



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИЭиАС
В.Р. Храмшин

03.03.2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Направление подготовки (специальность)
11.03.04 Электроника и микроэлектроника

Направленность (профиль/специализация) программы
Проектирование и программирование систем Интернета вещей

Уровень высшего образования - бакалавриат

Форма обучения
очная

Институт/ факультет	Институт энергетики и автоматизированных систем
Кафедра	Электроники и микроэлектроники
Курс	3
Семестр	6

Магнитогорск
2021 год

Рабочая программа составлена на основе ФГОС ВО - бакалавриат по направлению подготовки 11.03.04 Электроника и микроэлектроника (приказ Минобрнауки России от 19.09.2017 г. № 927)


Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Электроники и микроэлектроники
10.02.2021 г. протокол № 6

Зав. кафедрой _____  С.И. Лукьянов

Рабочая программа одобрена методической комиссией ИЭиАС
03.03.2021 г. протокол № 5

Председатель _____  В.Р. Храмшин

Рабочая программа составлена:

доцент кафедры ЭиМЭ, канд. техн. наук _____  Н.В. Швидченко

Рецензент:

директор СЦ ООО ТЕХНОАП Инжиниринг, канд. техн. наук

_____  Е.С. Суспицын

Лист актуализации рабочей программы

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2022 - 2023 учебном году на заседании кафедры Электроники и микроэлектроники

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ С.И. Лукьянов

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2023 - 2024 учебном году на заседании кафедры Электроники и микроэлектроники

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ С.И. Лукьянов

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024 - 2025 учебном году на заседании кафедры Электроники и микроэлектроники

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ С.И. Лукьянов

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025 - 2026 учебном году на заседании кафедры Электроники и микроэлектроники

Протокол от _____ 20__ г. № ____
Зав. кафедрой _____ С.И. Лукьянов

1 Цели освоения дисциплины (модуля)

Целью изучения дисциплины «Наноэлектроника» является формирование научной основы, необходимой для создания элементов, приборов и устройств микро- и наноэлектроники.

Задачей изучения дисциплины «Наноэлектроника» является изучение законов физики наноразмерных полупроводниковых структур для последующего использования их при разработке и эксплуатации приборов и устройств микроволновой, цифровой и оптической электроники, а также при проектировании электронных схем на их основе.

2 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина Наноэлектроника входит в часть учебного плана формируемую участниками образовательных отношений образовательной программы.

Для изучения дисциплины необходимы знания (умения, владения), сформированные в результате изучения дисциплин/ практик:

Схемотехника

Расчет электронных схем

Физика конденсированного состояния

Физические основы электроники

Элементы цифровой техники

Знания (умения, владения), полученные при изучении данной дисциплины будут необходимы для изучения дисциплин/практик:

Основы технологии электронной компонентной базы

Выполнение и защита выпускной квалификационной работы

Схемотехнические средства сопряжения

Средства передачи информации

Основы проектирования электронной компонентной базы

3 Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) и планируемые результаты обучения

В результате освоения дисциплины (модуля) «Наноэлектроника» обучающийся должен обладать следующими компетенциями:

Код индикатора	Индикатор достижения компетенции
ПК-1	Способен разрабатывать структурные и функциональные схемы электронных систем и комплексов, принципиальных схем устройств с использованием средств компьютерного проектирования, проведением проектных расчетов и технико-экономическим обоснованием принимаемых решений
ПК-1.1	Разрабатывает эскизный проект, включающий: выбор структурной схемы электронного устройства или системы путем сопоставления различных вариантов и их оценки с точки зрения технических и экономических требований; рассчитывает все необходимые показатели структурной схемы электронного устройства или системы, в том числе показатели качества; выбирает и обосновывает схемы вспомогательных устройств
ПК-1.2	Производит технико-экономическое обоснование принятого решения с расчетами себестоимости устройства и стоимости его эксплуатации; сравнивает с аналогами по технико-экономическим характеристикам

2.1 Традиционные методы формирования пленок	6	2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
2.2 Методы, основанные на использовании сканирующих зондов		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
2.3 Нанолитография		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
2.4 Саморегулирующиеся процессы		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
2.5 Формирование и свойства наноструктурированных материалов		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
Итого по разделу		10			5			
3. Элементы и приборы нанoeлектроники								
3.1 Одноэлектроника	6	2			2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.2 Спинтроника		2			2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.3 Квантовые компьютеры		2			2,2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.4 Нанофотоника		2			2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.5 Молекулярная электроника		2			2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2

3.6 Мемристорная электроника		2			2	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.7 Полимерная электроника		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
3.8 Наноплазмоника		2			1	Самостоятельное изучение учебной литературы; Написание реферата	реферат	ПК-1.1, ПК-1.2
Итого по разделу		16			14,2			
Итого за семестр		34	17/6И		19,2		зач	
Итого по дисциплине		34	17/6И		19,2		зачет с оценкой	

5 Образовательные технологии

Для реализации предусмотренных видов учебной работы в качестве образовательных технологий в преподавании дисциплины «Нанозлектроника» используются традиционная и модульно-компетентностная технологии.

Предусмотрены обзорные лекции – для систематизации и закрепления знаний по дисциплине, информационные лекции – для ознакомления со стандартами и справочной информацией, лекции визуализации – для наглядного представления способов решения задач, проблемная лекция – для развития исследовательских навыков и изучения способов решения задач.

Лабораторные занятия по дисциплине проводятся как в традиционной, так и в интерактивной форме. В рамках интерактивного обучения применяются IT-методы (использование сетевых мультимедийных учебников, электронных образовательных ресурсов по данной дисциплине; совместная работа в малых группах (2-3 студента) – прохождение всех этапов и методов выполнения лабораторных работ; индивидуальное обучение.

6 Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Представлено в приложении 1.

7 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

Представлены в приложении 2.

8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) Основная литература:

1. Игнатов, А.Н. Микросхемотехника и нанозлектроника [Электронный ресурс] : учебное пособие / А.Н. Игнатов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 528 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/2035>. — Загл. с экрана.

2. Орлова, М.Н. Нанозлектроника. Курс лекций [Электронный ресурс] : учебное пособие / М.Н. Орлова, И.В. Борзых. — Электрон. дан. — Москва : МИСИС, 2013. — 50 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/47464>. — Загл. с экрана.

б) Дополнительная литература:

1. Нанозлектроника: теория и практика [Электронный ресурс] : учебник / В.Е. Борисенко [и др.]. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 369 с.

2. Лозовский, В.Н. Нанотехнологии в электронике. Введение в специальность [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.Н. Лозовский, С.В. Лозовский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 332 с.

в) Методические указания:

Методические указания приведены в приложении 3.

г) Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

Наименование ПО	№ договора	Срок действия лицензии
-----------------	------------	------------------------

Scilab Computation Engine	свободно распространяемое ПО	бессрочно
MS Windows 7 Professional(для классов)	Д-1227-18 от 08.10.2018	11.10.2021
MS Office 2007 Professional	№ 135 от 17.09.2007	бессрочно

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Название курса	Ссылка
Поисковая система Академия Google (Google Scholar)	URL: https://scholar.google.ru/

9 Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает:

Лекционная аудитория: Мультимедийные средства хранения, передачи и представления информации

Компьютерный класс : Персональные компьютеры с установленным специализированном ПО для моделирования, структурных, электронных, магнитных и оптических свойств микро- и наноструктур (Scilab).

Аудитория для самостоятельной работы: компьютерный класс Персональные компьютеры с установленным специализированном ПО для моделирования, структурных, электронных, магнитных и оптических свойств микро- и наноструктур (Scilab).

По дисциплине «Наноэлектроника» предусмотрена аудиторная и внеаудиторная самостоятельная работа обучающихся.

Аудиторная самостоятельная работа студентов предполагает выполнение лабораторных работ и решение контрольных задач на лабораторных занятиях.

Лабораторные работы:

1. Квантовое ограничение.
2. Баллистический транспорт носителей заряда.
3. Туннелирование носителей заряда.
4. Спиновые эффекты.
5. Структуры с квантовым ограничением, создаваемым внутренним электрическим полем.
6. Структуры с квантовым ограничением, создаваемым внешним электрическим полем.

Примерные аудиторные контрольные работы (АКР):

АКР №1 «**Физические основы наноэлектроники**»:

1. Что такое «корпускулярно-волновой дуализм» микрообъекта? Что такое «волна де-Бройля»?
2. Что такое «волновая функция»? Каков физический смысл квадрата волновой функции?
3. В каких случаях для расчёта волновой функции используется стационарное уравнение Шрёдингера?
4. Что такое «соотношение неопределённостей Гейзенберга»?
5. Что такое «низкоразмерная структура»?
6. Что такое «квантовое ограничение»?
7. Что такое «потенциальный колодец»?
8. Что такое «потенциальный барьер»?
9. Что значит «разрешённое энергетическое состояние электрона»? Нарисуйте качественную зависимость плотности энергетических состояний $n(E)$ свободного электрона.
10. Что такое «квантовая плёнка»? Нарисуйте качественную зависимость плотности энергетических состояний $n(E)$ для квантовой плёнки.
11. Что такое «квантовый шнур»? Нарисуйте качественную зависимость плотности энергетических состояний $n(E)$ для квантового шнура.
12. Что такое «квантовая точка»? Нарисуйте качественную зависимость плотности энергетических состояний $n(E)$ для квантовой точки.
13. Что такое «двумерный электронный газ»?
14. Что такое «баллистический транспорт носителей заряда»?
15. Что такое «средняя длина свободного пробега электрона»?
16. Что такое «уровень Ферми» и «длина волны Ферми»?
17. Что значит «универсальная баллистическая проводимость»?
18. Что такое «квантовый точечный контакт»?
19. Что такое «туннелирование квантовой частицы»?
20. Что такое «надбарьерное отражение квантовой частицы»?
21. Что такое «туннельная прозрачность потенциального барьера»?
22. Что такое «коэффициент прохождения потенциального барьера»?
23. Что такое «квантовые числа»?

24. Что такое «спин» и «спиновое число»? Какие значения может принимать спиновое число у электрона?
25. Что такое «ограничение Паули»?
26. Что такое «собственная спиновая поляризация электронов в материале»?
27. Что такое «температура Кюри»?
28. Что такое «длина спиновой релаксации»?

АКР №2 «Низкоразмерные структуры»:

1. Рассчитайте и постройте графически соотношение между шириной одномерной прямоугольной потенциальной ямы с бесконечной высотой барьера и энергией первого разрешенного состояния E_1 в ней, варьируемой в диапазоне от 0,05 эВ до 2 эВ для электронов с эффективными массами $m^* = 0,05m_0, 0,10m_0$ и $0,15m_0$

2. Рассчитайте и постройте графически соотношение между шириной квантовой прямоугольной потенциальной ямы с высотой барьера $U_0 = 0,5, 1,0, 3$ эВ и энергией первого разрешенного состояния $E_1 = 0,05U_0, 0,1U_0, 0,3U_0, 0,50,05/U_0$ для электронов с эффективной массой $m^* = 0,06m_0$.

3. Рассчитайте значение ширины прямоугольной потенциальной ямы, при котором энергетический зазор между первым и вторым разрешенными состояниями в ней был равен 0,05, 0,1 и 0,13 эВ при эффективной массе электронов $m^* = 0,06m_0$ и высоте барьера $U_0 = 2$ эВ и $U_0 = \infty$.

4. Рассчитайте и постройте график зависимости плотности состояний электронов в квантовой пленке толщиной 20нм, в квантовом шнуре с сечением $20 \times 20 \text{ нм}^2$, квантовой точке $20 \times 20 \times 20 \text{ нм}^3$ от энергии E , отсчитываемой от дна зоны проводимости полупроводника, из которого они изготовлены, при эффективной массе электрона $0,04m_0$ и $0,07m_0$.

5. Рассчитайте и постройте график зависимости концентрации электронов в квантовой яме, квантовом шнуре и квантовой точке при комнатной температуре от положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости ($E_F - E_C$) в полупроводнике, из которого они изготовлены. Ширина квантовой ямы – 10 нм, сечение квантового шнура – $10 \times 10 \text{ нм}^2$, размеры квантовой точки – $10 \times 10 \times 10 \text{ нм}^3$. Эффективная масса электрона – $0,06m_0$. Отношение $(E_F - E_C)/(kT)$ варьировать в пределах от –4 до +10.

АКР №3 «Одноэлектронное и резонансное туннелирование»:

1. Для однобарьерной туннельной структуры рассчитайте изменение электростатической энергии ΔE , пороговое напряжение $|V_t|$, величину кулоновского зазора и критические условия для проявления кулоновской блокады. Емкость островка варьируйте в диапазоне $10^{-19} + 10^{-18}$ Ф, а величину внешнего приложенного напряжения – от нуля до значения, при котором возникает кулоновская блокада.

2. Рассчитайте вольтамперные характеристики симметричной двухбарьерной туннельной структуры, соответствующие упругому и неупругому сотуннелированию в ней при температурах 10, 80 и 300К в диапазоне приложенных напряжений 0–2 В при емкости барьеров 10–18 Ф каждый.

Примите:

$\sigma_1 = \sigma_2 = 0,5 \text{ (мкОм м)}^{-1}$ – проводимости барьеров в отсутствии туннельных процессов; $\Delta = e^2/C$ – средний энергетический зазор между состояниями в островке; $E_1 = 0,05$ эВ, $E_2 = 0,03$ эВ.

3. Рассчитайте вольтамперную характеристику двухбарьерной одноэлектронной структуры в диапазоне 0–3 В с различными туннельными прозрачностями барьеров при значении меньшей туннельной прозрачности $T=0,7$ для двух значений емкости островка $5 \cdot 10^{-19} \Phi$ и $2 \cdot 10^{-19} \Phi$.

4. Рассчитайте условия поддержания в островке одноэлектронного транзистора постоянного количества электронов $n=0, 1, 2, 3, 4, 5$ в зависимости от потенциала затвора в диапазоне 0–3В при одинаковых емкостях истока и стока $C_S = C_d = 10^{-17} \Phi$ и емкости затвора $C_g=10^{-16} \Phi$. Найдите рабочие температурные условия для этого транзистора.

5. Для симметричной двухбарьерной резонансно-туннельной структуры AlAs/GaAs/AlAs определите зависимость коэффициента прохождения электронов от их энергии $T(E_z)$ при ширине барьеров 1 и 2нм, высоте барьеров $U=1,3$ и $1,5 \text{эВ}$, ширине колодца 2 и 3нм. Энергию электронов варьируйте в диапазоне 0– U . Эффективную массу электронов в AlAs примите равной $0,15m_0$, а в GaAs – равной $0,067m_0$.

6. Рассчитайте энергетическое положение резонансных уровней в резонансно-туннельной структуре AlGaAs/GaAs/AlGaAs с шириной барьеров 1нм и шириной колодцев 1, 2 и 3нм, используя условия квантового ограничения и коэффициенты туннельной прозрачности структуры в рамках приближения квантово-механического импеданса потенциальных барьеров. Эффективную массу электронов в AlGaAs примите равной $0,09m_0$, в GaAs равной $0,067m_0$, $U=0,23 \text{эВ}$.

7. Определите зависимость тока от приложенного потенциала в области 0–0,1 В для двухбарьерных резонансно-туннельных структур AlAs/GaAs/AlAs с резонансными уровнями энергии $0,06 \text{эВ}$ и $0,07 \text{эВ}$ в приближении их лоренцевской формы. Примите $E_F=0,054 \text{эВ}$, $m^* = 0,067m_0$, $\tau=10^{-13} \text{с}$, $J_0= 4,5 \cdot 10^3 \text{А/м}^2$, $T=300\text{К}$.

АКР №3 «Спин-контролируемое туннелирование»:

1. Рассчитайте коэффициент прохождения для электронов со спином вверх и спином вниз наноструктуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик в зависимости от высоты туннельного барьера U в диапазоне 2–5эВ для толщин диэлектрика 1, 2 и 3нм.

Примите:

$\hbar_0=1,9 \text{эВ}$ – молекулярное поле в эмиттирующем электроны ферромагнетике;

$E_F=1,3 \text{эВ}$ – энергия Ферми в эмиттирующем электроны ферромагнетике;

$m_d=0,4m_0$ – эффективная масса электронов в диэлектрике;

$\theta = \pi/4$ – угол между векторами намагниченности ферромагнитных слоев.

2. Рассчитайте относительное изменение коэффициентов прохождения для электронов со спином вверх и спином вниз наноструктуры ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик в зависимости от угла θ между векторами намагниченности ферромагнитных слоев в диапазоне от 0 до π .

Примите:

$\hbar_0=1,7 \text{эВ}$ – молекулярное поле в эмиттирующем электроны ферромагнетике;

$E_F=1,3 \text{эВ}$ – энергия Ферми в эмиттирующем электроны ферромагнетике;

$m_d=0,45m_0$ – эффективная масса электронов в диэлектрике;

$d=2 \text{нм}$ - толщина диэлектрика;

$U=1,5, 2$ и 4эВ – высота туннельного барьера.

3. Рассчитайте зависимости проводимости наноструктуры Co/диэлектрик/CoFe от напряженности внешнего магнитного поля в диапазоне $1 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^5 \text{А/м}$ при температурах 10, 100 и 300К.

Примите:

$d=2\text{нм}$ – толщина диэлектрика;

$U=3\text{эВ}$ – высота туннельного барьера;

$M=0,145\text{Тл}$ – намагниченность насыщения CoFe (реверсируемого во внешнем магнитном поле электрода);

$C_1=1,7 \cdot 10^{-7}\text{Дж/м}^3$ – константа анизотропии CoFe;

$C_2=0,7 \cdot 10^{-7}\text{Дж/м}^3$ – константа магнитной связи между ферромагнитными электродами;

$G_0=(300\text{ Ом/см}^2)^{-1}$ – проводимость структуры при $T=0\text{К}$;

$G_s(T)=0$.

Внеаудиторная самостоятельная работа обучающихся осуществляется в виде изучения литературы по соответствующему разделу с проработкой материала. По двум разделам предусмотрена подготовка рефератов. При подготовке рефератов студенты должны пользоваться отечественными и зарубежными литературными источниками.

Примерные темы рефератов по разделам «Методы формирования наноэлектронных структур» и «Элементы и приборы наноэлектроники»:

Углеродные наноматериалы и структуры на их основе. Свойства, сфера применения.

1. Одноэлектроника (single electronics). Физические основы. Устройства одноэлектроники.

2. Спинтроника (spintronics). Физические основы. Устройства спинтроники.

3. Квантовые компьютеры. Квантовые вычисления. Элементная база квантовых вычислений.

4. Молекулярная электроника. Основы молекулярной электроники. Устройства молекулярной электроники.

5. Нанопотоника. Физические основы. Сфера применения. Устройства нанопотоники.

6. Мемристорная электроника (memristor). Свойства мемристора. Устройства на базе мемристора.

7. Полимерная электроника. Физические основы. Устройства полимерной электроники.

8. Сверхпроводимость и электронные устройства на сверхпроводниках.

9. Наноплазмоника. Физические основы наноплазмоники. Устройства наноплазмоники.

10. Методы формирования наноструктур, основанные на использовании сканирующих зондов.

11. Нанолитография. Виды литографии. Физические основы. Достоинства и недостатки.

12. Саморегулирующиеся процессы. Самосборка и самоорганизация. Атомные кластеры

13. Методы формирования тонких плёнок в наноэлектронике.

14. Наноэлектромеханические системы (NEMS). Материалы и технологии.

а) Планируемые результаты обучения и оценочные средства для проведения промежуточной аттестации:

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
Код и содержание компетенции: способность учитывать современные тенденции развития электроники, измерительной и вычислительной техники, информационных технологий в своей профессиональной деятельности (ОПК-7)		
Знать	<ul style="list-style-type: none"> – перспективные направления развития техники в области микро- и нанoeлектроники; – элементную базу современной электроники; – физические основы микро- и нанoeлектроники 	<ul style="list-style-type: none"> – Как устроена установка молекулярно-лучевой эпитаксии? – Какие методы используют для мониторинга процесса молекулярно-лучевой эпитаксии? – В чем суть метода электрохимического осаждения материалов? – Какие подходы используют для формирования наноструктур - нанопроволок, нанотрубок и наноточек - электрохимическим осаждением материалов? – В чем сущность метода электрохимического оксидирования (анодирования) материалов? – Какое явление лежит в основе метода сканирующей туннельной микроскопии? – Какими элементами осуществляют перемещение зонда на субнанометровые расстояния? – Каковы основные режимы работы сканирующего туннельного микроскопа? – Какое явление лежит в основе метода атомной силовой микроскопии? – Как контролируют отклонение консоли с зондом от равновесного положения в атомном силовом микроскопе? – Каковы типичные параметры электронного луча, используемого для электронно-лучевой литографии? – Какие материалы используют в качестве резистов для электронно-лучевой литографии? – Какое разрешение обеспечивает электронно-лучевая литография? Что принципиально ограничивает разрешающую способность электронно-лучевой литографии? – Что такое самосборка и какой движущей силой она обусловлена? – Какие химические соединения

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p><i>используют в качестве прикрепляющей группы, промежуточной группы, поверхностной функциональной группы?</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>Что такое самоорганизация и какой движущей силой она обусловлена?</i> – <i>Что такое золь? Что такое гель? Как происходят золь-гель-превращения?</i> – <i>Каковы низкоразмерные формы углеродных структур?</i> – <i>Что такое графен? Как получают графен? Какими основными свойствами обладает графен?</i> – <i>Что такое углеродная нанотрубка и какими параметрами структуры она характеризуется?</i> – <i>Какими электронными свойствами обладают одностенные углеродные нанотрубки?</i> – <i>Каковы электронные свойства многостенных углеродных нанотрубок?</i> – <i>Какие методы используют для получения углеродных нанотрубок?</i> – <i>Что такое фуллерены?</i>
<p>Уметь:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – <i>применять знания в профессиональной деятельности. Отличать эффективное решение от неэффективного</i> – <i>выполнять расчёт характеристик электронных приборов микро- и наноэлектроники</i> 	<ul style="list-style-type: none"> – <i>Рассчитайте и постройте графически соотношение между шириной квантовой прямоугольной потенциальной ямы с высотой барьера $U_0 = 0,5, 1,0, 3$ эВ и энергией первого разрешенного состояния $E_1 = 0,05U_0, 0,1U_0, 0,3U_0, 0,50,05/U_0$ для электронов с эффективной массой $m^* = 0,06m_0$.</i> – <i>Рассчитайте значение ширины прямоугольной потенциальной ямы, при котором энергетический зазор между первым и вторым разрешенными состояниями в ней был равен $0,05, 0,1$ и $0,13$ эВ при эффективной массе электронов $m^* = 0,06m_0$ и высоте барьера $U_0 = 2$ эВ и $U_0 = \infty$.</i> – <i>Рассчитайте и постройте график зависимости плотности состояний электронов в квантовой пленке толщиной 20 нм, в квантовом шнуре с</i>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p><i>сечением $20 \times 20 \text{ нм}^2$, квантовой точке $20 \times 20 \times 20 \text{ нм}^3$ от энергии E, отсчитываемой от дна зоны проводимости полупроводника, из которого они изготовлены, при эффективной массе электрона $0,04m_0$ и $0,07m_0$.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <i>– Рассчитайте и постройте график зависимости концентрации электронов в квантовой яме, квантовом шнуре и квантовой точке при комнатной температуре от положения уровня Ферми относительно дна зоны проводимости ($E_F - E_C$) в полупроводнике, из которого они изготовлены. Ширина квантовой ямы – 10 нм, сечение квантового шнура – $10 \times 10 \text{ нм}^2$, размеры квантовой точки – $10 \times 10 \times 10 \text{ нм}^3$. Эффективная масса электрона – $0,06m_0$. Отношение $(E_F - E_C)/(k_B T)$ варьировать в пределах от -4 до $+10$.</i> <i>– Рассчитайте вольтамперные характеристики симметричной двухбарьерной туннельной структуры, соответствующие упругому и неупругому сотуннелированию в ней при температурах $10, 80$ и 300 К в диапазоне приложенных напряжений $0-2 \text{ В}$ при емкости барьеров $10-18 \text{ Ф}$ каждый.</i> <p><i>Примите:</i> $\sigma_1 = \sigma_2 = 0,5 \text{ (мкОм м)}^{-1}$ – проводимости барьеров в отсутствии туннельных процессов; $\Delta = e^2/C$ – средний энергетический зазор между состояниями в островке; $E_1 = 0,05 \text{ эВ}$, $E_2 = 0,03 \text{ эВ}$.</p> <ul style="list-style-type: none"> <i>– Рассчитайте вольтамперную характеристику двухбарьерной одноэлектронной структуры в диапазоне $0-3 \text{ В}$ с различными туннельными прозрачностями барьеров при значении меньшей туннельной прозрачности $T=0,7$ для двух значений емкости островка $5 \cdot 10^{-19} \text{ Ф}$ и $2 \cdot 10^{-19} \text{ Ф}$.</i> <i>– Рассчитайте условия поддержания в</i>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		<p><i>островке одноэлектронного транзистора постоянного количества электронов $n=0, 1, 2, 3, 4, 5$ зависимости от потенциала затвора в диапазоне $0-3В$ при одинаковых емкостях истока и стока $C_S = C_d = 10-17Ф$ и емкости затвора $C_g=10-16Ф$. Найдите рабочие температурные условия для этого транзистора.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>Для симметричной двухбарьерной резонансно-туннельной структуры $AlAs/GaAs/AlAs$ определите зависимость коэффициента прохождения электронов от их энергии $T(E_z)$ при ширине барьеров 1 и $2нм$, высоте барьеров $U=1,3$ и $1,5эВ$, ширине колодца 2 и $3нм$. Энергию электронов варьируйте в диапазоне $0-U$. Эффективную массу электронов в $AlAs$ примите равной $0,15m_0$, а в $GaAs$ – равной $0,067m_0$.</i> – <i>Рассчитайте энергетическое положение резонансных уровней в резонансно-туннельной структуре $AlGaAs/GaAs/AlGaAs$ с шириной барьеров $1нм$ и шириной колодцев $1, 2$ и $3нм$, используя условия квантового ограничения и коэффициенты туннельной прозрачности структуры в рамках приближения квантово-механического импеданса потенциальных барьеров. Эффективную массу электронов в $AlGaAs$ примите равной $0,09m_0$, в $GaAs$ равной $0,067m_0$, $U=0,23эВ$.</i>
Владеть:	– <i>практическими навыками моделирования, исследования и проектирования структурных, электронных, магнитных и оптических свойств микро- и наноструктур</i>	<p><i>Выполнение и защита лабораторных работ:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – <i>Квантовое ограничение.</i> – <i>Баллистический транспорт носителей заряда.</i> – <i>Туннелирование носителей заряда.</i> – <i>Спиновые эффекты.</i> – <i>Элементы низкоразмерных структур. Моделирование атомных конфигураций.</i> – <i>Структуры с квантовым ограничением, создаваемым внутренним электрическим полем.</i>

Структурный элемент компетенции	Планируемые результаты обучения	Оценочные средства
		– Структуры с квантовым ограничением, создаваемым внешним электрическим полем.
Код и содержание компетенции: готовность анализировать и систематизировать результаты исследований, представлять материалы в виде научных отчетов, публикаций, презентаций (ПК-3)		
Знать	<ul style="list-style-type: none"> – правила оформления отчетов – правила подготовки публикаций – методы анализа результатов исследований 	<p><i>Подготовить доклад по разделу «Методы формирования наноэлектронных структур» и «Элементы и приборы наноэлектроники» (темы докладов приведены в разделе 6). При подготовке доклада студенты должны пользоваться отечественными и зарубежными литературными источниками. В докладе оценивается значимость и практическая пригодность предложенных технических решений.</i></p>
Уметь:	<ul style="list-style-type: none"> – документировать результаты исследований – представлять материалы в виде научных отчетов – анализировать и систематизировать результаты исследований 	
Владеть:	<ul style="list-style-type: none"> – инструментами подготовки презентаций – навыками подготовки публикаций – навыками подготовки и редактирования публикаций 	

Введение

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 всемогущи и не всеобъемлющи, 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:

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

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 (z, E) , характеризующая движение электронов в перпендикулярной 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:

$$\begin{cases} \Psi_A = t_{11} \cdot \Psi_B + t_{12} \cdot \tilde{\Psi}_B, \\ \tilde{\Psi}_A = t_{21} \cdot \Psi_B + t_{22} \cdot \tilde{\Psi}_B, \end{cases} \quad (2)$$

где A, B — значения огибающей волновой функции на интерфейсе со стороны слоя A и со стороны слоя B соответственно,

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

$m_{A,B}$ — 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 постулируется или осуществляется путем сравнения с результатами эксперимента или расчета в рамках какой-либо микроскопической модели. Чаще других используются граничные условия, связанные с именем Бастарда:

$$\begin{cases} \Psi|_A = \Psi|_B \\ \frac{1}{m_A} \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_A = \frac{1}{m_B} \left. \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right|_B \end{cases}$$

Решая уравнение (1) с граничными условиями (2), можно построить огибающие волновых функций электронов с различными значениями энергии E .

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

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, независимых от конкретной формы периодического потенциала. 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. В этом случае возможно проведение строгого решения уравнения Шредингера. В модели Кронига-Пенни потенциал имеет вид прямоугольных ям (рисунок 1), которые чередуются с прямоугольными потенциальными барьерами:

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

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

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

где

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n E},$$

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

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

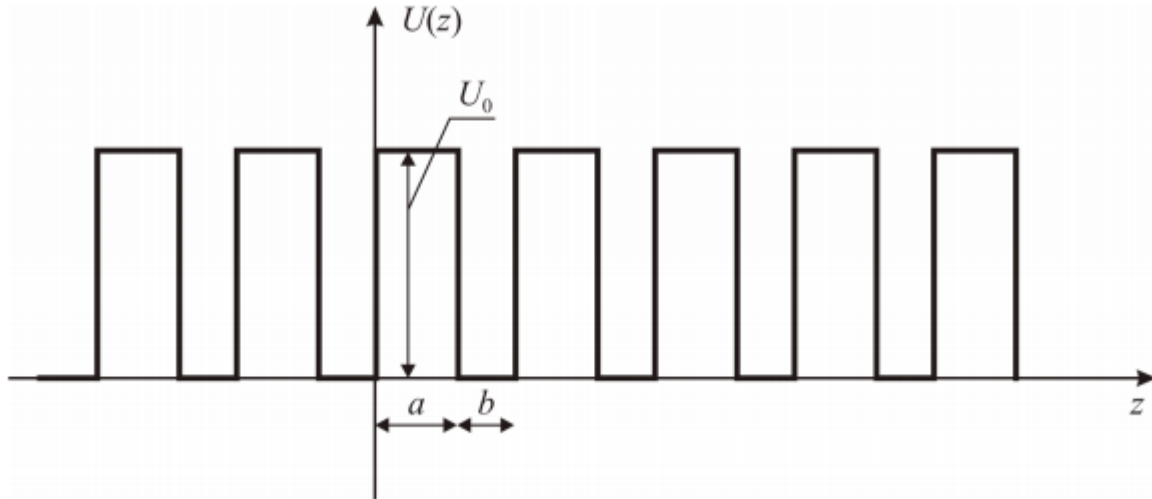


Рисунок 1 – Потенциальный рельеф для электрона в кристалле (модель Кронига–Пенни).

Из граничных условий (2), принимая во внимание постоянство эффективной массы во всем кристалле, получаем следующую систему алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned}
 A_n + B_n &= C_{n-1}e^{\beta b} + D_{n-1}e^{-\beta b}, \\
 j\alpha A_n - j\alpha B_n &= C_{n-1}\beta e^{\beta b} - D_{n-1}\beta e^{-\beta b}, \\
 A_n e^{j\alpha a} + B_n e^{-j\alpha a} &= C_n + D_n, \\
 j\alpha A_n e^{j\alpha a} - j\alpha B_n e^{-j\alpha a} &= \beta C_n - \beta D_n.
 \end{aligned} \tag{3}$$

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:

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

где λ – некоторый вещественный параметр.

Отсюда:

$$\begin{aligned}
 C_{n-1} &= C_n e^{-j\lambda}, \\
 D_{n-1} &= D_n e^{-j\lambda}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Подставляя значения (4) в систему уравнений (3), получим систему из

четырёх 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 (3):

$$\cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) = \cos(\lambda). \quad (5)$$

Анализ уравнения (5) затруднен тем, что энергия входит в α и β , однако его можно упростить, представив потенциал в ещё более идеализированном 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:

$$P = \lim_{\substack{b \rightarrow 0 \\ U_0 \rightarrow \infty \\ U_0 b = \text{const}}} \frac{\beta^2 ab}{2},$$

от уравнения (5) перейдем к более простому:

$$\cos(\alpha a) + P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} = \cos(\lambda). \quad (6)$$

Уравнение (6) 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 (6) изобразим графически его левую часть как функцию аргумента a (рисунок 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 рисунке 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.

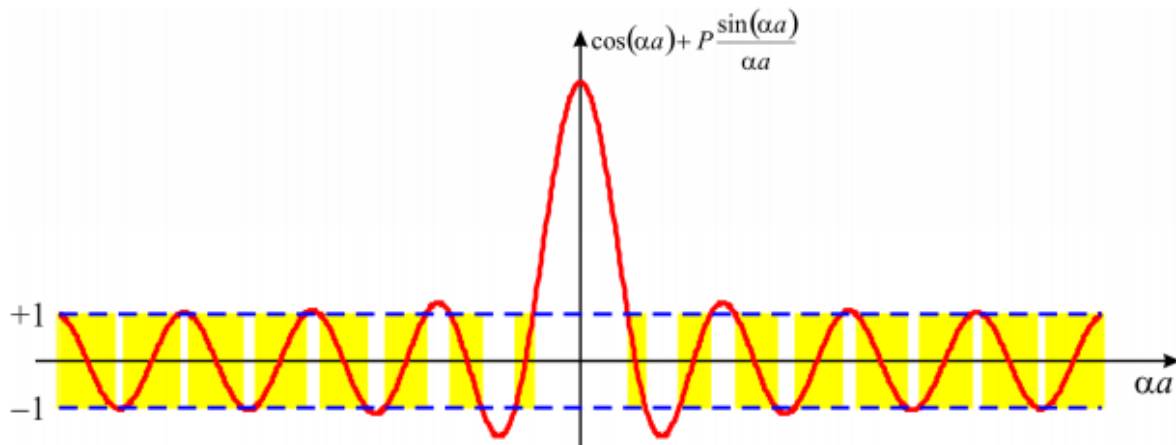


Рисунок 2 - Графический анализ уравнения Кронига–Пенни

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.

Задание для компьютерного моделирования

1. Изобразить графически левую часть уравнения (6), схематически изобразить на получившемся графике зоны разрешенных и запрещенных значений a . Проиллюстрировать, как изменяется ширина разрешенных зон при изменении параметра P .
2. Проанализировать два крайних случая: $P = 0$ (электрон совершенно свободен) и $P \rightarrow \infty$ (барьер совершенно непроницаем, электрон заперт в пределах одной потенциальной ямы).

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 рисунке 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 (рисунок 3, б).

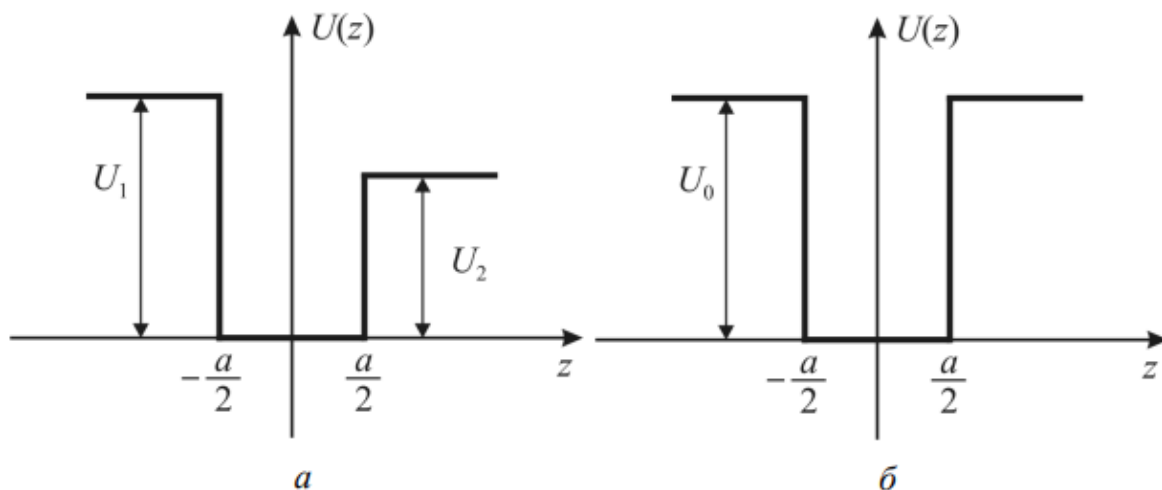


Рисунок 3 – Энергетическая диаграмма прямоугольной потенциальной ямы: *a* – несимметричной, *б* – симметричной.

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:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(z, E)}{\partial z^2} = E \cdot \psi(z, E) \quad (7)$$

с граничными условиями:

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

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

Из математической физики известно, что уравнение (7) имеет решение лишь при дискретных значениях энергии E — собственных значениях данного уравнения:

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

Система обладает симметрией по оси Oz относительно начала координат, поэтому совокупность собственных решений уравнения Шредингера (7) разбивается на подгруппы четных и нечетных решений:

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

где C — нормировочный коэффициент.

Графики огибающих волновых функций электрона в квантовой яме шириной 20 атомных монослоев (11.3 нм) для первых четырех разрешенных уровней энергии представлены на рисунке 4,а, а энергетический спектр электрона в такой яме — на рисунке 4,б. Материал ямы — *GaAs*.

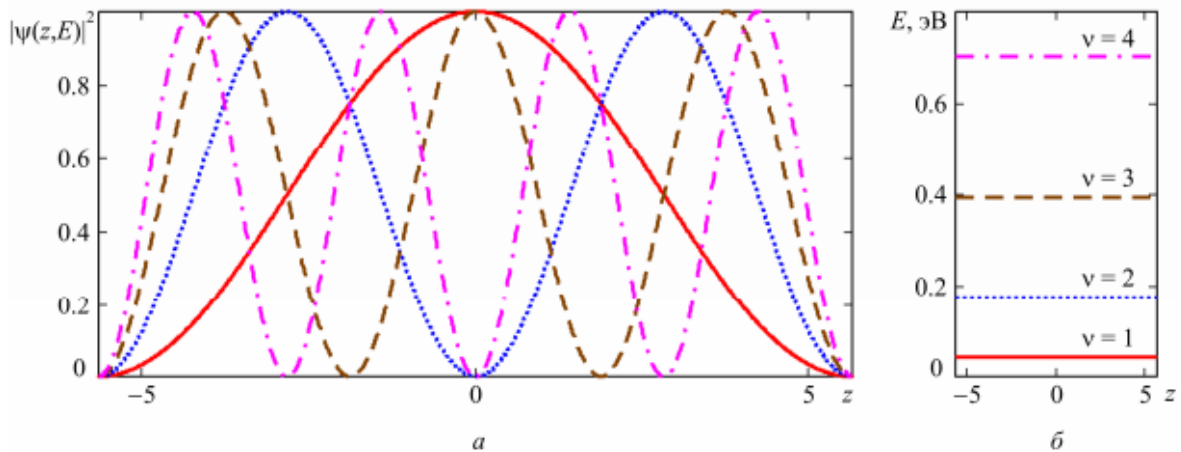


Рисунок 4 – Огибающие волновых функций (а) и квантованные уровни энергии (б) электрона в прямоугольной квантовой яме

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*.

2.2 Со стенками конечной высоты

В реальном случае стенки потенциальной ямы имеют конечную высоту, и для симметричной потенциальной ямы потенциал U_z в уравнении (1) имеет вид:

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

Решения уравнения Шредингера (1) записываются отдельно в каждой из трех областей, где потенциал U_z постоянен, в виде:

$$\begin{aligned} \psi_1(z) &= A_1 e^{\beta z}, \\ \psi_2(z) &= A_2 e^{j\gamma z} + B_2 e^{-j\gamma z}, \\ \psi_3(z) &= B_3 e^{-\beta z}. \end{aligned} \tag{8}$$

$$\text{где } \beta = \sqrt{\frac{2m_B(U_0 - E)}{\hbar^2}}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}},$$

m_A и m_B – эффективные массы электронов в материале А, образующем яму, и в материале В, образующем барьеры, соответственно. Решения Ψ_1 и Ψ_2 записаны с учетом того, что они должны равняться нулю на бесконечности того, что они должны равняться нулю на бесконечности. Значения констант A_1 , A_2 , B_2 и B_3 находятся из граничных условий, которые после подстановки туда решений (8) принимают вид:

$$\begin{cases} A_1 e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_1 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta} = A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}}, \\ A_2 e^{j\gamma\frac{a}{2}} + B_2 e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = B_3 e^{-\frac{a}{2}\beta}, \\ A_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{j\gamma\frac{a}{2}} - B_2 \frac{j\gamma}{m_A} e^{-j\gamma\frac{a}{2}} = -B_3 \frac{\beta}{m_B} e^{-\frac{a}{2}\beta}. \end{cases} \quad (9)$$

Система алгебраических уравнений (9) имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда её определитель равен нулю:

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

Раскрывая определитель и упрощая полученное выражение, приходим к уравнению:

$$\beta^2 m_A^2 \sinh(j\gamma a) + 2j\gamma\beta m_A m_B \cosh(j\gamma a) - \gamma^2 m_B^2 \sinh(j\gamma a) = 0, \quad (10)$$

определяющему разрешенные значения энергии электрона в квантовой яме.

Уравнение (10) является трансцендентным и требует численного или графического решения.

Система (9) имеет бесконечное множество решений, отличающихся друг от друга произвольным множителем. Выражая из этой системы A_2 , B_2 и B_3 через A_1 , получим частное решение в виде:

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

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

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

Графики огибающих волновых функций электрона в квантовой яме шириной 20 атомных монослоёв (11.3 нм) для первых трех разрешенных уровней энергии представлены на рисунке 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 – $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$.

Как видно из рисунка 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.

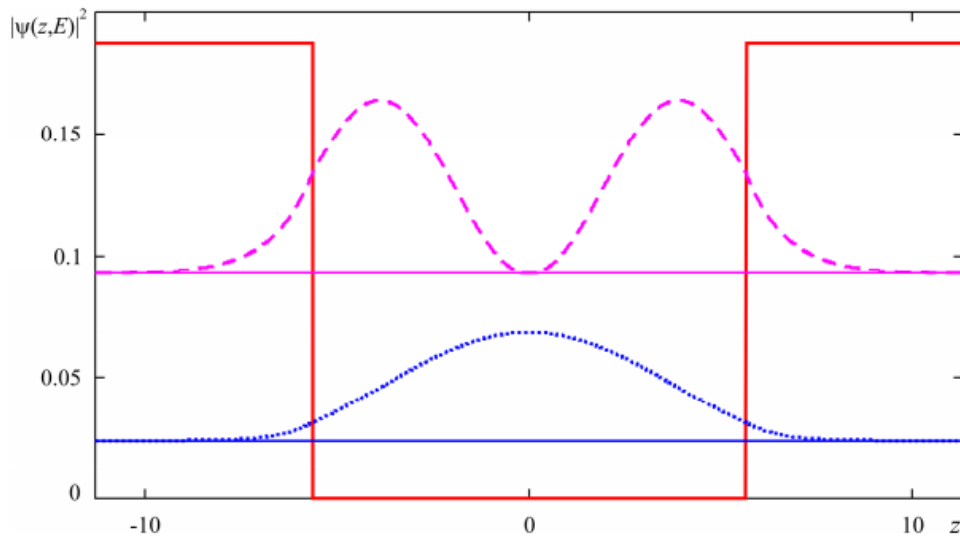


Рисунок 5 – Огибающие волновых функций и квантованные уровни энергии электрона в прямоугольной квантовой яме со стенками конечной высоты

Задание 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.

3 Моделирование движения электрона вблизи потенциальной ступеньки

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

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } z < 0, \\ U_0, & \text{если } z \geq 0, \end{cases} \quad (11)$$

и изображенном на рисунке 6. Область 1 сформирована узкозонным материалом А, область 2 — широкозонным материалом В.

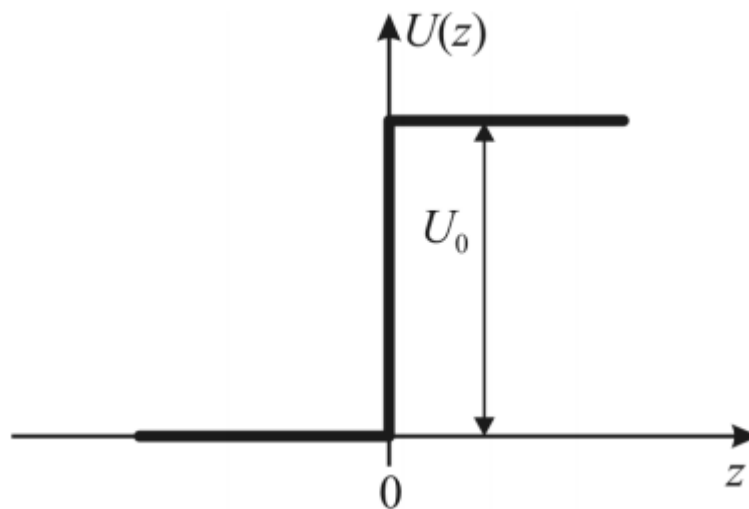


Рисунок 6 - Энергетическая диаграмма потенциальной ступеньки

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 (1) с потенциалом вида (11) в области 1 будет иметь вид:

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

где $\gamma_1 = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2}},$

где m_1 — эффективная масса электрона в материале А. 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 (1) с потенциалом вида (11) в области 2 можно записать в виде:

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

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

m_2 – эффективная масса электрона в материале В.

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:

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

откуда

$$B_1 = A_1 \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad A_2 = A_1 \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2}. \quad (12)$$

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

На рисунке 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.

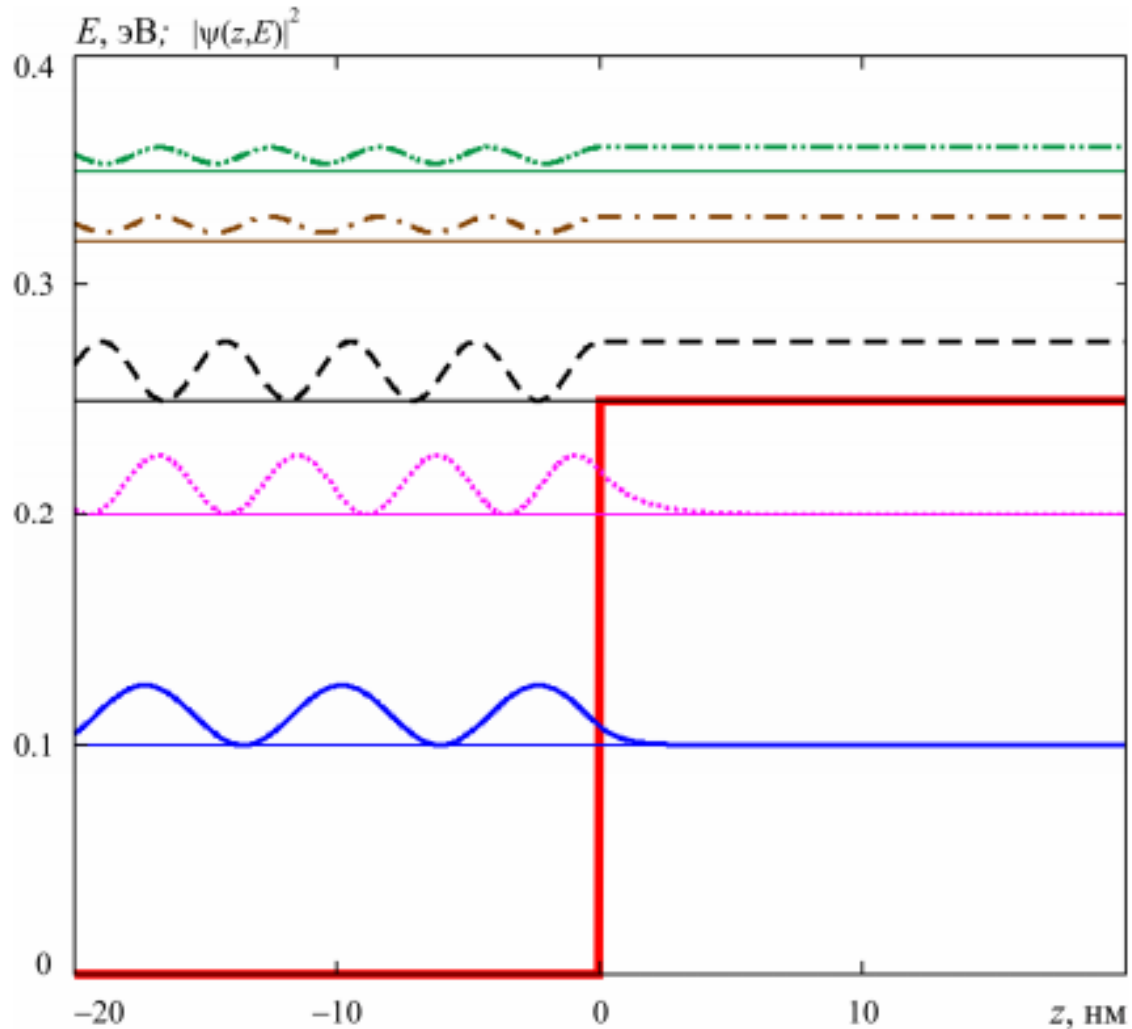


Рисунок 7 – Графики огибающих волновых функций электрона вблизи потенциальной ступеньки для различных значений энергии электрона, наложенные на потенциальный рельеф. Начала отсчета по оси ординат для графиков огибающих волновых функций совмещены с соответствующими значениями энергии на зонной диаграмме.

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):

$$J = \frac{j\hbar}{2m} (\psi \cdot \psi'^* - \psi'^* \psi). \quad (13)$$

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

$$D = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_2^+|}{|J_1^+|}, \quad (14)$$

$$R = \lim_{|z| \rightarrow \infty} \frac{|J_1^-|}{|J_1^+|}, \quad (15)$$

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

Подставляя выражения (14) и (15) в (13), получим:

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

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

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

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2};$$

или, с учетом (12):

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

$$R = \frac{|\gamma_1 - \gamma_2|^2}{|\gamma_1 + \gamma_2|^2}.$$

Графики зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона представлены на рисунке 8.

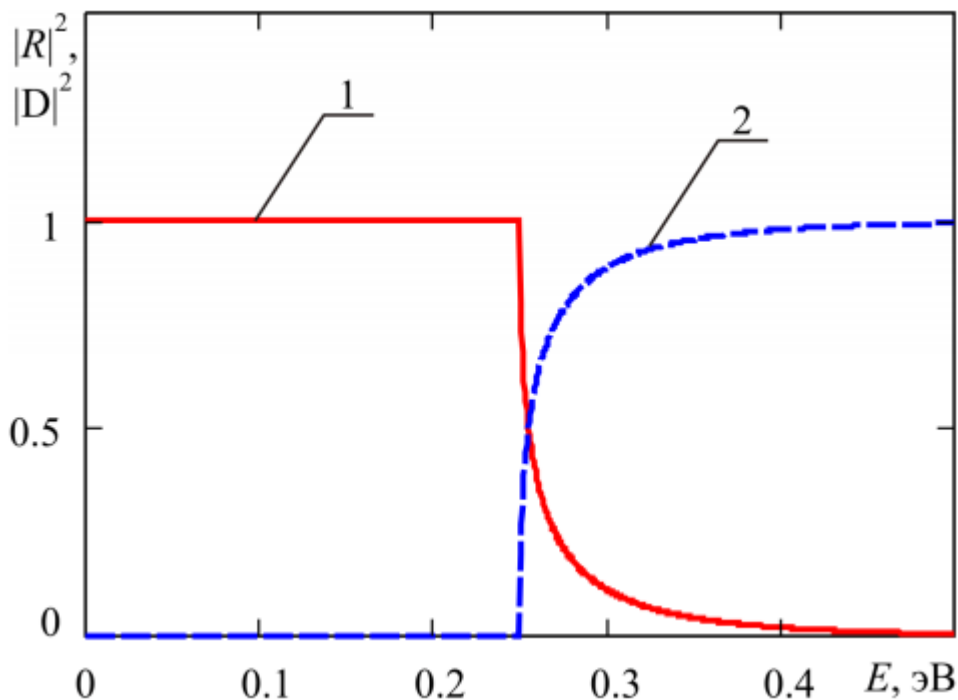


Рисунок 8 – Зависимость коэффициентов отражения (кривая 1) и прохождения (кривая 2) электронов через потенциальную ступеньку от энергии.

Отметим, что в случае, когда энергия электрона $E < U_0$, величина 2 становится мнимой и функция 2 принимает вид спадающей экспоненты:

В этом случае 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 (рисунок 8), 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 $x = 0,4$.
3. Построить потенциальный профиль для электронов в рассматриваемой структуре, определить высоту потенциального барьера U_0 , отсчитывая энергию от дна зоны проводимости $GaAs$.
4. Построить зависимости коэффициентов отражения и прохождения от энергии электрона в диапазоне от 0 до $3U_0$.
5. 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.

6. Оценить эффективную глубину проникновения электрона под потенциальный барьер, то есть глубину, на которой вероятность обнаружения электрона уменьшается в e раз.