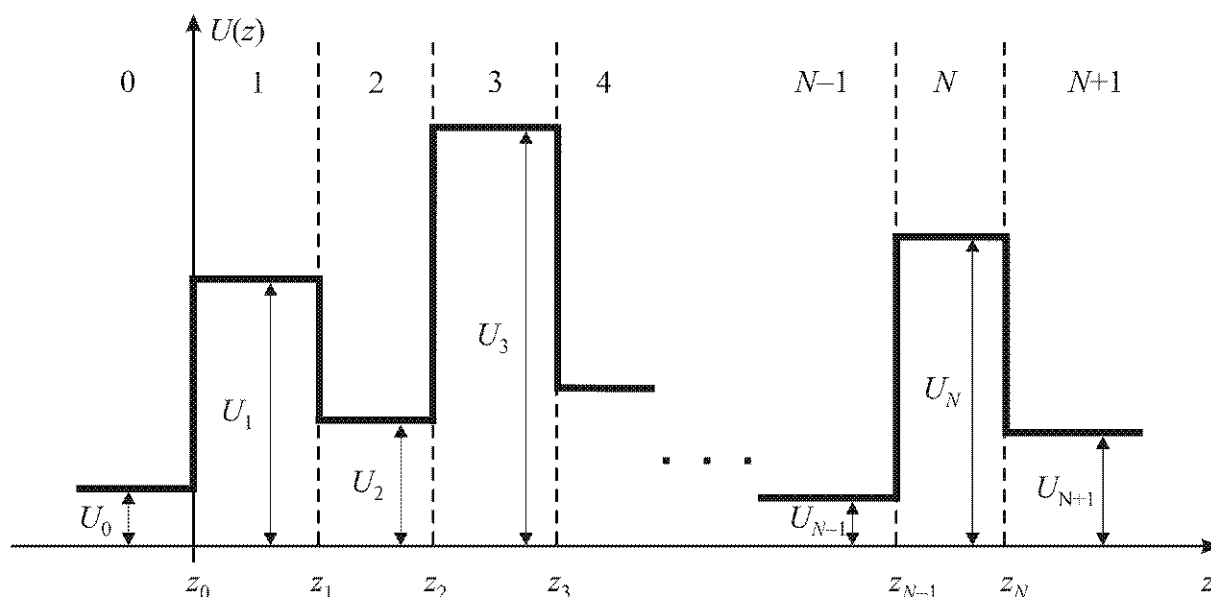


Рис. 2.12. Энергетическая диаграмма многослойной гетероструктуры.

Как и прежде, будем считать, что источник электронов находится в области 0 и бесконечно удален от слоистой структуры. Электрон движется от источника в положительном направлении оси Oz , обладая энергией E .

Решение уравнения Шредингера (2.1) для i -ой области ($i = 0, \dots, N+1$) записывается в виде:

$$\psi_i(z, E) = A_i e^{j\gamma_i z} + B_i e^{-j\gamma_i z}, \quad (2.50)$$

где A_i и B_i – амплитуды падающей и отраженной волн де Бройля в i -ой

области соответственно, $\gamma_i(E) = \sqrt{\frac{2m_i(E - U_i)}{\hbar^2}}$, m_i – эффективная масса в i -ой

области. Граничные условия (2.2) принимают вид:

$$\begin{cases} \Psi_k(z_k) = \Psi_{k+1}(z_k), \\ \frac{1}{m_k} \frac{\partial \Psi_k}{\partial z}(z_k) = \frac{1}{m_{k+1}} \frac{\partial \Psi_{k+1}}{\partial z}(z_k). \end{cases} \quad (2.51)$$

Подставляя общее решение (2.17) в граничные условия (2.18), получим систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов A_i, B_i :

$$\begin{cases} A_k e^{j\gamma_k z_k} + B_k e^{-j\gamma_k z_k} = A_{k+1} e^{j\gamma_{k+1} z_k} + B_{k+1} e^{-j\gamma_{k+1} z_k}, \\ jA_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{j\gamma_k z_k} - jB_k \frac{\gamma_k}{m_k} e^{-j\gamma_k z_k} = jA_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{j\gamma_{k+1} z_k} - jB_{k+1} \frac{\gamma_{k+1}}{m_{k+1}} e^{-j\gamma_{k+1} z_k}, \end{cases} \quad (2.52)$$

которая путем алгебраических преобразований может быть приведена к виду:

$$\begin{cases} A_{k+1} = A_k \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} + B_k \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k}, \\ B_{k+1} = A_k \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} + B_k \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k}, \end{cases} \quad (2.53)$$

или в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} A_{k+1} \\ B_{k+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{k,k+1} \cdot \begin{pmatrix} A_k \\ B_k \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

где $\mathbf{T}_{k,k+1}$ – матрица передачи волны де Бройля из области k в область $k+1$:

$$\mathbf{T}_{k,k+1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{-j(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} + \gamma_k) z_k} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\gamma_k}{\gamma_{k+1}} \frac{m_{k+1}}{m_k} \right) e^{j(\gamma_{k+1} - \gamma_k) z_k} \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Из рекуррентного соотношения (2.19), с учетом того, что по условию задачи в области $N+1$ нет встречной электронной волны (т.е. $B_{N+1} = 0$), можно записать следующую систему из двух уравнений для амплитуд волн де Бройля в полубесконечных областях до и после структуры:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{T} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

где

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{00} & \mathbf{T}_{01} \\ \mathbf{T}_{10} & \mathbf{T}_{11} \end{pmatrix} = \prod_{k=N}^0 \mathbf{T}_{k,k+1} \quad (2.57)$$

– матрица передачи волны де Бройля через всю слоистую структуру. Следует отметить, что матрица \mathbf{T} полностью определяется параметрами материалов структуры и прилегающих областей.

Коэффициенты отражения и прохождения электронной волны через структуру могут быть выражены через элементы матрицы передачи из системы уравнений (2.20):

$$R = \frac{|B_0|^2}{|A_0|^2} = \left| \frac{\mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2, \quad (2.58)$$

$$D = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{|A_{N+1}|^2}{|A_0|^2} = \frac{|\gamma_{N+1}|}{|\gamma_0|} \frac{m_0}{m_{N+1}} \left| \frac{\mathbf{T}_{11} \mathbf{T}_{00} - \mathbf{T}_{01} \mathbf{T}_{10}}{\mathbf{T}_{11}} \right|^2. \quad (2.59)$$

Таким образом, с использованием матричного метода могут быть рассчитаны коэффициенты отражения и прохождения электронных волн через слоистую структуру при задании параметров всех входящих в неё слоёв, а также амплитуды волн де Бройля в каждой точке структуры, отнесенные к амплитуде падающей на структуру электронной волны.

Пример реализации матричного метода в пакете *MathCAD* и его применения для решения задачи о движении электрона через потенциальный барьер приведен в Приложении 6. Применение матричного метода для моделирования движения электрона через многослойные структуры со сложным потенциальным рельефом обсуждается в следующих разделах.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Рассмотреть двухслойную гетероструктуру $Al_{0.15}Ga_{0.85}As$ — $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, заключенную между полубесконечными областями $GaAs$ и построить её потенциальный профиль для электронов.
2. Построить зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0 до 2 эВ.
3. Построить огибающие волновых функций в гетероструктуре для различных значений энергии электрона, в том числе, для энергий, соответствующих минимумам и максимумам коэффициента прохождения, и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры.

Примечание: при расчете использовать метод матриц переноса.

2.4.3. Моделирование движения электрона через

двухбарьерную квантоворазмерную структуру (ДБКС)

Мы уже рассмотрели задачи, касающиеся поведения частиц в системах с изолированными квантовыми ямами и потенциальными барьерами. Как уже отмечалось, современные технологии выращивания эпитаксиальных структур позволяют формировать многослойные системы со сложным потенциальным рельефом, в том числе систем со связанными квантовыми ямами. Последние интересны тем, что в них возможно формирование заданного энергетического спектра и скоростей рассеяния электронов не только путем задания формы потенциальной ямы, но и путем изменения связи между соседними квантовыми ямами. Кроме того, в ряде случаев коэффициент прохождения через многобарьерные структуры оказывается больше коэффициентов прохождения через каждый барьер в отдельности. Данный эффект возникает вследствие интерференции волн де Бройля и

носит название резонансного туннелирования через многобарьерную структуру.

Рассмотрим прохождение частицы через систему из двух потенциальных барьеров, разделенных квантовой ямой, заключенную между двумя полубесконечными областями (рис. 2.13). Как и прежде, будем считать, что источник электронов находится в области 0 и бесконечно удален от структуры. Электрон движется от источника в положительном направлении оси Oz , обладая энергией E . Для расчета коэффициента прохождения электрона и амплитуд волн де Бройля воспользуемся матричным методом:

- число слоёв в структуре $N = 3$;
- число границ в рассматриваемой системе $N + 1 = 4$;
- число областей, в которых потенциал $U(z)$ постоянен $N + 2 = 5$.

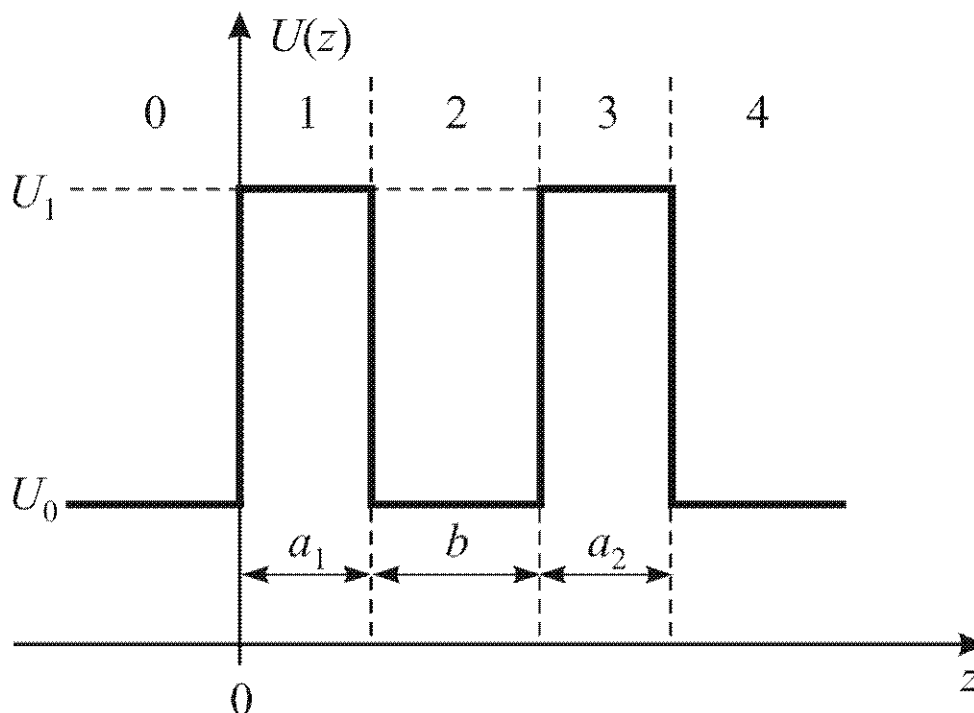


Рис. 2.13. Энергетическая диаграмма двухбарьерной квантоворазмерной гетероструктуры.

Таким образом, для описания системы необходимо задать парамет-

ры материала в 5-ти областях, а также координаты границ между областями. Эти исходные данные позволяют рассчитать 4 матрицы передачи волны де Бройля для каждой из границ с использованием выражения (2.0.) и общую матрицу передачи структуры (2.21), из которой вычисляется коэффициент прохождения (2.22). А с использованием выражений (2.19) и (2.20) рассчитываются амплитуды волн де Бройля в каждой из областей.

Результаты расчета зависимости коэффициента прохождения от энергии электронов представлены на рис. 2.14. Как следует из результатов расчетов, для существует некоторое значение энергии электрона, меньшее высоты потенциальных барьеров, определяемое толщинами квантоворазмерных слоёв, при котором коэффициент прохождения равен единице. Состояния в квантовой яме, соответствующие значениям энергии, для которых $D = 1$, называют резонансными, а наблюдаемое явление – резонансным туннелированием через структуру. Графики огибающих волновых функций электрона в рассматриваемой структуре для различных значений энергии электрона, совмещенные с потенциальным рельефом гетероструктуры, представлены на рис. 2.15.

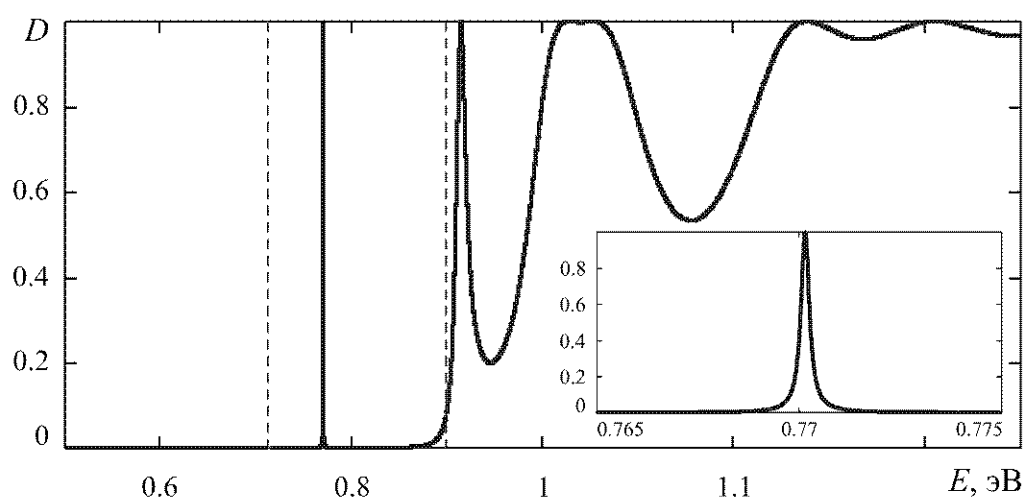


Рис. 2.14. Графики зависимости коэффициента прохождения от энергии электрона для структуры $GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs$.

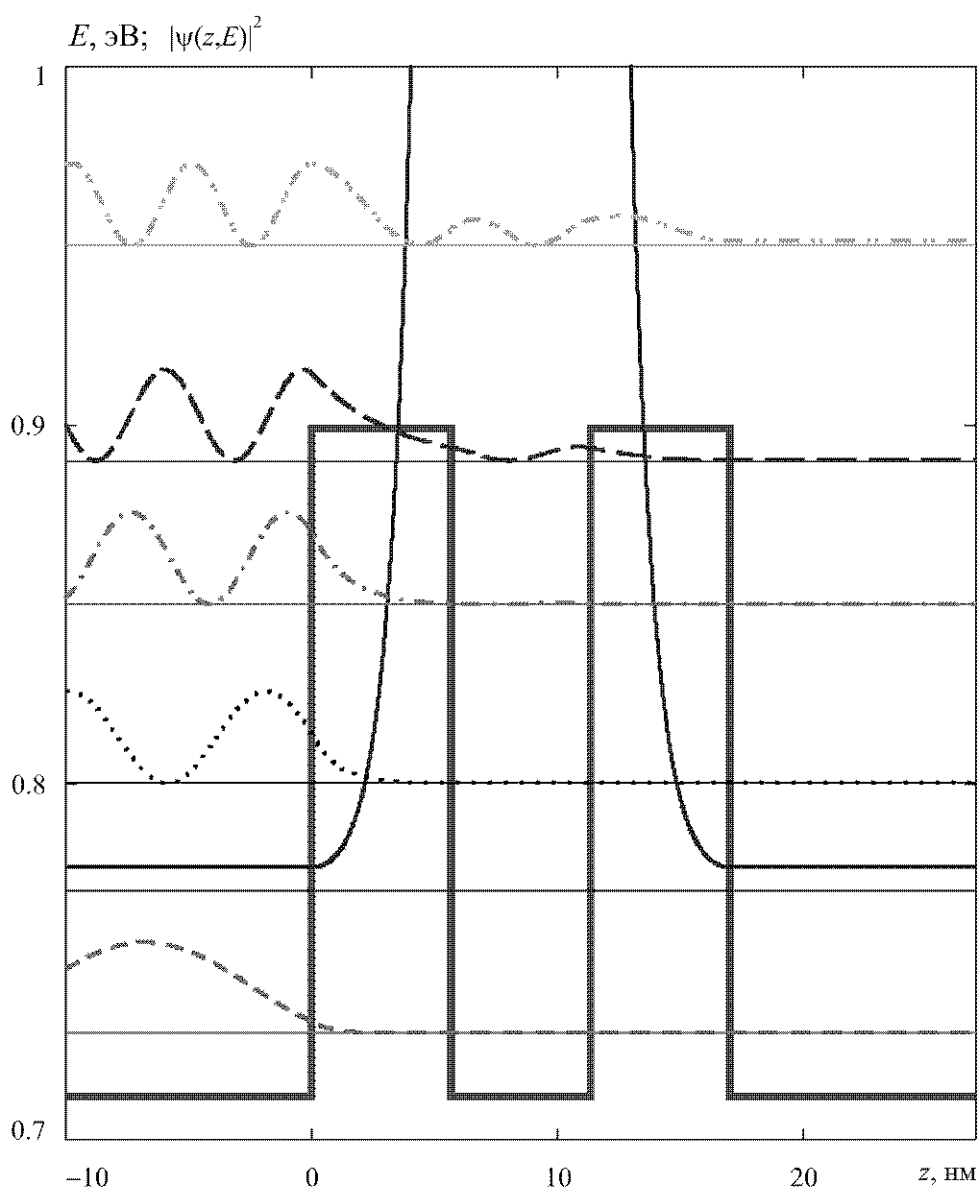


Рис. 2.15. Графики огибающих волновых функций электрона в структуре $GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs - Al_{0.3}Ga_{0.7}As - GaAs$.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из трех нанослоёв:
 - 1) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 2) $GaAs$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 3) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 заключенную между полубесконечными областями $GaAs$.

2. Построить график зависимости коэффициента прохождения электронов через такую структуру от энергии электрона в диапазоне от 0.7 до 1.5 эВ.
3. Определить значение энергии резонансного туннелирования через структуру.
4. Построить огибающие волновых функций в гетероструктуре для различных значений энергии электрона, в том числе, для энергии резонансного туннелирования, и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 7.

2.4.4. Моделирование движения электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру

Аналогично, методом матриц переноса легко может быть проанализирована и трехбарьерная (а, вообще говоря, и многобарьерная) структура. Результаты расчета зависимости коэффициента прохождения от энергии электронов для трехбарьерной структуры представлены на рис. 2.16.

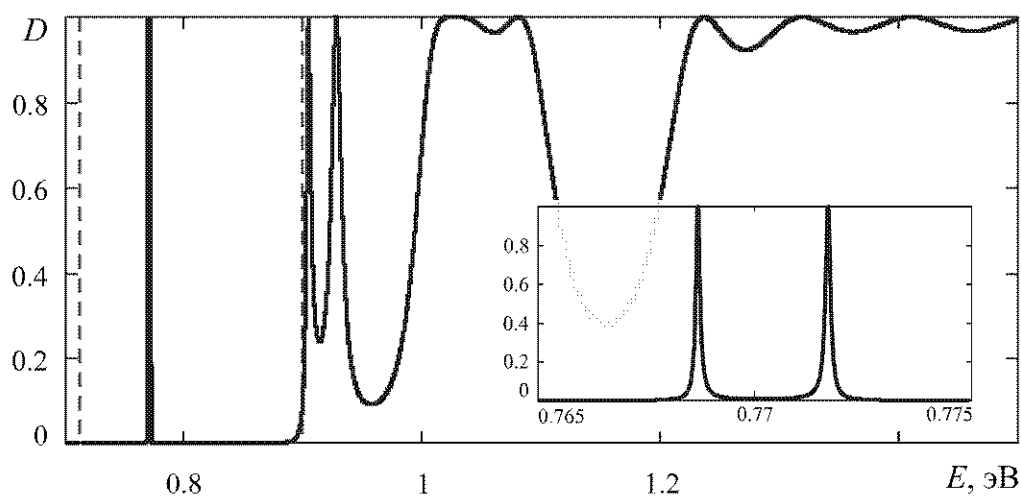


Рис. 2.16. Графики зависимости коэффициента прохождения от энергии электрона для трехбарьерной квантоворазмерной гетероструктуры.

Задания для компьютерного моделирования.

1. Рассмотреть гетероструктуру, состоящую из пяти нанослоёв:
 - 1) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 2) $GaAs$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 3) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 4) $GaAs$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,
 - 5) $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) толщиной 10 атомных монослоёв,заклоченную между полубесконечными областями $GaAs$.
2. Построить график зависимости коэффициента прохождения электронов через такую структуру от энергии электрона в диапазоне от 0.7 до 1.5 эВ.
3. Определить значения энергии резонансного туннелирования через структуру.
4. Построить огибающие волновых функций в гетероструктуре для различных значений энергии электрона, в том числе, для энергий резонансного туннелирования, и схематически наложить эти графики на потенциальный профиль структуры.

Примечание: пример программы для среды MathCAD приведен в Приложении 8.

2.4.5. Моделирование движения электрона при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв

Очевидно, что при создании различных электронных приборов необходимо реализовать управление энергетическим спектром электронов с помощью различного рода внешних воздействий. Наиболее часто для такого управления используют электрическое поле.

При приложении электрического поля к многослойной гетероструктуре энергетические зоны искривляются и зависимость $U(z)$ будет отли-

чатая от ступенчатой формы, изображенной, например, на рис. 2.17, *а*. В простейшем случае однородного электрического поля, потенциал $U(z)$ в структуре с потенциальным барьером может быть представлен в виде (рис. 2.17, *б*):

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1}, & \text{если } z < 0, \\ E_{c2} - \frac{V}{a} \cdot z, & \text{если } 0 < z < a, \\ E_{c3}, & \text{если } z > a, \end{cases} \quad (2.60)$$

где a – ширина потенциального барьера, V – прикладываемая к барьеру разность потенциалов. В данной модели предполагается, что падение напряжения полностью происходит в области барьера.

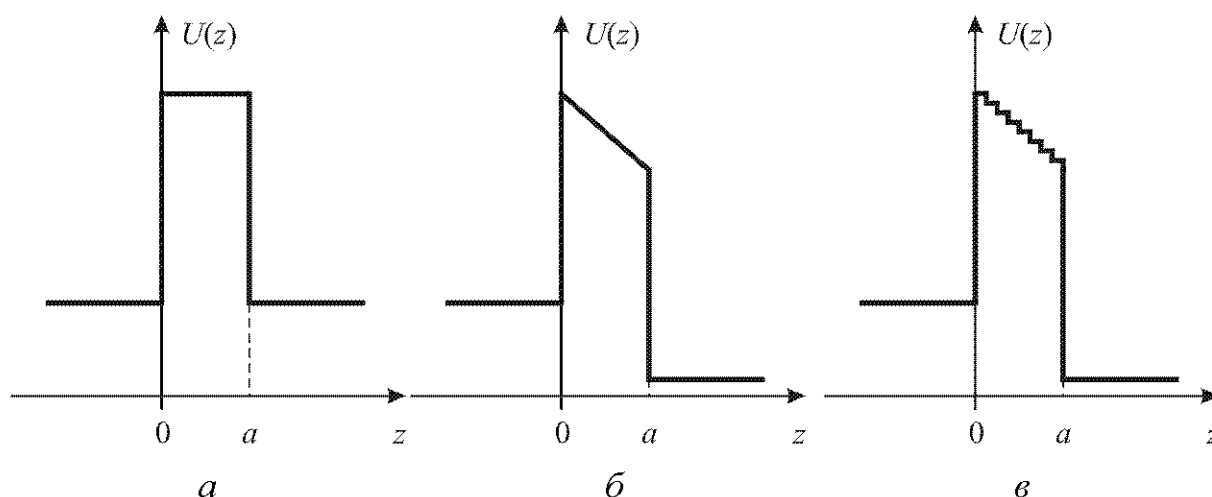


Рис. 2.17. Энергетическая диаграмма прямоугольного потенциального барьера (*а*), при приложении к нему электрического поля (*б*) и представление потенциала в виде ступенчатой функции (*в*).

Уравнение Шредингера (2.1) с потенциалом вида (2.23) является неоднородным. Однако, разбивая рассматриваемую пространственную область на N столь малых отрезков, что в каждом из них потенциал $U(z)$ можно считать неизменным, можно решать уравнение матричным мето-

дом, заменяя кусочно-непрерывную функцию $U(z)$ (рис. 2.17, б) ступенчатой (рис. 2.17, в):

$$U(z) = \begin{cases} E_{c1}, & \text{если } z < 0, \\ E_{c2} - \frac{V}{a} \cdot \frac{i}{N}, & \text{если } i \cdot \frac{a}{N} < z < (i+1) \cdot \frac{a}{N}, i = 0, 1, \dots, N-1, \\ E_{c3}, & \text{если } z > a, \end{cases} \quad (2.61)$$

Данный подход позволяет решать задачи о движении электрона через потенциальный рельеф произвольной формы, с одной стороны, не прибегая к численному решению краевой задачи (что является вычислительно ёмким процессом), а с другой стороны, получая достаточно строгое решение.

На рис. 2.18 представлен коэффициент прохождения электронов через потенциальный барьер при наличии (пунктирная линия) и отсутствии внешнего электрического поля. Как видно из рисунка, вероятность туннелирования электрона при приложении электрического поля увеличивается, что обусловлено уменьшением площади потенциального барьера.

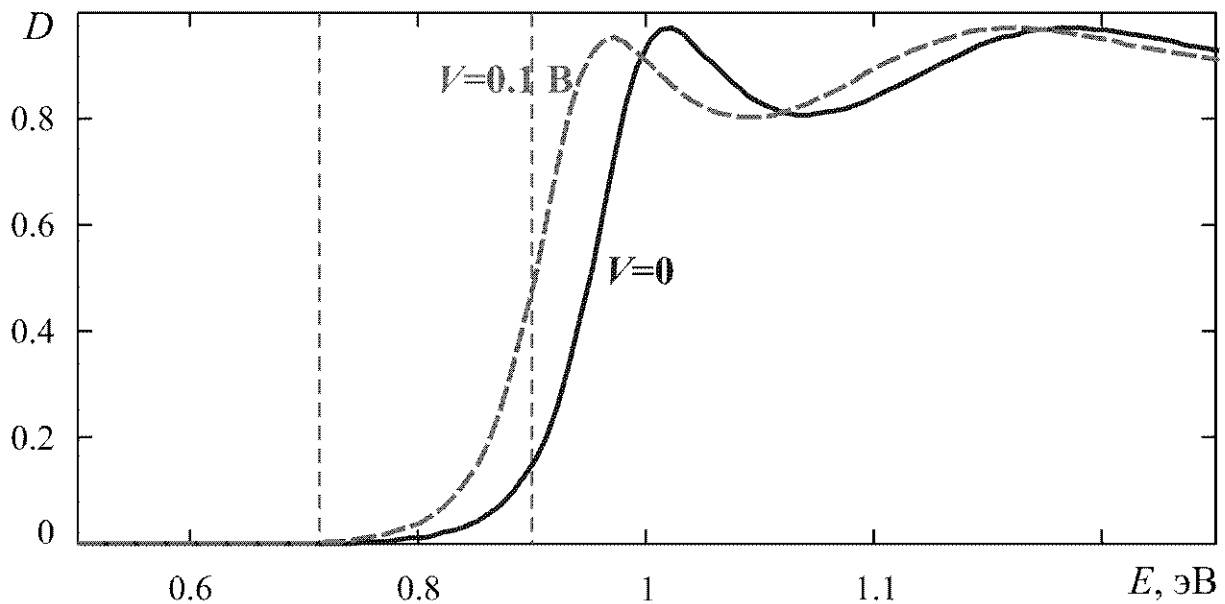


Рис. 2.18. Коэффициент прохождения электронов через потенциальный барьер при наличии (пунктирная линия) и отсутствии внешнего электрического поля.

На рис. 2.18 представлен коэффициент прохождения электронов через двухбарьерную квантоворазмерную структуру при наличии (пунктирная линия) и отсутствии внешнего электрического поля. Как видно из рисунка энергия резонансного тунелирования электрона при приложении электрического поля уменьшается.

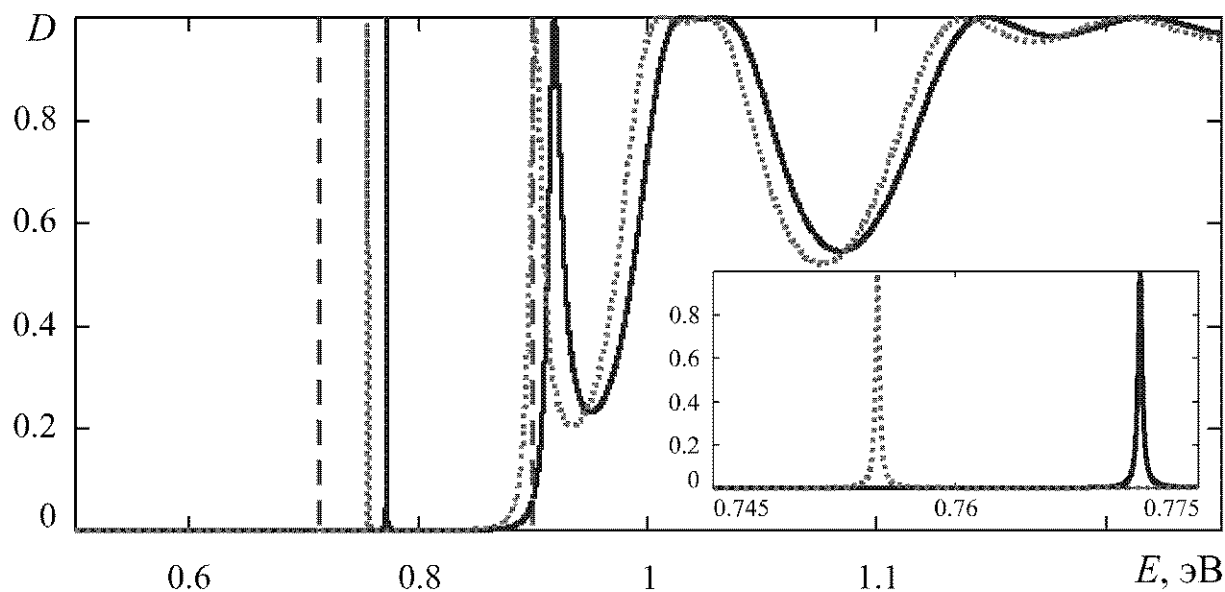


Рис. . 2.19. Коэффициент прохождения электронов через ДБКС при наличии (пунктирная линия) и отсутствии внешнего электрического поля

Задания для компьютерного моделирования.

1. Разработать программу для моделирования движения электрона в слоистых гетероструктурах при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв.
2. Исследовать изменение графиков огибающих волновых функций и коэффициента прохождения электронов в одно-, двух- и трехбарьерной структурах при увеличении приложенного к структуре постоянного электрического поля.
3. Провести сравнение результатов расчетов, проведенных с использованием предложенного метода при отсутствии внешнего электрического поля.

ского поля, с ранее полученными результатами. Сделать вывод о максимально допустимом шаге разбиения вдоль оси координат, перпендикулярной плоскостям слоёв.

Примечание: пример программы для среды MathCAD для моделирования движения электрона вблизи потенциального барьера при приложении постоянного электрического поля приведен в Приложении 9.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В учебном пособии описаны методики расчета квантоворазмерных структур и приведены примеры их реализации в математическом пакете *MathCAD*. Также, показано, как с помощью данного пакета можно наглядно проиллюстрировать известные теоретические факты из физики рассматриваемых структур. Хочется надеяться, что данное учебное пособие поможет читателю в разработке компьютерных программ, моделирующих и иллюстрирующих рассматриваемые физические процессы и явления.

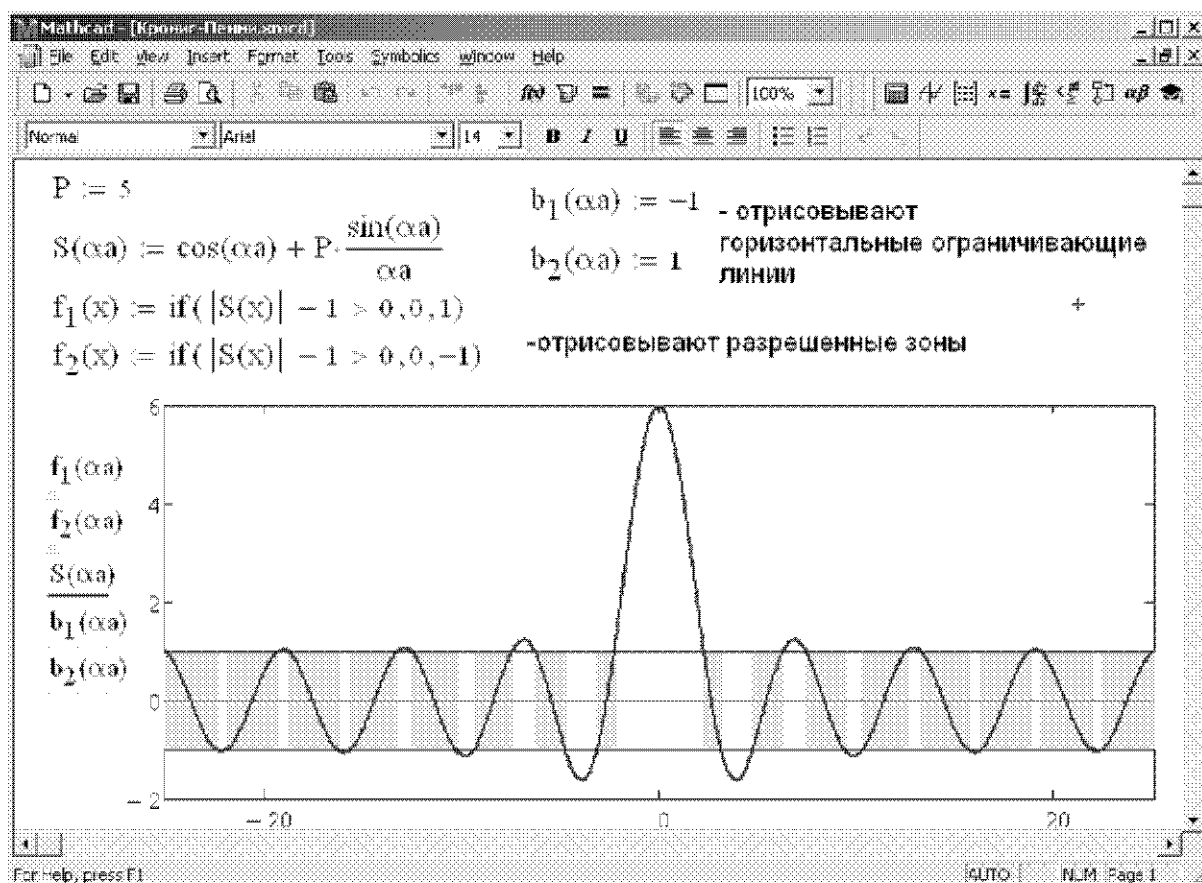
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Келдыш Л.В. О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла // ФТТ. 1962. Т. 4. С. 2265–2267.
2. Esaki L., Tsu R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors // IBM J. Res. Develop. 1970. Vol. 14. P. 61–65.
3. Esaki L. A superlattice — periodic array of heterojunctions // Proc. of Intern. Conf. on Phys. and Chem. of Semiconductor. — Budapest, 1970. Vol. 1. P. 13–24.
4. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники: Учебное пособие. – М.: Университетская книга; Логос; Физматкнига, 2006. – 496 с.
5. Physics of Quantum Electron Devices / Ed. By F. Capasso. Berlin: Springer, 1990.
6. Brown E.R. Resonant tunneling in high-speed double-barrier diodes // Hot Electrons in Semiconductor Heterostructures / Ed. By J.Shah. Boston: Academic Press, 1991.
7. Ozbay E., Bloom D.M., Diamond S.K. Resonant tunneling in Semiconductors: Physics and Applications. New York: Plenum, 1991.
8. Тагер А.С. Размерные квантовые эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их применения в электронике

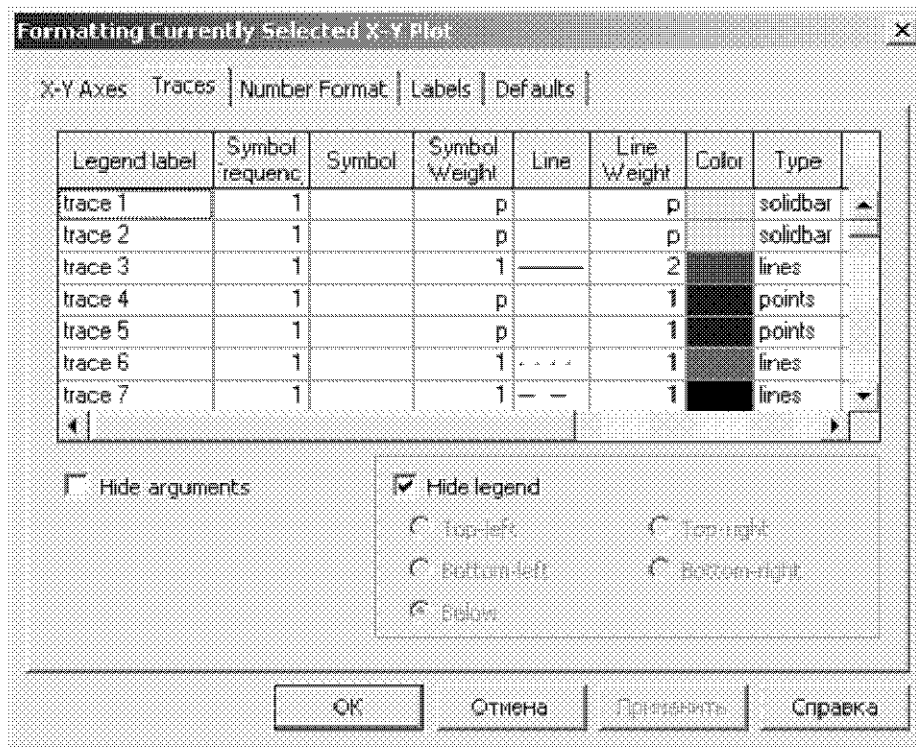
- СВЧ. Ч. I. Физические основы // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1987. Вып. 9 (403). С. 21–34.
9. Тагер А.С. Размерные квантовые эффекты в субмикронных полупроводниковых структурах и перспектива их применения в электронике СВЧ. Ч. I. Резонансно-туннельные диоды и транзисторы // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1988. Вып. 2 (406). С. 17–33.
10. Иогансен Л.В. О возможности резонансного прохождения электронов в кристаллах через систему барьеров // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 207–218.
11. Иогансен Л.В. О резонансном туннелировании электронов в кристаллах // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 270–277.
12. Иогансен Л.В. Тонкопленочные электронные интерферометры // УФН. 1965. Т. 86. С. 175–179.
13. Tsu R., Esaki L. Tunneling in a finite superlattice // Appl. Phys. Lett. 1973. Vol. 22, no. 11. P. 562–564.
14. Chang L., Esaki L., Tsu R. Resonant tunneling in semiconductors double barrier // Appl. Phys. Lett. 1974. Vol. 24, no. 12. P. 593–595.
15. Блэкмор Дж. Физика твердого тела. М.: Мир, 1988. 608 с.
16. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981. 574 с.
17. Китель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 792 с.
18. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. Ч. 1. 399 с. Ч. 2. 422 с.
19. Баранов Л.И. Элементы теории полупроводников. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1976. 69 с.
20. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). – М.: «Наука», 1973.

ПРИЛОЖЕНИЯ

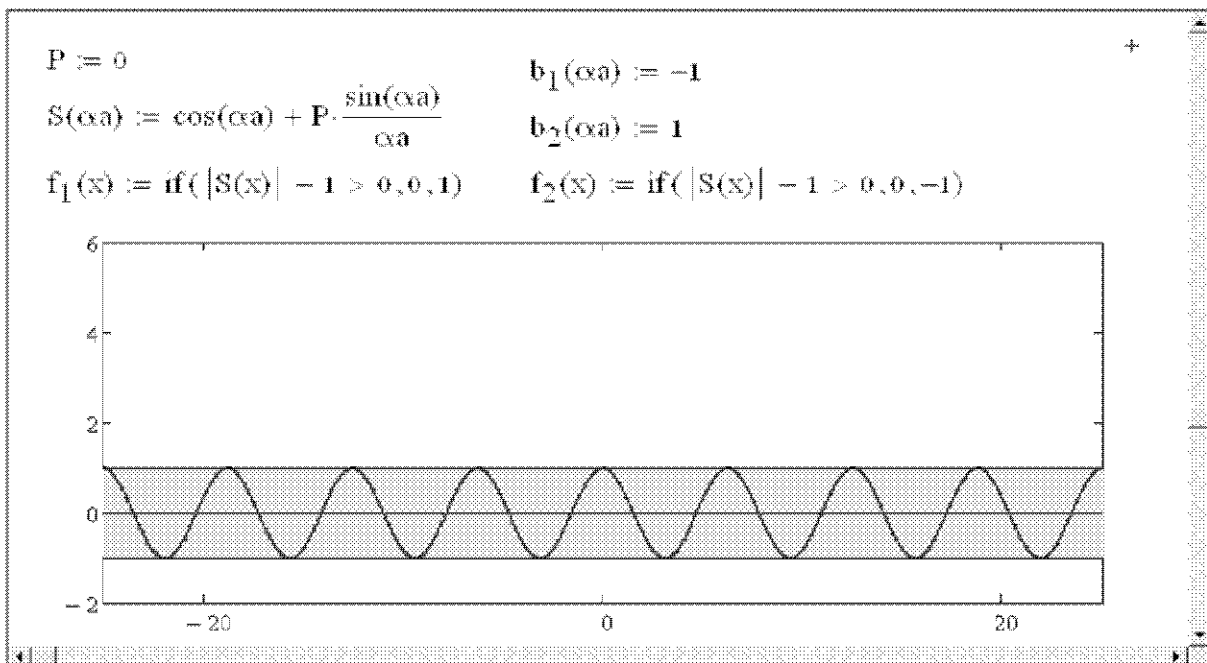
Приложение 1. Программа для моделирования энергетического спектра электрона в твердом теле



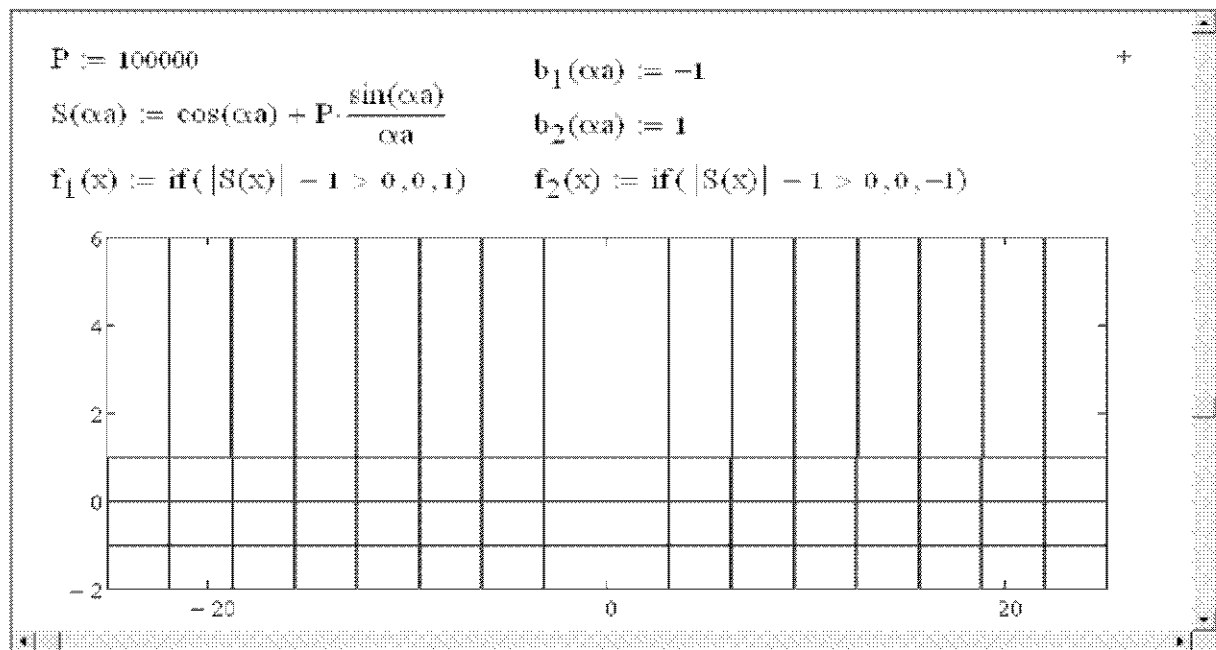
Функция S для заданного значения параметра P отрисовывается на графике красной линией. Для задания горизонтальных ограничивающих линий введены функции $b_1 = -1$ и $b_2 = 1$. Для отрисовки разрешенных зон введены функции f_1 и f_2 и используется тип графика «solidbar»:



В случае совершенно свободного электрона ($P = 0$) энергия электрона может принимать любые значения:



В случае совершенно непрозрачных стенок потенциальной ямы ($P = \infty$) разрешенные зоны вырождаются в дискретные энергетические уровни:



Приложение 2. Программа для моделирования энергетического спектра электрона энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме с бесконечно высокими стенками

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и квантованных уровней энергии в прямоугольной квантовой яме с бесконечно высокими стенками. Материал ямы – *GaAs*. Ширина ямы – 20 атомных монослоёв (11.31 нм).

Основные константы

Масса электрона $m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$

Заряд электрона $q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$

Постоянная Планка с чертой $\hbar := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$

Свойства соединения $Al_x Ga_{1-x} As$

$m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$ (Г - минимум)

$E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x^2) \cdot q_e$

$a_0(x) := (0.36533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ -постоянная решетки

Одиночная квантовая яма с бесконечно высокими стенками

Условия задачи:

Полупроводниковый материал ямы: $x := 0.0$ $m_{nA} := m_n(x)$

Ширина квантовой ямы - 20 периодов решетки

$a := 20 \cdot a_0(x)$ $a \cdot 10^9 = 11.3066$

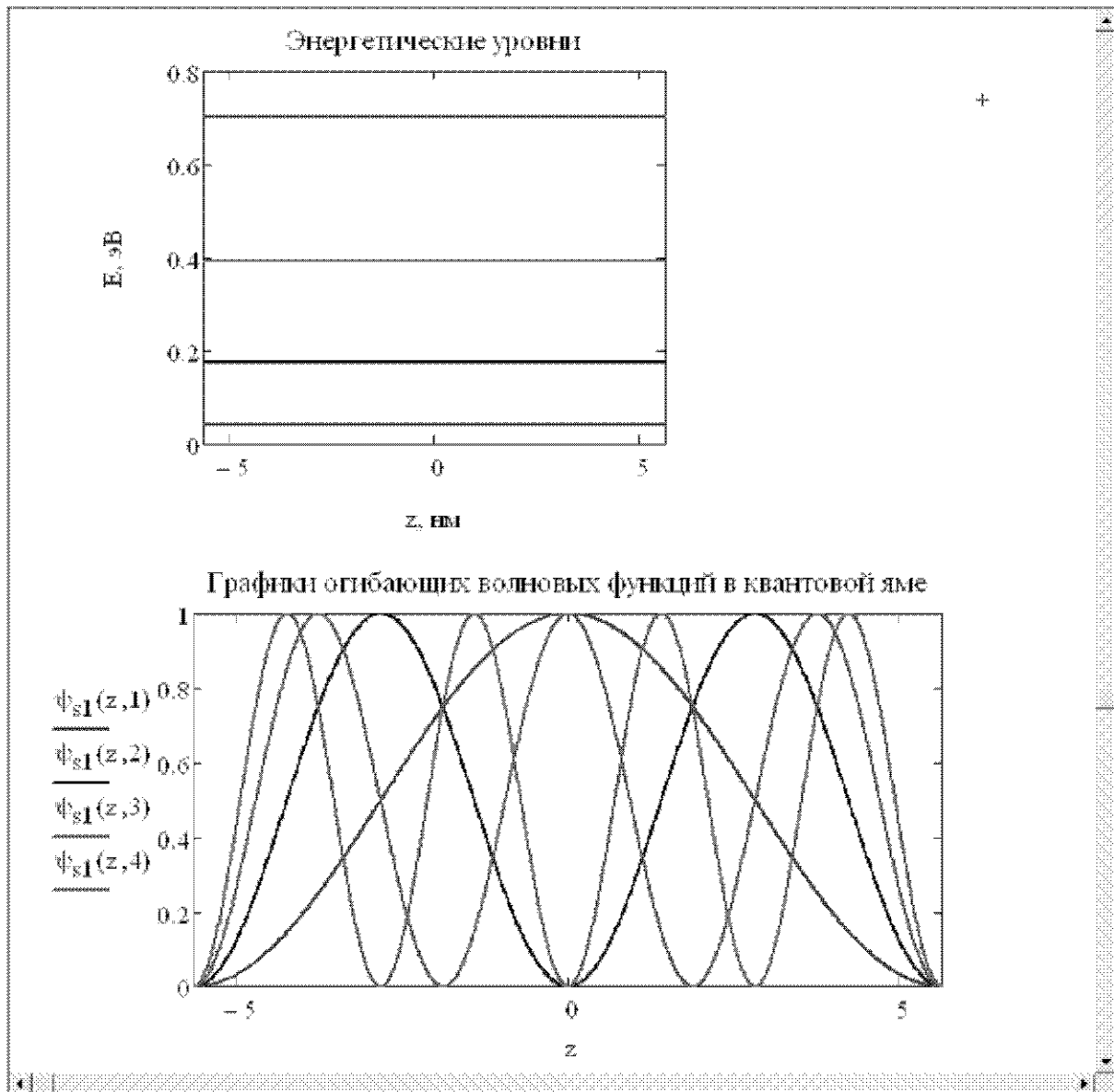
Аналитически полученные уровни квантования в яме: $\nu := 1, 2, \dots, 10$

$E(\nu) := \frac{\hbar^2}{2m_{nA}} \cdot \left(\frac{\nu \cdot \pi}{a}\right)^2$ $k(\nu) := \frac{\nu \cdot \pi}{a}$ $E_{эВ}(\nu, z) := \frac{E(\nu)}{q_e}$

Аналитическое решение уравнения Шредингера для волновой функции в яме:

$\psi_s(z, \nu) := \text{if}(\text{mod}(\nu, 2) \neq 0, \cos(k(\nu) \cdot z), \sin(k(\nu) \cdot z))$

$\psi_{s1}(z, \nu) := \left(\left| \psi_s(z \cdot 10^{-9}, \nu) \right| \right)^2$



Приложение 3. Программа для моделирования энергетического спектра электрона энергетического спектра электрона в одномерной квантовой яме со стенками конечной высоты

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и квантованных уровней энергии в прямоугольной квантовой яме со стенками конечной высоты. Квантовая яма образована слоем *GaAs* толщиной 20 атомных слоёв (11.31 нм), заключенным между полубесконечными слоями *Al_{0.3}Ga_{0.7}As*. Для определения разрешенных значений энергии электрона используется графический метод.

$j := \sqrt{-1} +$

Квантовая яма со стенками конечной высоты

Условия задачи:

Полупроводниковый материал квантовой ямы:	Полупроводниковый материал барьеров:
$x_A := 0$	$x_B := 0.3$
$m_A := m_n(x_A)$	$m_B := m_n(x_B)$

Ширина квантовой ямы - 20 периодов решетки

$a := 20 \cdot a_0(x_A) \cdot 10^9 = 11.3066$

Зонная диаграмма структуры (в электрон-вольтах, энергия отсчитывается от дна зоны проводимости в яме)

$V := \frac{E_g(x_B) - E_g(x_A)}{2}$	$V_{эВ} := \frac{V}{q_e}$	высота потенциального барьера
--------------------------------------	---------------------------	-------------------------------

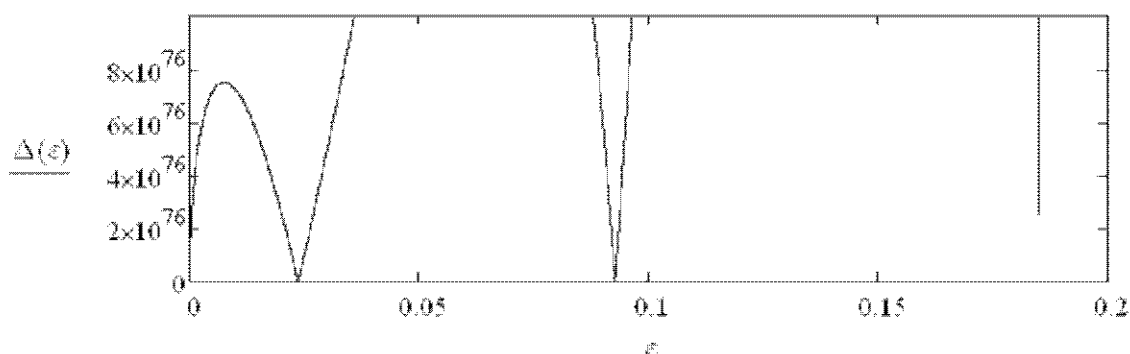
$E_c(z) := \text{if}\left(|z| < \frac{a}{2}, 0, V_{эВ}\right)$ $U(z) := E_c(z) \cdot q_e$

$\gamma(E_z) := \frac{\sqrt{2m_A \cdot E_z}}{h}$	$\beta(E_z) := \frac{\sqrt{2m_B \cdot (V - E_z)}}{h}$
--	---

$$D(E) := \begin{pmatrix} e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & -j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2} & 0 \\ -e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & -e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & -e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & 0 \\ \frac{\beta(E)}{m_B} \cdot e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} & -\frac{j \cdot \gamma(E)}{m_A} \cdot e^{-j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & \frac{j \cdot \gamma(E)}{m_A} \cdot e^{j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & 0 \\ 0 & e^{j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & e^{-j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & -e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} \\ 0 & \frac{j \cdot \gamma(E)}{m_A} \cdot e^{j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & -\frac{j \cdot \gamma(E)}{m_A} \cdot e^{-j \cdot \gamma(E) \cdot \frac{a}{2}} & \frac{\beta(E)}{m_B} \cdot e^{-\beta(E) \cdot \frac{a}{2}} \end{pmatrix}$$

Нули определителя ищутся графически.

$$\varepsilon := 0, 0.00001 \dots 0.2 \quad \Delta(E) := \left| D(E \cdot q_e) \right|$$



Из графика зависимости определителя системы от энергии электрона можно определить приближенные значения разрешенных энергий электрона в квантовой яме:

$$E_1 := 0.0236q_e \quad E_2 := 0.09266 \cdot q_e \quad E_3 := 0.18521q_e$$

$$A_1(E) := 3$$

$$A_2(E) := A_1(E) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(1 - j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_A}{m_B} \right) \cdot e^{(j \cdot \gamma(E) - \beta(E)) \cdot \frac{a}{2}}$$

$$B_2(E) := A_1(E) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(1 + j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_A}{m_B} \right) \cdot e^{-(j \cdot \gamma(E) + \beta(E)) \cdot \frac{a}{2}}$$

$$B_3(E) := A_1(E) \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \left(1 - j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_A}{m_B} \right) \cdot e^{j \cdot \gamma(E) \cdot a} + \frac{1}{2} \cdot \left(1 + j \cdot \frac{\beta(E)}{\gamma(E)} \cdot \frac{m_A}{m_B} \right) \cdot e^{-j \cdot \gamma(E) \cdot a} \right]$$

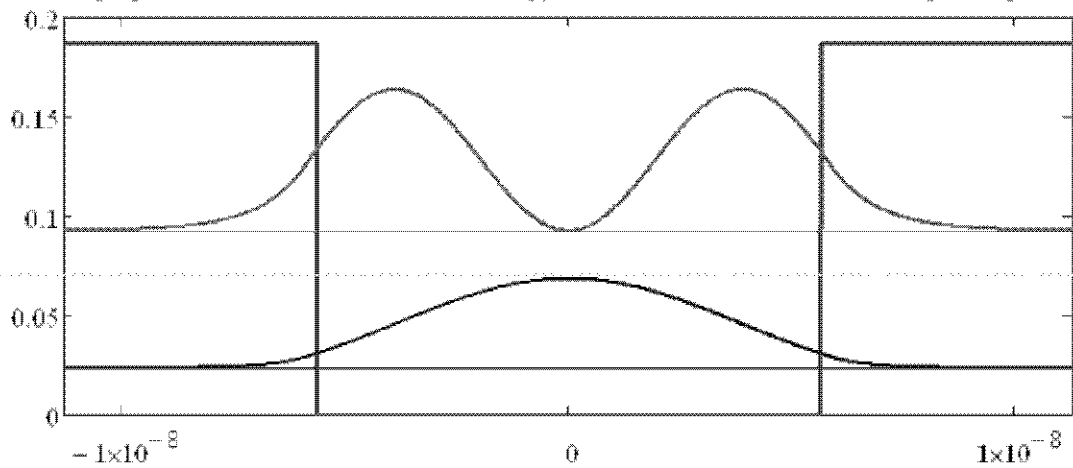
$$\psi_1(E, z) := A_1(E) \cdot e^{\beta(E) \cdot z}$$

$$\psi_2(E, z) := A_2(E) \cdot e^{j \cdot \gamma(E) \cdot z} + B_2(E) \cdot e^{-j \cdot \gamma(E) \cdot z}$$

$$\psi_3(E, z) := B_3(E) \cdot e^{-\beta(E) \cdot z}$$

$$\Psi(E, z) := \text{if} \left[z < -\frac{a}{2}, (|\psi_1(E, z)|)^2, \text{if} \left[z > \frac{a}{2}, (|\psi_3(E, z)|)^2, (|\psi_2(E, z)|)^2 \right] \right]$$

Графики отгибающих волновых функций, совмещенных с пот. рельефом



Приложение 4. Программа для моделирования движения электрона вблизи потенциальной ступеньки

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона для потенциальной ступеньки, образованной гетеропереходом $GaAs - Al_{0.4}Ga_{0.6}As$.

Свойства соединения $Al_x Ga_{1-x} As$ +

$m_{II}(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$ Γ - минимум

$E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x^2) \cdot q_e$

$a_0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ постоянная решетки

Движение электрона вблизи потенциальной ступеньки $j := \sqrt{-1}$

$x_1 := 0$ $E_{g1} := E_g(x_1)$ $m_1 := m_{II}(x_1)$

$x_2 := 0.4$ $E_{g2} := E_g(x_2)$ $m_2 := m_{II}(x_2)$

$U_0 := \frac{E_{g2} - E_{g1}}{2} \cdot \frac{U_0}{q_e} = 0.2494$ $U(z) := \text{if}\left(z < 0, 0, \frac{U_0}{q_e}\right)$

$U(z)$

$\gamma_1(E) := \sqrt{\frac{2m_1 \cdot E}{\hbar^2}}$ $\gamma_2(E) := \sqrt{\frac{2m_2 \cdot (E - U_0)}{\hbar^2}}$

$A_1(E) := 0.08$ $B_2(E) := 0$

$B_1(E) := A_1(E) \cdot \frac{\gamma_1(E) - \gamma_2(E)}{\gamma_1(E) + \gamma_2(E)}$

$A_2(E) := A_1(E) \cdot \frac{2\gamma_1(E)}{\gamma_1(E) + \gamma_2(E)}$

$\psi_1(E, z) := A_1(E) \cdot e^{j \cdot \gamma_1(E) \cdot z} + B_1(E) \cdot e^{-j \cdot \gamma_1(E) \cdot z}$

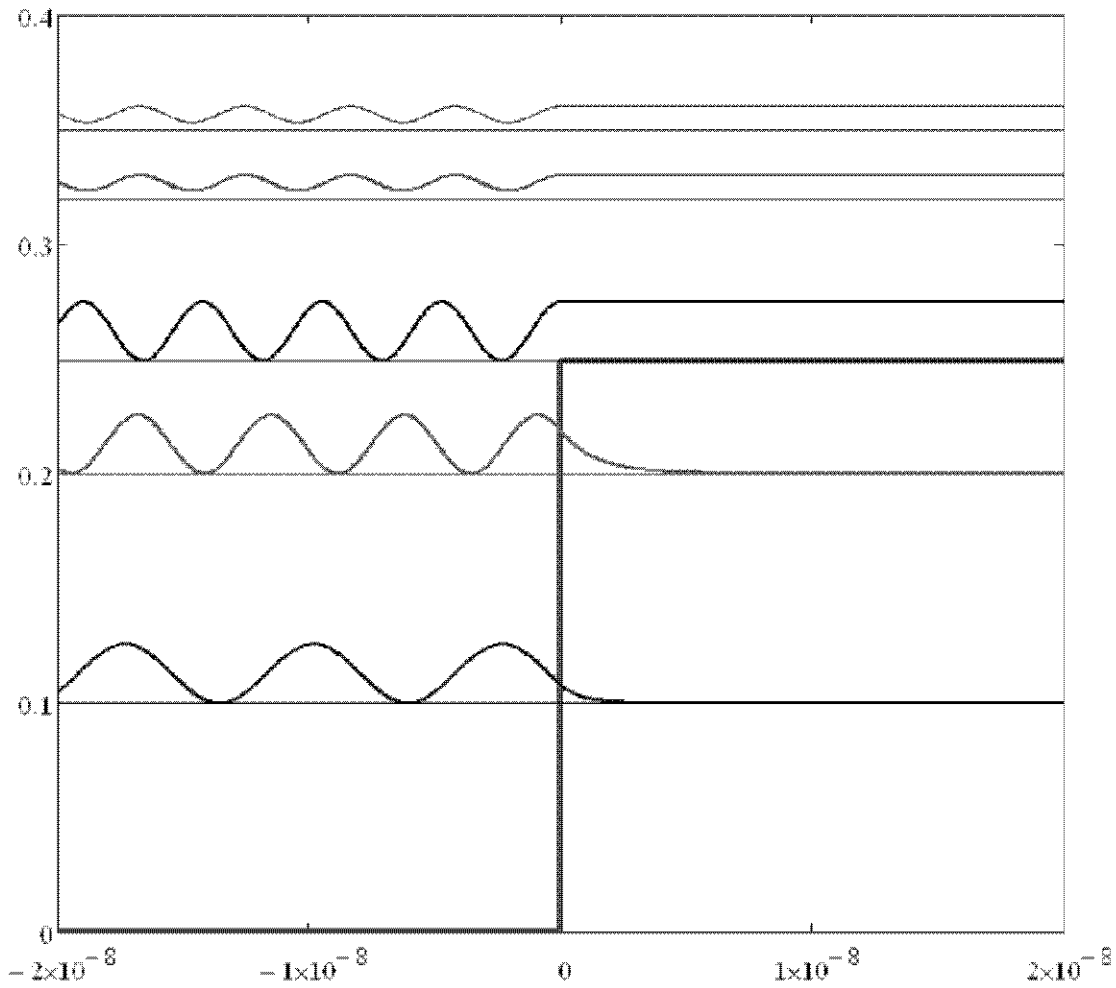
$\psi_2(E, z) := A_2(E) \cdot e^{j \cdot \gamma_2(E) \cdot z}$

$\Psi(E, z) := \text{if}\left[z < 0, (|\psi_1(E, z)|)^2, (|\psi_2(E, z)|)^2\right]$

$E_1 := 0.1 \cdot q_e$ $E_2 := 0.2 \cdot q_e$ $E_3 := U_0$ $E_4 := 0.32 \cdot q_e$ $E_5 := 0.35 \cdot q_e$

$\delta_1 := \frac{E_1}{q_e}$ $\delta_3 := \frac{E_3}{q_e}$ $\delta_2 := \frac{E_2}{q_e}$ $\delta_4 := \frac{E_4}{q_e}$ $\delta_5 := \frac{E_5}{q_e}$

Графики отгибающихся волновых функций, совмещенные с пот. рельефом

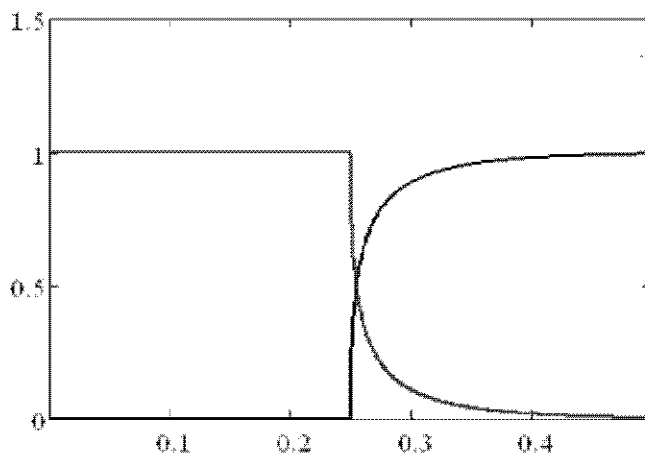


Коэффициент отражения (комплексный)

$$R(E) := \frac{(\gamma_1(E) - \gamma_2(E))^2}{(\gamma_1(E) + \gamma_2(E))^2}$$

Коэффициент прохождения (комплексный)

$$D(E) := \text{if} \left[E < U_0, 0, \frac{4\gamma_1(E)\gamma_2(E)}{(\gamma_1(E) + \gamma_2(E))^2} \right]$$



Приложение 5. Программа для моделирования движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и коэффициента прохождения электронов через прямоугольный потенциальный барьер. Потенциальный барьер образован слоем $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ толщиной 20 атомных слоёв (11.31 нм), заключенным между полубесконечными слоями $GaAs$.

Основные константы

Масса электрона $m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$

Заряд электрона $q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$

Постоянная Планка с чертой $\hbar := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$

Свойства соединения $Al_x Ga_{1-x} As$

$m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$ Γ -минимум

$E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x^2) \cdot q_e$

$a_0(x) := (0.356533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$ постоянная решетки

Движение электрона через симметричный потенциальный барьер конечной толщины

$x_1(x) := 0$ $E_{g1}(x) := E_g(x_1(x))$ $m_1(x) := m_n(x_1(x))$ $j := \sqrt{-1}$

$x_2(x) := x$ $E_{g2}(x) := E_g(x_2(x))$ $m_2(x) := m_n(x_2(x))$

$x_3(x) := 0$ $E_{g3}(x) := E_g(x_3(x))$ $m_3(x) := m_n(x_3(x))$

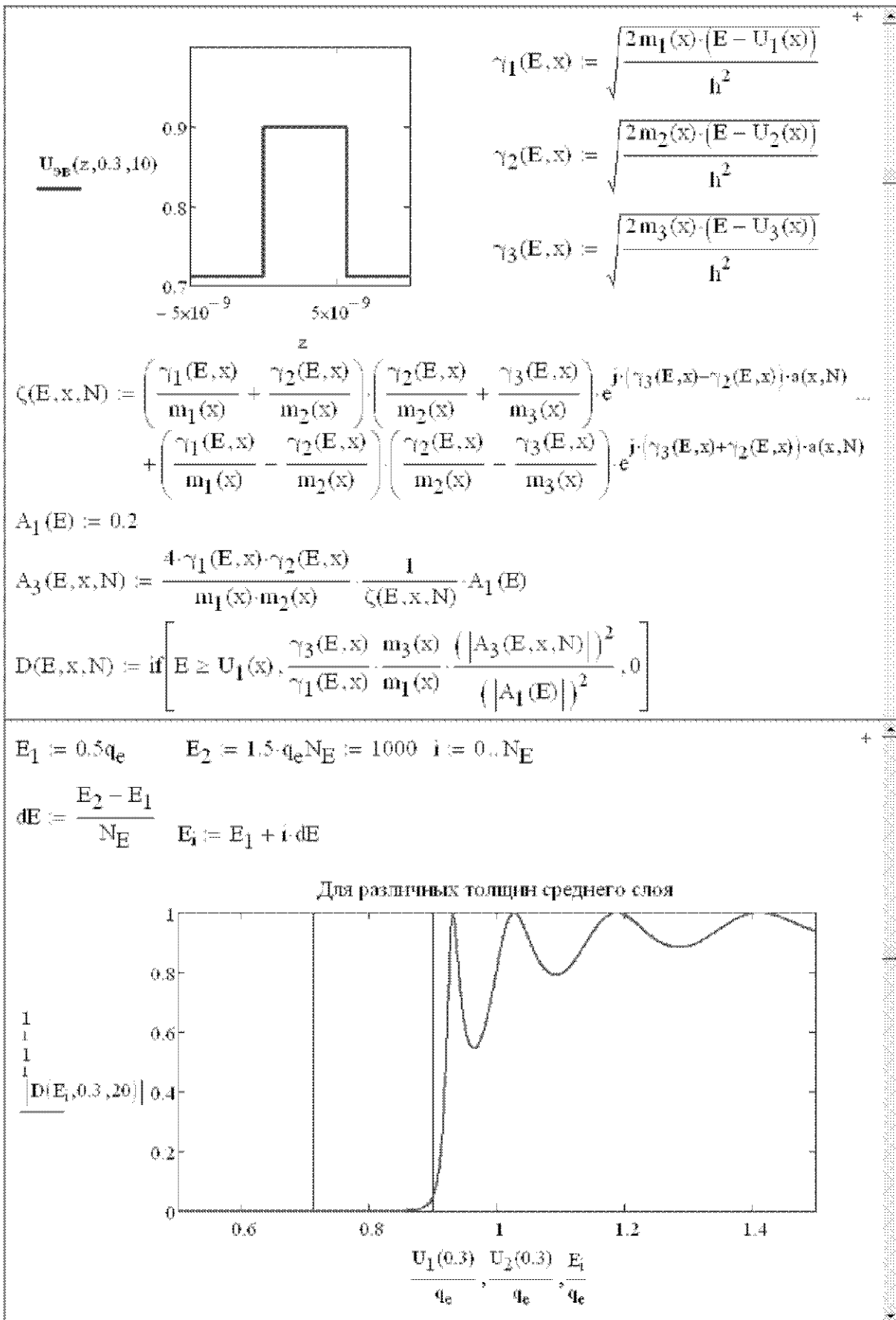
Толщина потенциального барьера - N атомных монослоёв

$a(x, N) := N \cdot a_0(x_2(x))$ $a(0.3, 20) \cdot 10^{-9} = 11.31128$

$U_1(x) := \frac{E_{g1}(x)}{2}$ $U_2(x) := \frac{E_{g2}(x)}{2}$ $U_3(x) := \frac{E_{g3}(x)}{2}$

$U(z, x, N) := \text{if}(z < 0, U_1(x), \text{if}(z > a(x, N), U_3(x), U_2(x)))$

$U_{3B}(z, x, N) := \frac{U(z, x, N)}{q_e}$



Минимумы и максимумы коэффициента прохождения (определены графически)

$$E_{\max} := \begin{pmatrix} 0.931 \\ 1.027 \end{pmatrix} \cdot q_e \quad E_{\min} := \begin{pmatrix} 0.964 \\ 1.092 \end{pmatrix} \cdot q_e$$

$$A_2(E, x, N) := \frac{\frac{\gamma_2(E, x)}{m_2(x)} + \frac{\gamma_3(E, x)}{m_3(x)}}{2 \frac{\gamma_2(E, x)}{m_2(x)}} \cdot A_3(E, x, N) \cdot e^{j(\gamma_3(E, x) - \gamma_2(E, x)) \cdot a(x, N)}$$

$$B_2(E, x, N) := \frac{\frac{\gamma_2(E, x)}{m_2(x)} - \frac{\gamma_3(E, x)}{m_3(x)}}{2 \frac{\gamma_2(E, x)}{m_2(x)}} \cdot A_3(E, x, N) \cdot e^{j(\gamma_3(E, x) + \gamma_2(E, x)) \cdot a(x, N)}$$

$$B_1(E, x, N) := A_2(E, x, N) + B_2(E, x, N) - A_1(E)$$

$$\psi_1(E, z, x, N) := A_1(E) \cdot e^{j\gamma_1(E, x) \cdot z} + B_1(E, x, N) \cdot e^{-j\gamma_1(E, x) \cdot z}$$

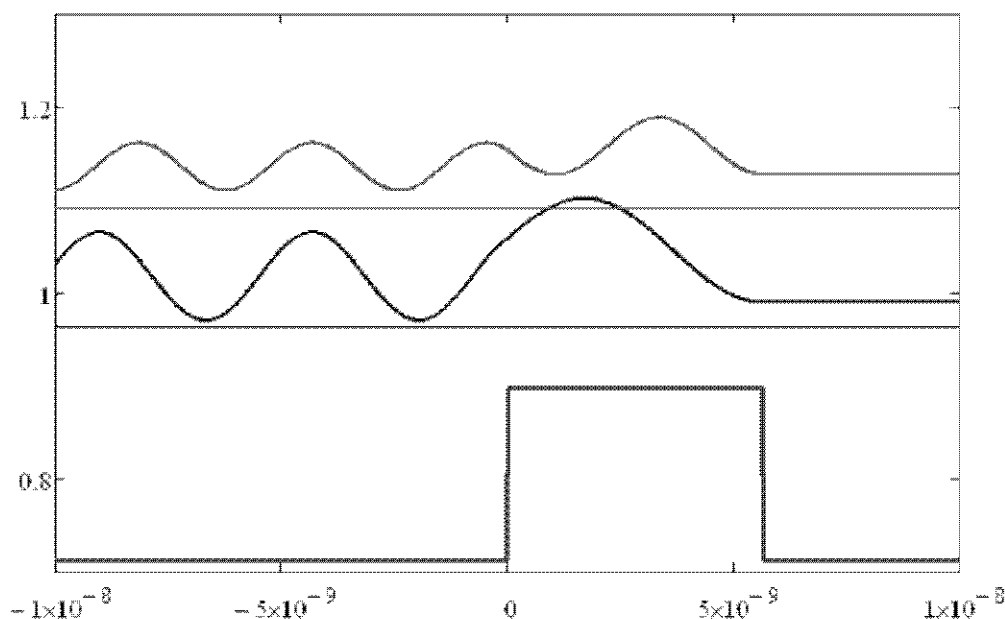
$$\psi_2(E, z, x, N) := A_2(E, x, N) \cdot e^{j\gamma_2(E, x) \cdot z} + B_2(E, x, N) \cdot e^{-j\gamma_2(E, x) \cdot z}$$

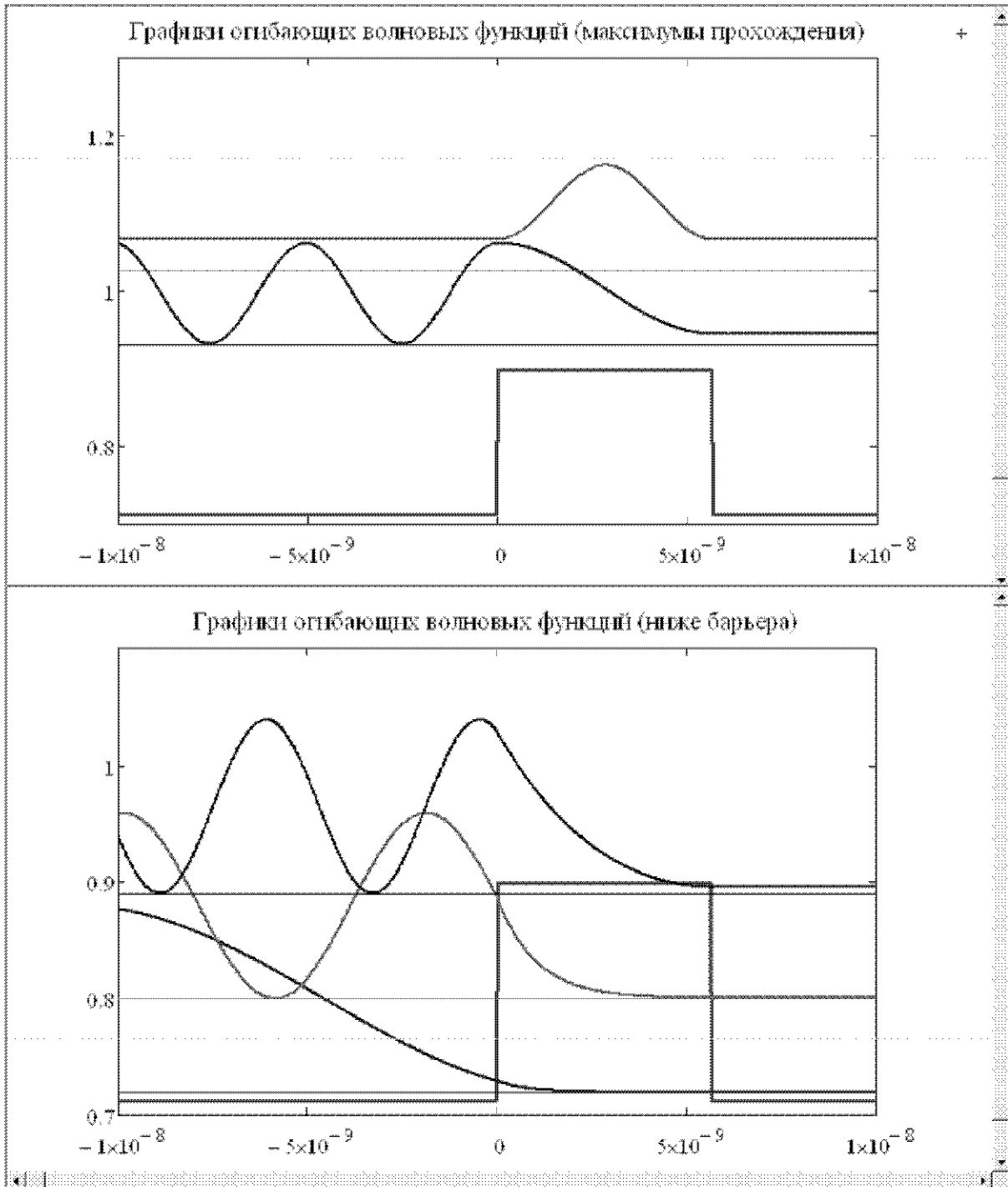
$$\psi_3(E, z, x, N) := A_3(E, x, N) \cdot e^{j\gamma_3(E, x) \cdot z}$$

$$\psi(z, E, x, N) := \text{if}(z < 0, \psi_1(E, z, x, N), \text{if}(z > a(x, N), \psi_3(E, z, x, N), \psi_2(E, z, x, N)))$$

$$\Psi(z, E, x, N) := (|\psi(z, E, x, N)|)^2$$

Графикигибающих волновых функций (минимумы прохождения)





Приложение 6. Программа, реализующая метод матриц переноса при моделировании энергетического спектра электрона в слоистых квантоворазмерных структурах

В данном приложении приводится пример программы, реализующей метод матриц переноса, а также пример программы, использующей данную реализацию для моделирования движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины.

Программа, реализующая метод матриц переноса:

Основные константы

Масса электрона	$m_e := 9.1093897 \cdot 10^{-31}$	$j := \sqrt{-1}$
Заряд электрона	$q_e := 1.60217733 \cdot 10^{-19}$	
Постоянная Планка с чертой	$\hbar := \frac{6.6260755 \cdot 10^{-34}}{2\pi}$	

Моделирование движения электрона через слоистые наноструктуры с помощью матриц переноса

$$\gamma(m, E, U) := \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot (E - U)}{\hbar^2}}$$

$$T_{00}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left(1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j \cdot (\gamma_2 - \gamma_1) \cdot z}$$

$$T_{01}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{-j \cdot (\gamma_2 + \gamma_1) \cdot z}$$

$$T_{10}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left(1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j \cdot (\gamma_2 + \gamma_1) \cdot z}$$

$$T_{11}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \frac{1}{2} \cdot \left(1 + \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \cdot \frac{m_2}{m_1} \right) \cdot e^{j \cdot (\gamma_2 - \gamma_1) \cdot z}$$

$$T_{ij}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) := \begin{pmatrix} T_{00}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T_{01}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \\ T_{10}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) & T_{11}(\gamma_1, \gamma_2, m_1, m_2, z) \end{pmatrix}$$

```

D(γlast, γfirst, mlast, mfirst, T) :=  $\frac{|\gamma_{last}|}{|\gamma_{first}|} \cdot \frac{m_{first}}{m_{last}} \cdot \left( \left| \frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$ 

R(T) :=  $\left( \left| \frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \right| \right)^2$ 

Bfirst(Afirst, T) :=  $-\frac{T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first}$ 

Alast(Afirst, T) :=  $\frac{T_{1,1} \cdot T_{0,0} - T_{0,1} \cdot T_{1,0}}{T_{1,1}} \cdot A_{first}$ 

NextLayer(PreviousLayer, T) := T-PreviousLayer

```

Программа, использующая метод матриц переноса использующей данную реализацию для моделирования движения электрона через потенциальный барьер конечной толщины:

```

Reference:25)Метод матри переноса.xlссd(R)

Свойства соединения AlxGa1-xAs
mn(x) := (0.067 + 0.083 · x) · me      Γ - минимум
Eg(x) := if(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x2) · qe
a0(x) := (0.56533 + 0.00078 · x) · 10-9      постоянная решетки

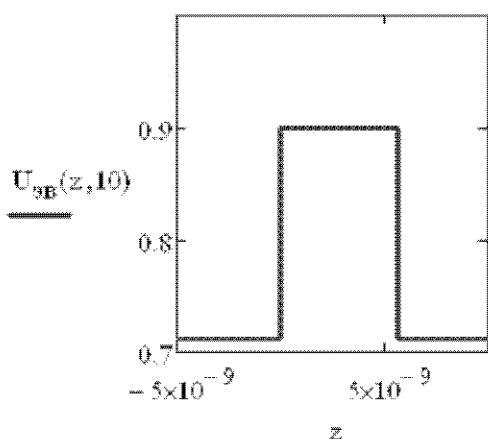
Движение электрона через симметричный потенциальный барьер конечной толщины

x1 := 0           Eg1 := Eg(x1)           m1 := mn(x1)           j := √-1
x2 := 0.3       Eg2 := Eg(x2)           m2 := mn(x2)
x3 := 0         Eg3 := Eg(x3)           m3 := mn(x3)

Толщина потенциального барьера - M атомных монослоёв
a(M) := M · a0(x2)      a(10) · 109 = 5.65564

U1 :=  $\frac{E_{g1}}{2}$       U2 :=  $\frac{E_{g2}}{2}$       U3 :=  $\frac{E_{g3}}{2}$ 
+
U(z, M) := if(z < 0, U1, if(z > a(M), U3, U2))      UэВ(z, N) :=  $\frac{U(z, N)}{q_e}$ 

```



$N := 1$ Число слоёв структуры, исключая внешние области

$M := 10$ Толщина барьера (количество атомных монслоёв)

$Z := (0 \quad a(M))^T$

$U := (U_1 \quad U_2 \quad U_3)^T$

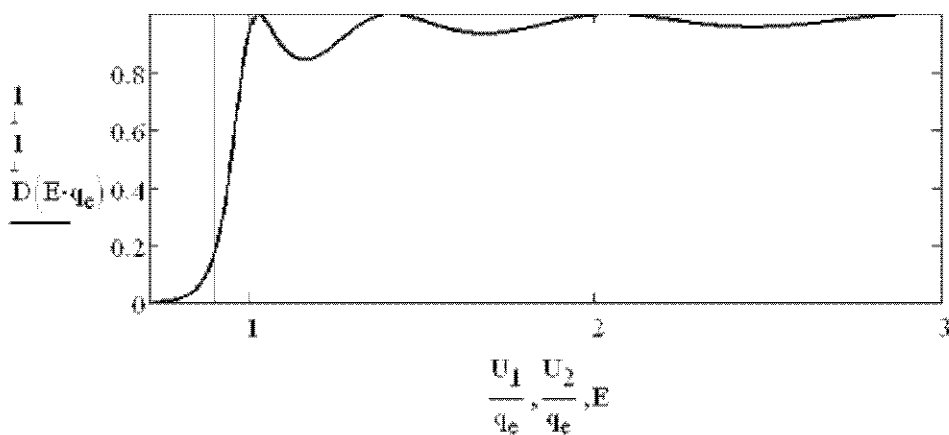
$m := (m_1 \quad m_2 \quad m_3)^T$ +

$$\gamma(E, i) := \gamma(m_i, E, U_i)$$

$$T_i(E, i) := T_{ij}(\gamma(E, i), \gamma(E, i+1), m_i, m_{i+1}, Z_i)$$

$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T_i(E, i)$$

$$D(E) := D(\gamma(E, N+1), \gamma(E, 0), m_{N+1}, m_0, T(E))$$



$$A_1 := 0.18$$

$$B_1(E) := B_{\text{first}}(A_1, T(E))$$

$$A_3(E) := A_{\text{last}}(A_1, T(E))$$

$$\Psi(E) := \begin{cases} \Psi^{(0)} \leftarrow \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1(E) \end{pmatrix} \\ \text{for } i \in 1..N \\ \Psi^{(i)} \leftarrow T_i(E, i-1) \cdot \Psi^{(i-1)} \\ \Psi^{(N+1)} \leftarrow \begin{pmatrix} A_3(E) \\ 0 \end{pmatrix} \\ \text{return } \Psi \end{cases}$$

$$\psi_1(E, z, \Psi, i) := \left(\left| \Psi_{0,i} e^{j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} + \Psi_{1,i} e^{-j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} \right| \right)^2$$

```

ψ(E, Z, z1, z2, dz) :=
  Ψ ← Ψ(E)
  NZ ← (z2 - z1) / dz
  for ζ ∈ 0..NZ
    z ← z1 + ζ · dz
    if z < Z0
      | ψζ ← ψ1(E, z, Ψ, 0)
      | continue
    if z ≥ ZN
      | ψζ ← ψ1(E, z, Ψ, N + 1)
      | continue
    for i ∈ 1..N
      if (Zi-1 ≤ z) · (z < Zi)
        | ψζ ← ψ1(E, z, Ψ, i)
        | break
  return ψ
  
```

$$E_1 := 1.026 \quad E_2 := 1.161 \quad E_3 := 1.41 \quad E_4 := 1.68 \quad E_5 := 0.85$$

$$z_1 := -10 \cdot 10^{-9} \quad z_2 := 15 \cdot 10^{-9}$$

$$N_Z := \frac{z_2 - z_1}{dz} \quad \zeta := 0..N_Z \quad z_\zeta := z_1 + \zeta \cdot dz$$

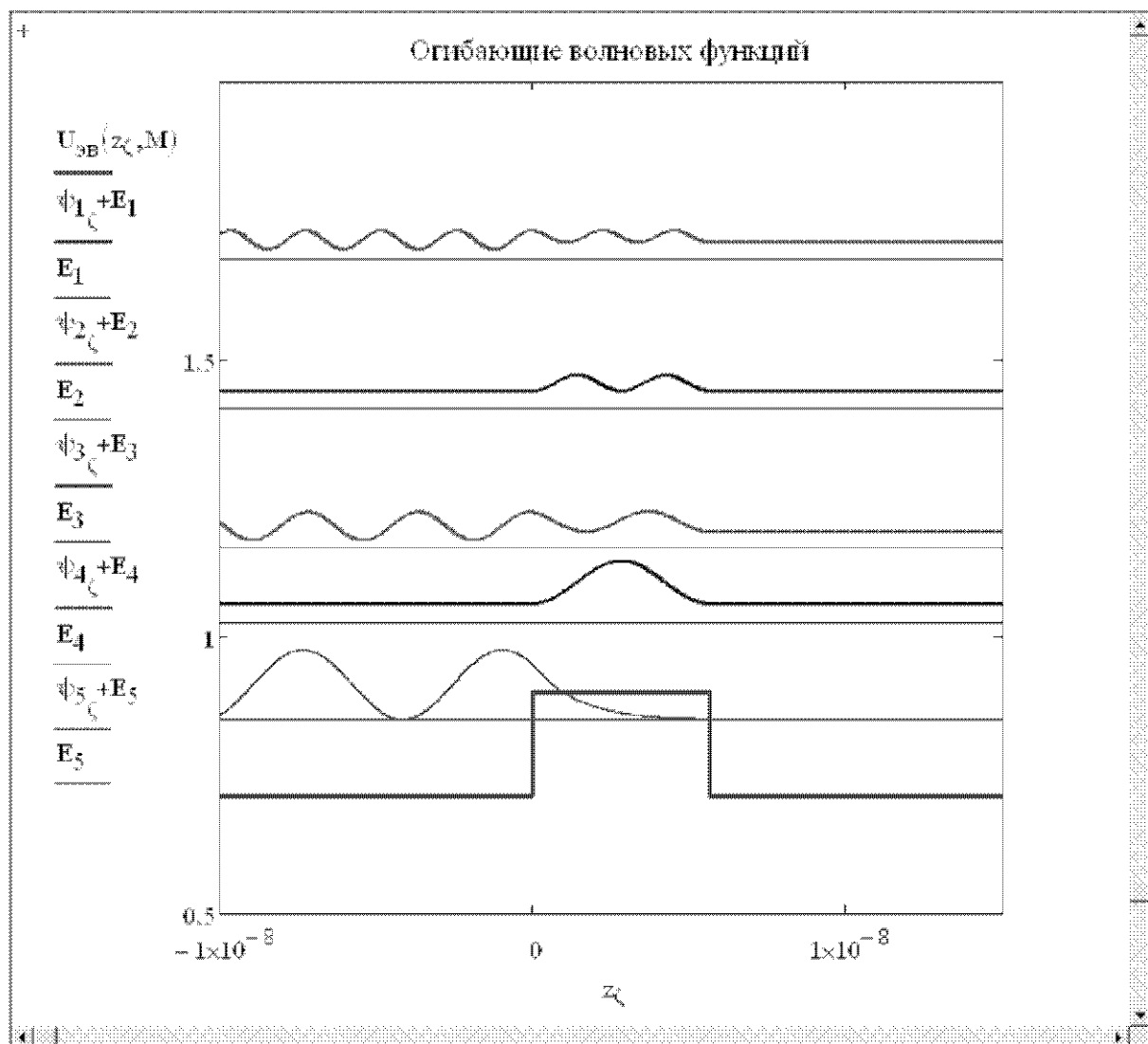
$$\psi_1 := \psi(E_1 \cdot q_e, Z, z_1, z_2, dz)$$

$$\psi_2 := \psi(E_2 \cdot q_e, Z, z_1, z_2, dz)$$

$$\psi_3 := \psi(E_3 \cdot q_e, Z, z_1, z_2, dz)$$

$$\psi_4 := \psi(E_4 \cdot q_e, Z, z_1, z_2, dz)$$

$$\psi_5 := \psi(E_5 \cdot q_e, Z, z_1, z_2, dz)$$



Приложение 7. Программа для моделирования движения электрона через двухбарьерную квантоворазмерную структуру

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и коэффициента прохождения электронов через двухбарьерную квантоворазмерную структуру, написанной с использованием метода матриц переноса.

```

Reference: Z:\Метод матриц переноса.xmcd(R)
Свойства соединения Alx Ga1-x As
mn(x) := (0.067 + 0.083·x)·me      Γ - минимум
Eg(x) := if(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x2)·qe
a0(x) := (0.36533 + 0.00078·x)·10-9      постоянная решетки

Движение электрона через двухбарьерную квантоворазмерную структуру
N := 3      число слоёв в структуре, исключая внешние области. Итого в задаче
            рассматривается N+2=5 областей

Рассматриваем структуру GaAs – Alx Ga1-x As – GaAs – Alx Ga1-x As – GaAs :

x(i) := if(mod(i, 2) = 0, 0, 0.3)      i - номер области: i := 0..N + 1

A :=  $\begin{pmatrix} 10 \\ 10 \\ 10 \end{pmatrix}$       число атомных монослоёв в каждом слое многослойной структуры
            (исключая внешние области)

Eg(i) := Eg(x(i))      m(i) := mn(x(i))      V(i) :=  $\frac{E_g(i)}{2}$ 

d(n) := if(n = 0, 0, An-1·a0(x(n)))      Толщина n-го слоя: n := 1..N

Z(ζ) :=  $\sum_{k=0}^{\zeta} d(k)$       Координата ζ-ной границы: ζ := 0..N

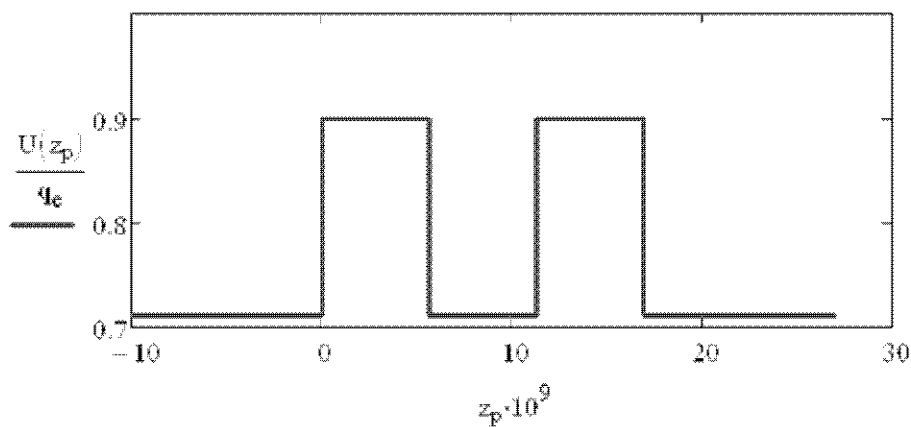
I(z) :=  $\begin{cases} \text{return } 0 & \text{if } z < Z(0) \\ \text{return } N + 1 & \text{if } z \geq Z(N) \\ \text{for } i \in 1..N \\ \text{return } i & \text{if } (Z(i-1) \leq z) \wedge (z < Z(i)) \end{cases}$ 

U(z) := V(I(z))

```

$$z_1 := Z(0) - 10 \cdot 10^{-9} \quad z_2 := Z(N) + 10 \cdot 10^{-9} \quad dz := 0.01 \cdot 10^{-9}$$

$$N_Z := \frac{z_2 - z_1}{dz} \quad N_Z = 3696.458 \quad p := 0..N_Z \quad z_p := z_1 + p \cdot dz$$



$$\gamma(E, i) := \gamma(m(i), E, V(i))$$

$$T_i(E, i) := T_{ij}(\gamma(E, i), \gamma(E, i+1), m(i), m(i+1), Z(i))$$

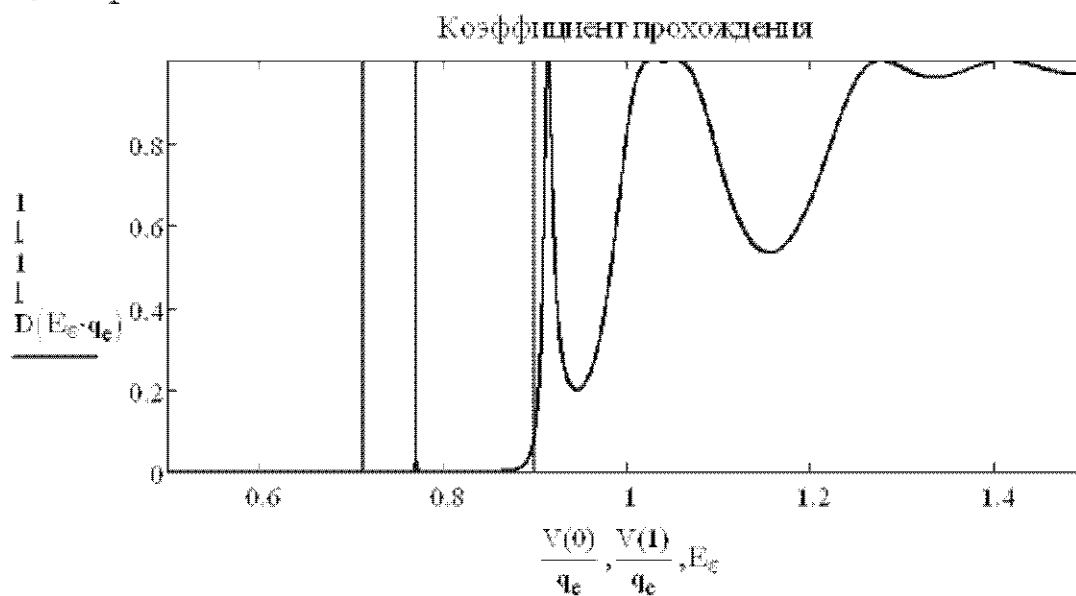
$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T_i(E, i)$$

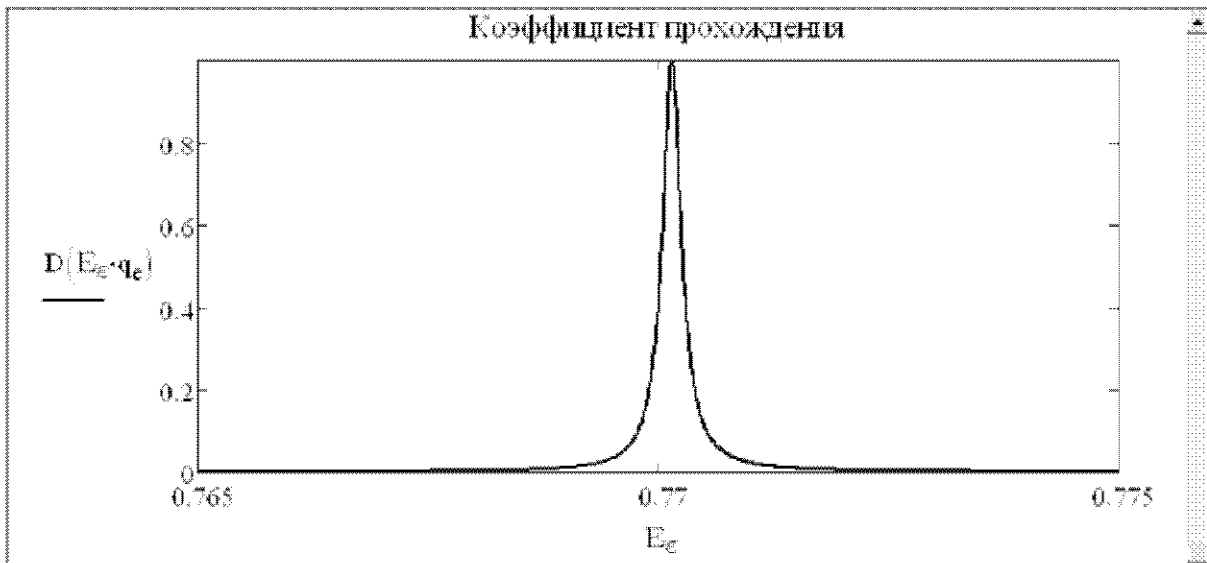
$$D(E) := D(\gamma(E, N+1), \gamma(E, 0), m(N+1), m(0), T(E))$$

$$\epsilon_1 := 0.5 \quad \epsilon_2 := 1.5 \quad d\epsilon := 0.00001$$

$$N_\epsilon := \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{d\epsilon} \quad \epsilon := 0..N_\epsilon \quad N_\epsilon = 100000$$

$$E_\epsilon := \epsilon_1 + \epsilon \cdot d\epsilon$$





$E_{\text{резонанса}} := 0.770146$

$A_1 := 0.08$

$B_1(E) := B_{\text{first}}(A_1, T(E))$

$A_3(E) := A_{\text{last}}(A_1, T(E))$

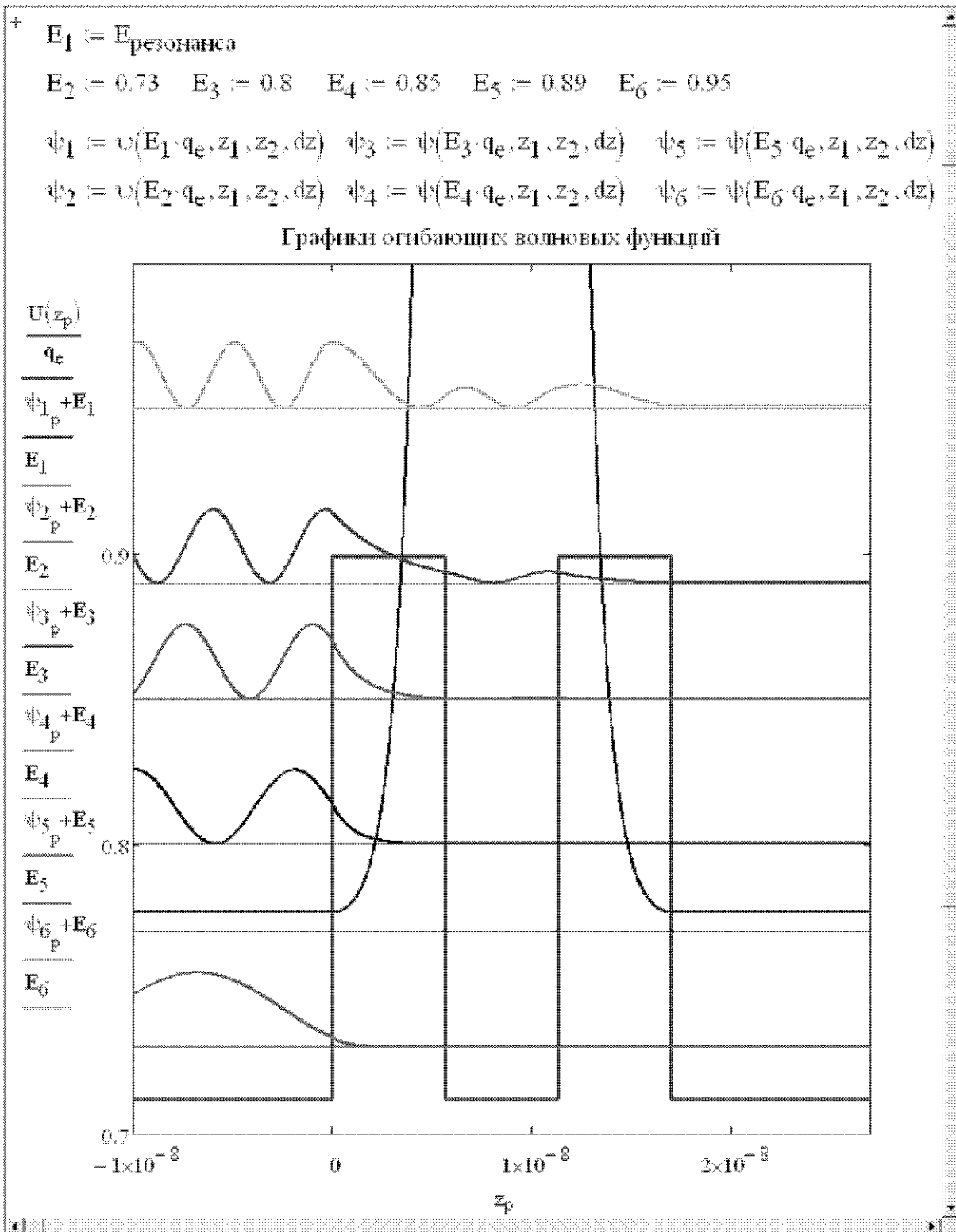
```

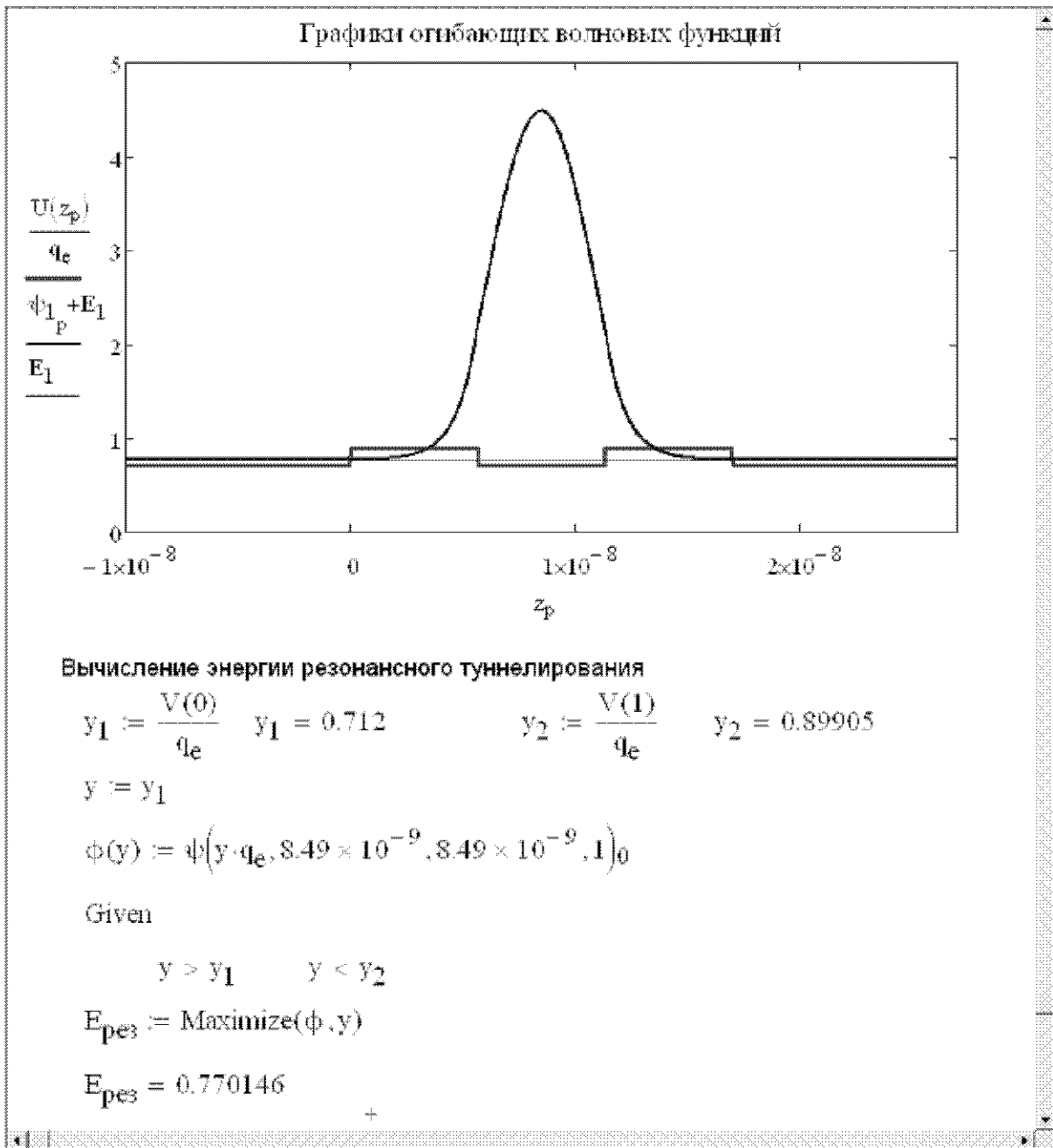
Psi(E) :=
  Psi^(0) ← ( A_1
              B_1(E) )
  for i ∈ 1..N
    Psi^(i) ← T_i(E, i-1) · Psi^(i-1)
  Psi^(N+1) ← ( A_3(E)
                0 )
  return Psi
    
```

$\psi_1(E, z, \Psi, i) := \left(\left| \Psi_{0,i} e^{j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} + \Psi_{1,i} e^{-j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} \right|^2 \right)$

```

psi(E, z_1, z_2, dz) :=
  Psi ← Psi(E)
  N_z ← (z_2 - z_1) / dz
  for zeta ∈ 0..N_z
    z ← z_1 + zeta · dz
    i ← I(z)
    psi_zeta ← psi_1(E, z, Psi, i)
  return psi
    
```





Приложение 8. Программа для моделирования движения электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и коэффициента прохождения электронов через двухбарьерную квантоворазмерную структуру, написанной с использованием метода матриц переноса.

```

+ Reference:Z:\Метод матриц переноса.xmcd(R)
Свойства соединения  $Al_x Ga_{1-x} As$ 

 $m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$       Г - минимум
 $E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x^2) \cdot e_e$ 
 $a_0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$       постоянная решетки

Движение электрона через трехбарьерную квантоворазмерную структуру
N := 5      число слоёв в структуре, исключая внешние области. Итого в задаче
             рассматривается N+2 областей
x(i) := if(mod(i, 2) = 0, 0, 0.3)  i - номер области: i := 0..N + 1
A := (10 10 10 10 10)^T          число атомных монослоёв в каждом слое
                                 многослойной структуры (исключая внешние
                                 области)

 $E_g(i) := E_g(x(i))$        $m(i) := m_n(x(i))$        $V(i) := \frac{E_g(i)}{2}$ 
d(n) := if(n = 0, 0, A_{n-1} \cdot a_0(x(n)))      Толщина n-го слоя: n := 1..N

 $Z(\zeta) := \sum_{k=0}^{\zeta} d(k)$       Координата  $\zeta$ -ной границы:  $\zeta := 0..N$ 

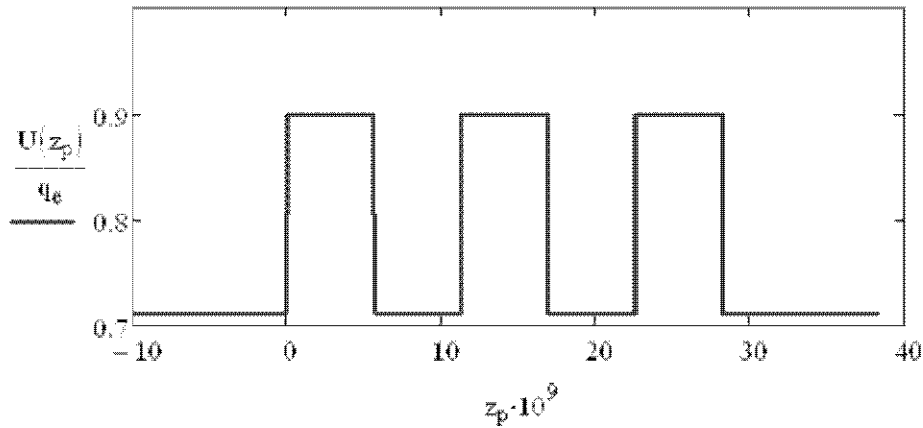
I(z) := | return 0 if z < Z(0)
         | return N + 1 if z ≥ Z(N)
         | for i ∈ 1..N
         | return i if (Z(i-1) ≤ z) · (z < Z(i))

U(z) := V(I(z))

```

$$z_1 := Z(0) - 10 \cdot 10^{-9} \quad z_2 := Z(N) + 10 \cdot 10^{-9} \quad dz := 0.01 \cdot 10^{-9}$$

$$N_z := \frac{z_2 - z_1}{dz} \quad N_z = 4827.352 \quad p := 0..N_z \quad z_p := z_1 + p \cdot dz$$



$$\gamma(E, i) := \gamma(m(i), E, V(i))$$

$$T_i(E, i) := T_{ij}(\gamma(E, i), \gamma(E, i+1), m(i), m(i+1), Z(i))$$

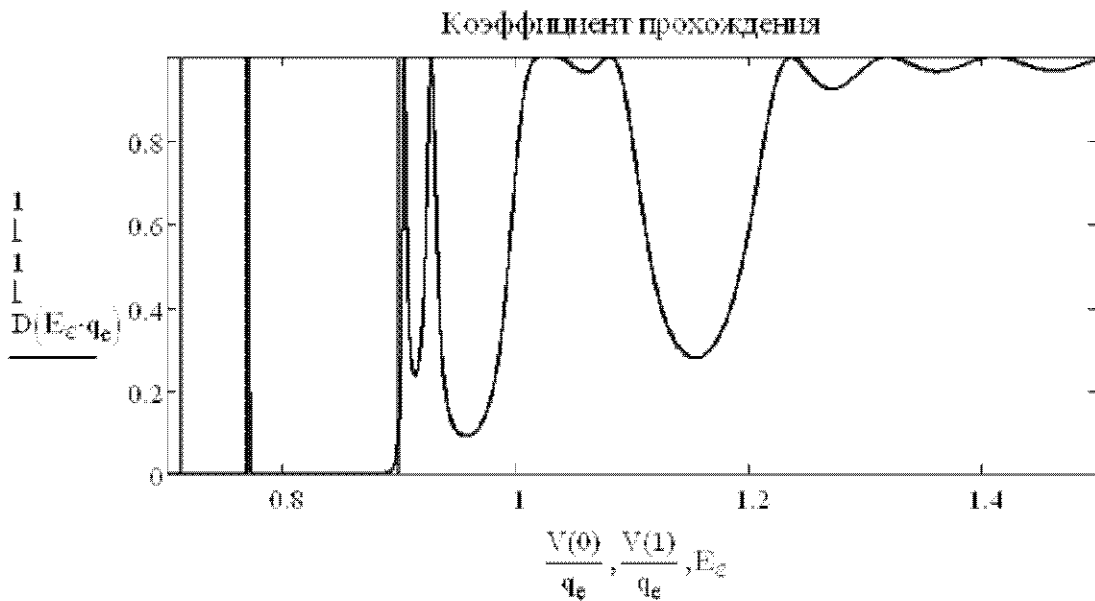
$$T(E) := \prod_{i=N}^0 T_i(E, i)$$

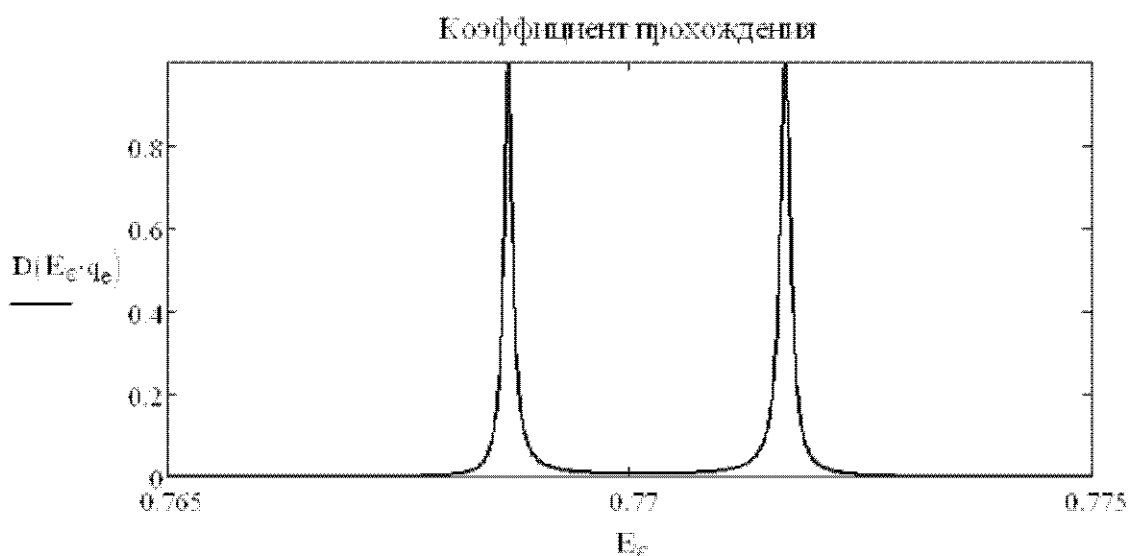
$$D(E) := D(\gamma(E, N+1), \gamma(E, 0), m(N+1), m(0), T(E))$$

$$\varepsilon_1 := 0.7 \quad \varepsilon_2 := 1.5 \quad d\varepsilon := 0.00001$$

$$N_\varepsilon := \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{d\varepsilon} \quad \varepsilon := 0..N_\varepsilon \quad N_\varepsilon = 80000$$

$$E_\varepsilon := \varepsilon_1 + \varepsilon \cdot d\varepsilon$$





$$E_{\text{резонанс1}} := 0.76869 \quad E_{\text{резонанс2}} := 0.77169$$

$$A_1 := 0.08$$

$$B_1(E) := B_{\text{first}}(A_1, T(E))$$

$$A_3(E) := A_{\text{last}}(A_1, T(E))$$

$$\Psi(E) := \left| \begin{array}{l} \Psi^{(0)} \leftarrow \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1(E) \end{pmatrix} \\ \text{for } i \in 1..N \\ \Psi^{(i)} \leftarrow T_i(E, i-1) \cdot \Psi^{(i-1)} \\ \Psi^{(N+1)} \leftarrow \begin{pmatrix} A_3(E) \\ 0 \end{pmatrix} \\ \text{return } \Psi \end{array} \right.$$

$$\psi_1(E, z, \Psi, i) := \left(\left| \Psi_{0,i} e^{j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} + \Psi_{1,i} e^{-j \cdot \gamma(E,i) \cdot z} \right|^2 \right)$$

$$\psi(E, z_1, z_2, dz) := \left| \begin{array}{l} \Psi \leftarrow \Psi(E) \\ N_z \leftarrow \frac{z_2 - z_1}{dz} \\ \text{for } \zeta \in 0..N_z \\ \left| \begin{array}{l} z \leftarrow z_1 + \zeta \cdot dz \\ i \leftarrow I(z) \\ \psi_\zeta \leftarrow \psi_1(E, z, \Psi, i) \end{array} \right. \\ \text{return } \psi \end{array} \right.$$

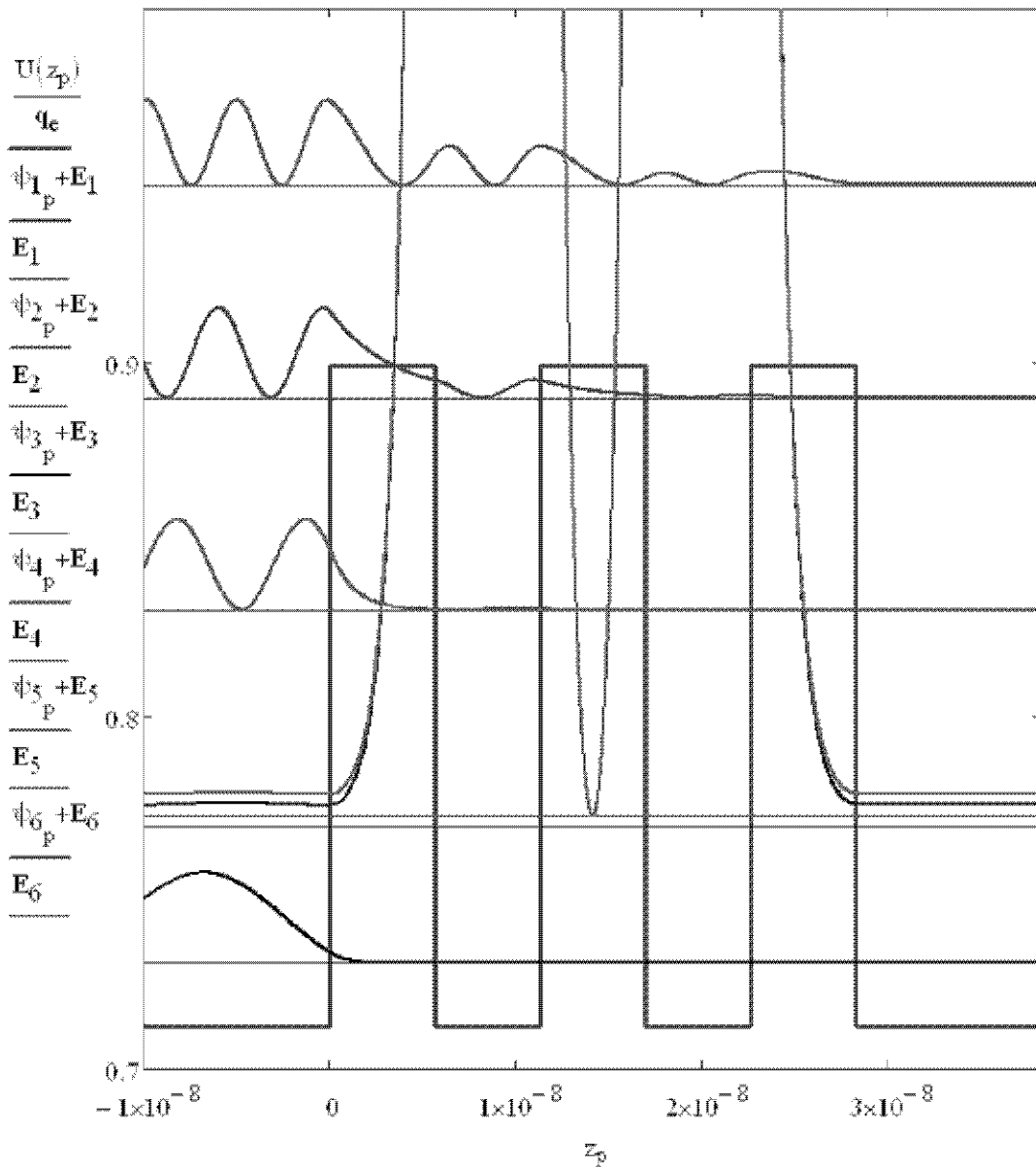
$$E_1 := E_{\text{резонанс1}} \quad E_2 := E_{\text{резонанс2}}$$

$$E_3 := 0.73 \quad E_4 := 0.83 \quad E_5 := 0.89 \quad E_6 := 0.95$$

$$\psi_1 := \psi(E_1 \cdot q_e, z_1, z_2, dz) \quad \psi_3 := \psi(E_3 \cdot q_e, z_1, z_2, dz) \quad \psi_5 := \psi(E_5 \cdot q_e, z_1, z_2, dz)$$

$$\psi_2 := \psi(E_2 \cdot q_e, z_1, z_2, dz) \quad \psi_4 := \psi(E_4 \cdot q_e, z_1, z_2, dz) \quad \psi_6 := \psi(E_6 \cdot q_e, z_1, z_2, dz)$$

Графики огибающих волновых функций



Приложение 9. Программа для моделирования движения электрона при приложении постоянного электрического поля в направлении, перпендикулярном плоскостям слоёв

В данном приложении приведен пример программы для расчета огибающих волновых функций и коэффициента прохождения электронов через потенциальный барьер при приложении постоянного электрического поля.

```

+ Reference:2:\Метод матриц переноса.xmcd(R)
Свойства соединения  $Al_x Ga_{1-x} As$ 

 $m_n(x) := (0.067 + 0.083 \cdot x) \cdot m_e$        $\Gamma$  - минимум
 $E_g(x) := \text{if}(x < 0.45, 1.424 + 1.247x, 1.9 + 0.125x + 0.143x^2) \cdot q_e$ 
 $a_0(x) := (0.56533 + 0.00078 \cdot x) \cdot 10^{-9}$       постоянная решетки

Движение электрона через потенциальный барьер в электрическом поле
 $N := 1$       число слоёв в структуре, исключая внешние области. Итого в задаче
                рассматривается  $N+2$  областей
 $x(i) := \text{if}(\text{mod}(i, 2) = 0, 0, 0.3)$        $i$  - номер области:  $i := 0..N + 1$ 
 $A := (10)^T$       число атомных монослоёв в каждом слое
                многослойной структуры (исключая внешние
                области)

 $E_g(i) := E_g(x(i))$        $m(i) := m_n(x(i))$        $E_c(i) := \frac{E_g(i)}{2}$ 
 $d(n) := \text{if}(n = 0, 0, A_{n-1} \cdot a_0(x(n)))$       Толщина  $n$ -го слоя:  $n := 1..N$ 

 $Z(\zeta) := \sum_{k=0}^{\zeta} d(k)$       Координата  $\zeta$ -ной границы;  $\zeta := 0..N$ 

 $I(z) := \begin{cases} \text{return } 0 & \text{if } z < Z(0) \\ \text{return } N + 1 & \text{if } z \geq Z(N) \\ \text{for } i \in 1..N \\ \text{return } i & \text{if } (Z(i-1) \leq z) \cdot (z < Z(i)) \end{cases}$ 

 $U(z) := E_c(I(z))$ 

```


M - число точек разбиения

$$z_1 := Z(0) - 10 \cdot 10^{-9} \quad z_2 := Z(N) + 10 \cdot 10^{-9}$$

$$M := 500$$

$$dz := \frac{z_2 - z_1}{M} \quad dz \cdot 10^9 = 0.051311$$

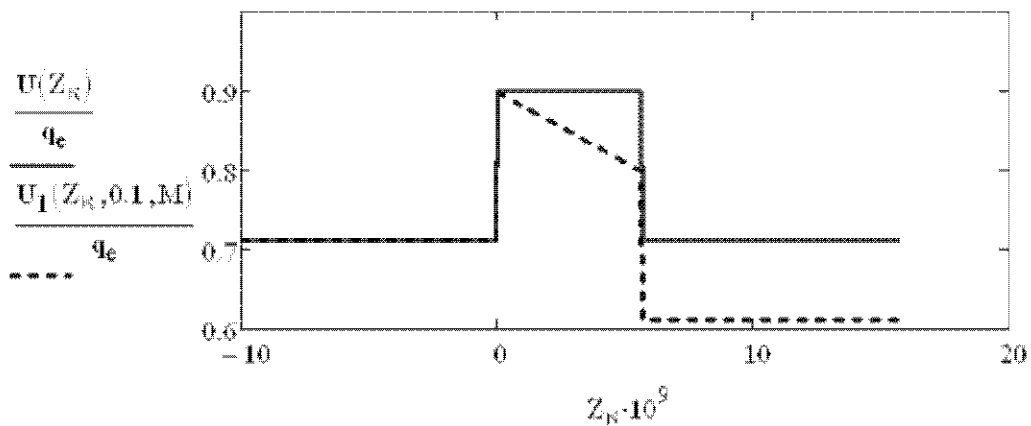
$$\kappa := 0..M+1 \quad Z_{\kappa} := z_1 + \kappa \cdot dz$$

```

k(z, M) :=
| i ← I(z)
| Zi ← Z(i - 1)
| a ← Z(N) - Z(0)
| for k ∈ 0..M - 1
|   return k if  $\left( Z_i + k \cdot \frac{a}{M} \leq z \right) \cdot \left[ z < Z_i + (k + 1) \cdot \frac{a}{M} \right]$ 
| return M
    
```

```

U1(z, V, M) :=
| u ← U(z)
| i ← I(z) - 1
| return u if i < 0
| return u - qe · V if i ≥ N
| κ ← k(z, M)
| u1 ← u - qe · V ·  $\frac{\kappa}{M}$ 
| return u1
    
```



$$\gamma(\mathbf{E}, V, \kappa) := \gamma(\mathbf{m}(\mathbf{I}(Z_{\kappa})), \mathbf{E}, U_{\mathbf{I}}(Z_{\kappa}, V, M))$$

$$T_{\mathbf{I}}(\mathbf{E}, V, \kappa) := T_{\mathbf{I}\mathbf{I}}(\gamma(\mathbf{E}, V, \kappa), \gamma(\mathbf{E}, V, \kappa + 1), \mathbf{m}(\mathbf{I}(Z_{\kappa})), \mathbf{m}(\mathbf{I}(Z_{\kappa+1})), Z_{\kappa})$$

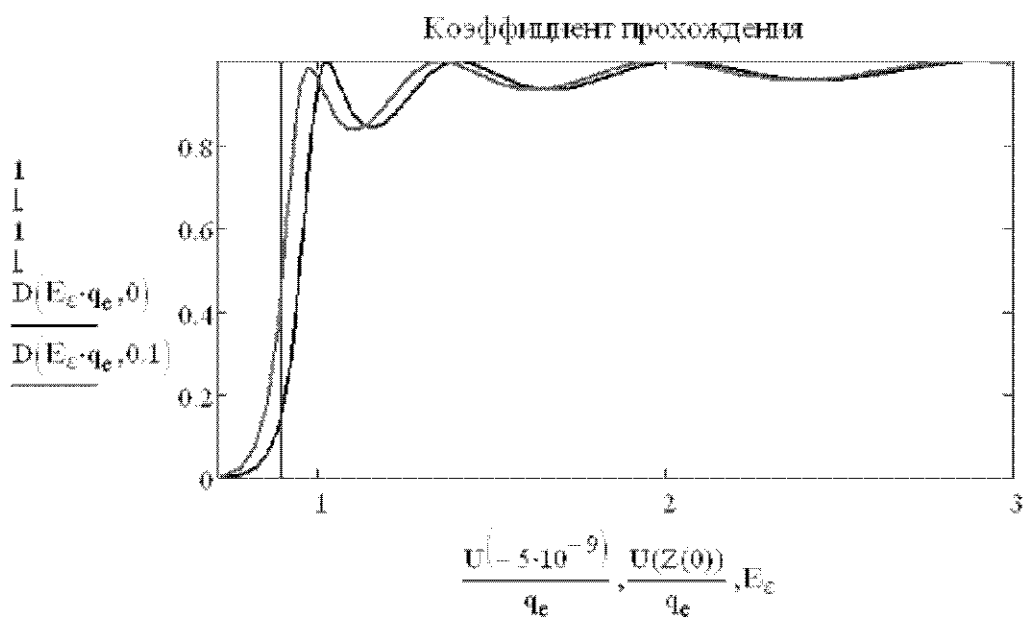
$$T(\mathbf{E}, V) := \prod_{\kappa=M}^0 T_{\mathbf{I}}(\mathbf{E}, V, \kappa)$$

$$D(\mathbf{E}, V) := D(\gamma(\mathbf{E}, V, M), \gamma(\mathbf{E}, V, 0), \mathbf{m}(N+1), \mathbf{m}(0), T(\mathbf{E}, V))$$

$$\varepsilon_1 := \frac{U(-5 \cdot 10^{-9})}{q_e} \quad \varepsilon_2 := 3 \quad d\varepsilon := 0.01$$

$$N_{\varepsilon} := \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{d\varepsilon} \quad \varepsilon := 0..N_{\varepsilon} \quad N_{\varepsilon} = 228.8$$

$$E_{\varepsilon} := \varepsilon_1 + \varepsilon \cdot d\varepsilon$$



```

A1 := 0.08
B1(E, V) := Bfirst(A1, T(E, V))
A3(E, V) := Alast(A1, T(E, V))
Ψ(E, V) :=
  Ψ(0) ←  $\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1(E, V) \end{pmatrix}$ 
  for i ∈ 1..M
    Ψ(i) ← T1(E, V, i-1) · Ψ(i-1)
  Ψ(M+1) ←  $\begin{pmatrix} A_3(E, V) \\ 0 \end{pmatrix}$ 
  return Ψ

ψ1(E, V, Ψ, κ) :=  $\left( \left| \Psi_{0,\kappa} \cdot e^{j \cdot \gamma(E, V, \kappa) \cdot Z_\kappa} + \Psi_{1,\kappa} \cdot e^{-j \cdot \gamma(E, V, \kappa) \cdot Z_\kappa} \right| \right)^2$ 
ψ(E, V) :=
  Ψ ← Ψ(E, V)
  for κ ∈ 0..M+1
    ψκ ← ψ1(E, V, Ψ, κ)
  return ψ

```

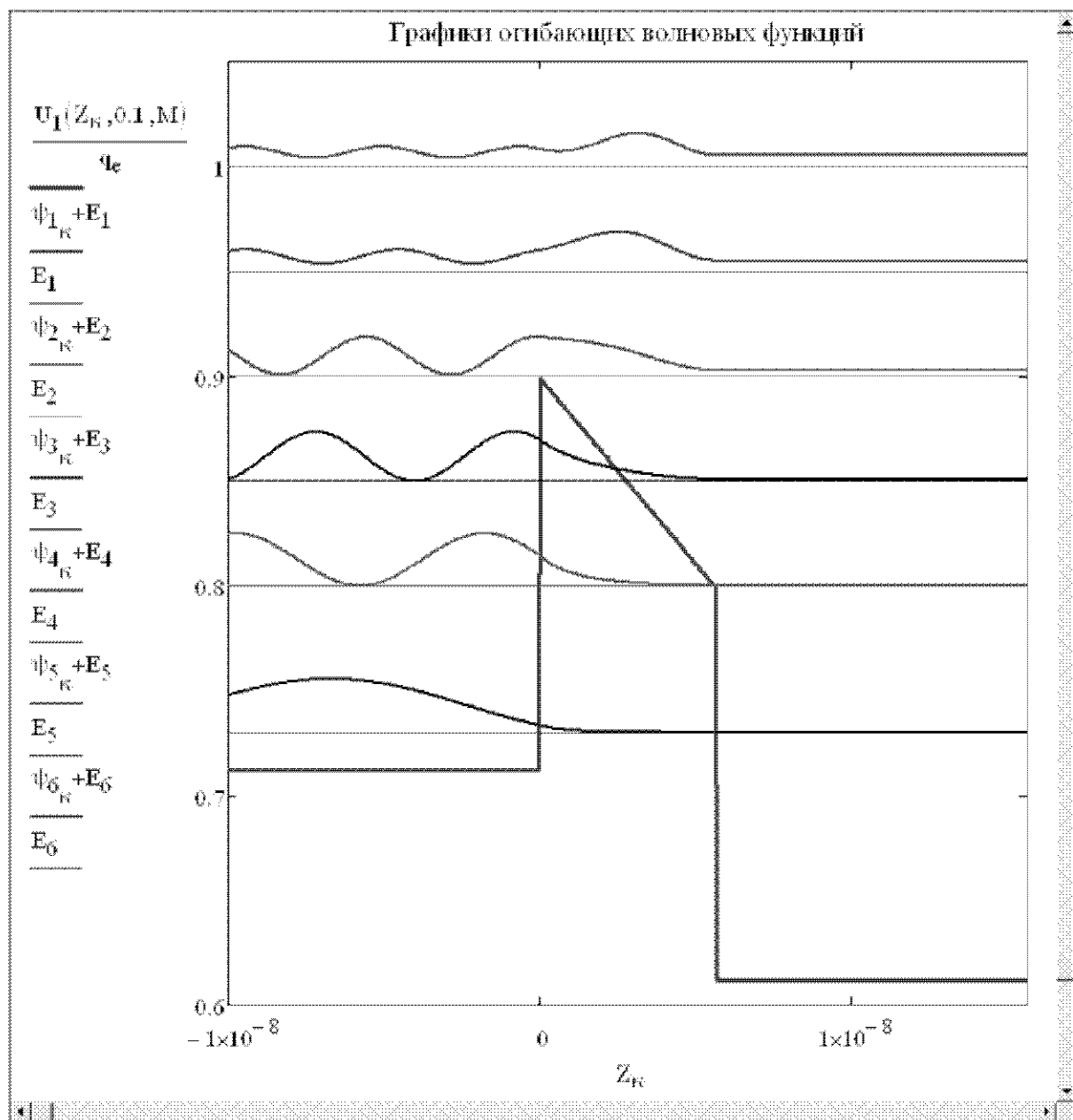
```

+ V := 0.1

E1 := 0.73      E2 := 0.8
E3 := 0.85  E4 := 0.9  E5 := 0.95  E6 := 1

ψ1 := ψ(E1 · qe, V)      ψ3 := ψ(E3 · qe, V)      ψ5 := ψ(E5 · qe, V)
ψ2 := ψ(E2 · qe, V)      ψ4 := ψ(E4 · qe, V)      ψ6 := ψ(E6 · qe, V)

```



Приложение 10. Свойства твердого раствора $Al_xGa_{1-x}As$

Параметр	Значение
Кристаллическая структура	типа цинковой обманки
Диэлектрическая проницаемость	
низкочастотная	$13.18 - 3.12x$ (при 300 К)
высокочастотная	$10.89 - 2.78x$ (при 300 К)
Эффективная масса электронов	
Г-минимум	$0.067 + 0.083x$ (плотности сост.)
Х-минимум	$0.85 - 0.14x$ (плотности сост.)
L-минимум	$0.56 + 0.10x$ (плотности сост.)
G-минимум	$0.067 + 0.083x$
Х-минимум	$0.32 - 0.06x$
L-минимум	$0.11 + 0.03x$
Эффективная масса дырок	
тяжелых дырок	$0.62 + 0.14x$ (плотности сост.)
легких дырок	$0.087 + 0.063x$ (плотности сост.)
в отщепленной зоне	$0.15 + 0.09x$ (плотности сост.)
Электронное сродство, эВ	$4.07 - 1.1x$, ($x < 0.45$) $3.64 - 0.14$, ($x > 0.45$)
Ширина запрещенной зоны, эВ	$1.424 + 1.247x$, ($x < 0.45$) $1.9 + 0.125x + 0.143x^2$, ($x > 0.45$)
Разница энергий Г - и L-долин, эВ	0.29
Разница энергий между Г - долиной и потолком валентной зоны, эВ	$1.424 + 1.155x + 0.37x^2$

Разница энергий между X -долиной и потолком валентной зоны, эВ	$1.9+0.124x+0.144x^2$
Разница энергий между L -долиной и потолком валентной зоны, эВ	$1.71+0.69x$
Параметр решетки, нм	$0.56533+0.00078x$
Подвижность электронов, $\frac{cm^2}{V \cdot c}$	$(8-22x+10x^2) \cdot 10^3$ ($x < 0.45$) $(-0.225+1.16x-0.72x^2) \cdot 10^3$ ($x > 0.45$)
Подвижность дырок, $\frac{cm^2}{V \cdot c}$	$(0.37-0.97x+0.74x^2) \cdot 10^3$

Приложение 11. Работа в математическом пакете *MathCAD*.

Описание используемых в примерах функций.

В данном приложении приведены краткие описания функций, используемых в представленных в данном учебном пособии примерах программ.

П11.1. $\sin(x)$, $\cos(x)$, $\tan(x)$, $\cot(x)$

Данные функции возвращают соответственно синус, косинус, тангенс и котангенс аргумента x . Аргумент x должен быть безразмерным скаляром, действительным или комплексным.

П11.2. $\text{if}(\text{cond}, x, y)$

Данная функция возвращает значение аргумента x , если значение аргумента cond истинно, и возвращает значение аргумента y , если значение аргумента cond ложно.

cond — (логическое) булевское выражение, принимающее значение «истина» или «ложь».

x , y — произвольные выражения, как например числа, массивы, строки или другие функции, возвращающие подобные значения.

Примечания:

- Вычисляются только те аргументы, которые необходимы. То есть, если значение аргумента cond истинно, то вычисляется только значение аргумента x , а значение аргумента y не вычисляется, и наоборот.
- Данная функция является управляющим оператором и не работает с операторами, которые модифицируют функции, такими как оператор векторизации.

П11.3. **mod(x, y)**

Данная функция возвращает остаток от деления числа x на число y . Возвращаемое значение имеет тот же знак, что и значение аргумента x . Аргументы x и y — вещественные скаляры, причем y отлично от нуля.

П11.4. **Цикл for**

Циклы представляют собой блоки кода, содержащие один или несколько операторов, выполнение которых повторяется до тех пор, пока не выполнится условия завершения цикла.

Цикл **for** имеет следующий синтаксис:

$$\text{for } x \in Y \\ z$$

Для вставки цикла в программу необходимо выбрать соответствующую команду на панели инструментов или использовать комбинацию клавиш **<Ctrl> + <">**. Не следует печатать слово «**for**», оно не будет опознано как оператор.

Данная конструкция повторяет выполнение оператора z для каждого значения x из диапазона Y .

x — любое допустимое в *MathCAD*'е имя переменной.

Y — значение или последовательность значений. В большинстве случаев используется *диапазон значений*, но допустимы также вектор, набор скалярных, векторных или матричных значений через запятую,

z — любое выражение или последовательность выражений, которые необходимо циклически выполнять — тело цикла.

Примечания:

- Цикл **for** выполняется заданное число раз.

- Если требуется прерывать выполнение цикла до завершения всех итераций, в его тело следует добавить оператор **break**.
- Если требуется перейти к следующей итерации, не дожидаясь выполнения всех операторов в теле цикла, в его тело следует добавить оператор **continue**.

Приложение 12. Работа в математическом пакете *MathCAD*.**Комбинации клавиш.**

Многие команды и операторы в *MathCAD*'е вводятся с использованием панелей инструментов. Большинство из них имеют альтернативный способ ввода — комбинации клавиш. Некоторые из них приведены в данном приложении.

Комбинация клавиш	Оператор или команда
[Оператор индекса. Курсор опускается в подстрочный индекс и подсвечивается место для указания индекса в массиве.
.	Форматирование: подстрочный индекс. Позволяет использовать для переменной или функции имя с подстрочным текстовым индексом. Следует отличать от оператора индексирования. Форматирование не несет никакого математического смысла, а лишь делает программу удобочитаемой.
^	Оператор возведения в степень. Курсор поднимается в надстрочный индекс и подсвечивается место для указания степени.
	Оператор модуля или оператор определителя. Если аргумент оператора представляет собой скалярную величину, то возвращается её абсолютное значение. Если аргумент оператора матрица, то вычисляется её определитель.
<Ctrl> + 3	Логический оператор неравенства.

<Ctrl> + 0	Логический оператор «больше либо равно».
<Ctrl> + 9	Логический оператор «меньше либо равно».
<Ctrl> + =	Логический оператор равенства.
<Ctrl> + G	Буква, введенная перед нажатием данной комбинации клавиш, переводится в греческий алфавит.
@	В документ вставляется график в декартовой системе координат.
<Ctrl> + M	Данная комбинация клавиш предназначена для создания матрицы или вектора.
<F9>	Вычисление выделенной области.
<Ctrl> + <F9>	Вычисление всего документа.

Учебное издание

Усанов Дмитрий Александрович,
Скрипаль Анатолий Владимирович,
Скрипаль Александр Владимирович,
Абрамов Антон Валерьевич

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРО И
НАНОСТРУКТУР**

Учебное пособие

для студентов факультета нано- и биомедицинских технологий

Форма издания: Электронная