Письма в ЖТФ, том 19, вып. 4 26 февраля 1993 г.

01

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ХАРАКТЕР ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В БЕСКОНЕЧНО ГЛУБОКОЙ ЯМЕ (В РАМКАХ МОДЕЛИ КРОНИНГА-ПЕННИ)

М.М. В р у б е л ь

Влияние стационарного электрического поля на энергию заряженной частицы, заключенной в квантовой яме, подробно исследовалось в рамках приближения эффективной массы главным образом для основного (невозбужденного) состояния в одномерных потенциальных ямах различной глубины и ширины [1-3]. В настоящей работе подобное исследование проводится в рамках несколько более общей модели – для одномерной задачи Кронинга-Пенни. Так же как и в приближении эффективной массы, в нашем случае существует возможность исследовать точные решения уравнения Шредингера в стационарном электрическом поле (функции Эйри), при этом рассматриваемая модель учитывает взаимное влияние зон и остается законной как для областей энергий далеких от экстремумов зон, так и для больших полей.

Будем решать уравнение Шредингера для электрона в стационарном электрическом поле напряженности S:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}-(E-|e|Sz-V(z)\psi(z)=0, \tag{1}$$

где $\psi(z)$ – волновая функция электрона, m – масса свободного электрона, e – заряд электрона, E – энергия частицы, $V(z)$ – потенциал вида:

$$V(z)=\begin{cases} \infty & z\geqslant -NL/2 \\ \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Gamma}{L}\sum\limits_{p=-N/2+1}^{p=N/2-1}\delta(z-pL) & -NL/2<z<zNL/2, \\ \infty & z\leqslant NL/2 \end{cases} \tag{2}$$

где N – целое число, равное числу ячеек Кронинга-Пенни в яме, L – ширина ячейки.

Из-за ограничения размеров рассматриваемой структуры каждая из разрешенных зон расщепляется на N дискретных уровней.

Граничные условия в точках $z=\pm N/2$ имеют вид:

$$\psi(z=\pm 0.5NL)=0. \tag{3}$$

Условия связи волновых функций и их первых производных в точках $z=pL$ (на δ-потенциалах) записываются следующим образом [4]:

$$\psi_j(z)=\psi_{j+1}(z),$$
$$\frac{\psi'_{j+1}(z)-\psi'_j(z)}{\psi_j(z)}=\frac{\Gamma}{L}. \qquad (4)$$

Штрихованием в (4) и далее везде обозначено дифференцирование по аргументу функции. Индекс j меняется от 1 в левой граничной ячейке до $n-1$ в предпоследней правой ячейке.

Решение уравнения (1) в области от $-NL/2$ до $NL/2$ представляет собой линейную комбинацию функций Эйри [5]

$$\psi_j(z)=a_j\,Ai(Z)+b_j\,BI(Z) \qquad (5)$$

с $Z=-(2m/(e\hbar S^2))^{1/3}(E-|e|Sz)$.

Введем следующие нормированные величины: $\hat V=V/E_0$, $\hat E=E/E_0$, $\hat S=|e|SL/E_0$, где $E_0=(\hbar\pi/L)^2/2m$ – энергия первого уровня размерного квантования бесконечно глубокой ямы ширины L. К примеру, при $L\approx5$ Å напряженности электрического поля в 10 кВ/см соответствует значение $\hat S\approx0.000325$.

Значение Z на границах ямы и на границах ячеек модели Кронинга–Пенни могут быть выражены следующим образом:

$$Z(z=pL)=-\left[\frac{\pi}{\hat S}\right]^{2/3}(\hat E-p\hat S),\quad -NL/2\leqslant p\leqslant NL/2. \qquad (6)$$

С учетом того, что $Ai(Z)\,Bi'(Z)-Bi(Z)Ai'(Z)=\pi^{-1}$ и $Z'(z)=1/L\,(\pi^2\hat S)^{1/3}$, (4) преобразуется к виду (для $z=pL$):

$$a_j\,Ai(Z)+b_j\,Bi(Z)-a_{j+1}Ai(Z)-b_{j+1}Bi(Z)=0,$$
$$\frac{b_j}{Ai(Z)}+\Gamma\left(\frac{\pi}{\hat S}\right)^{1/3}\left(a_{j+1}Ai(Z)+b_{j+1}Bi(Z)\right)-\frac{b_{j+1}}{Ai(Z)}=0, \qquad (7)$$

где j и p связаны соотношением $p=j-N/2$.

Система уравнений, составленная из $2\times(n-1)$ уравнений типа (7) (пара уравнений для каждого δ-потенциала) и двух уравнений (3), является линейной однородной системой из $2n$ уравнений относительно $2n$ переменных a_j и b_j. Нетривиальное решение для такой системы существует при условии, что ее определитель равен 0.

Некоторые результаты численного решения описанной системы для разных значений $\hat S$ и Γ, характеризующие влияние стационар-

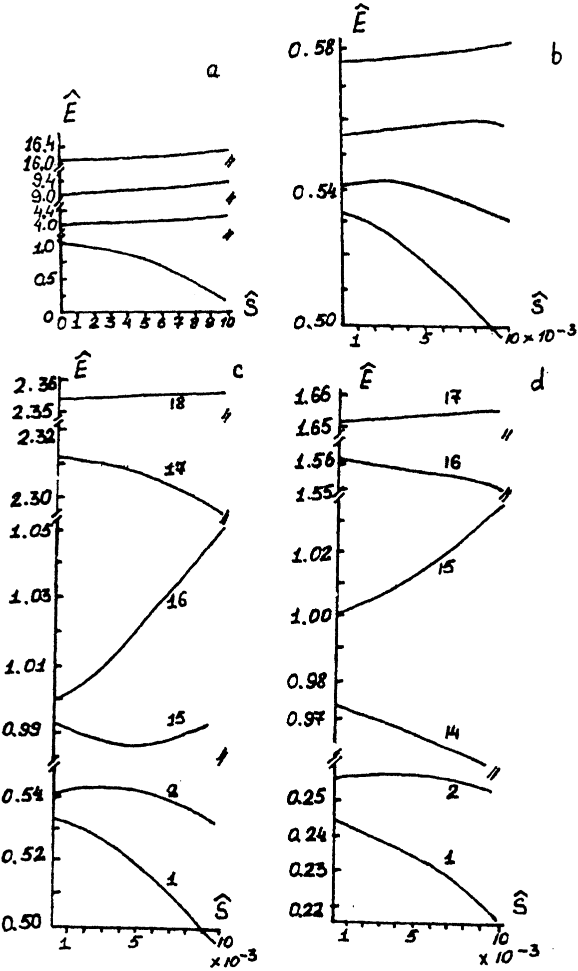

Рис. 1. Зависимость нормированной энергии $\hat{E}$ от нормированной напряженности электрического поля $\hat{S}$; а – $N = 1$ (приближение эффективной массы); b – $N = 15$, $\Gamma = 3$; c – $N = 16$, $\Gamma = 10$; d – $N = 15$, $\Gamma = 3$. Цифры на рисунке соответствуют номеру уровня в дискретном ряду энергий (в порядке возрастания, начиная с 1).

ного электрического поля на характеристики электрона, находящегося внутри квантовой ямы типа (2), приведены на рис. 1, 2.

Энергии уровней, соответствующих в приближении эффективной массы невозбужденным состояниям (самые низкие и самые высокие по значению энергии уровни в каждой из разрешенных зон),

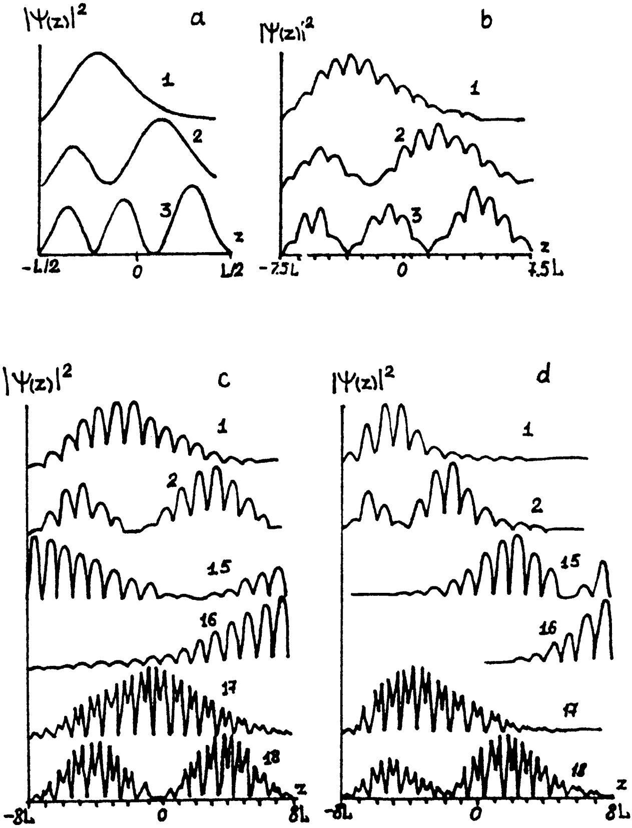

Рис. 2. Нормированная на свое максимальное значение плотность вероятности $|\Psi(z)|^2$ для разных Γ, $\hat{S}$, N (максимум $|\Psi(z)|^2$ свой для каждого нового $\hat{E}$ и $\hat{S}$); a – $N = 1$, $\hat{S} = 9$; b – $N = 15$, $\Gamma = 3$, $\hat{S} = 0.003$; c $N = 16$, $\Gamma = 10$, $\hat{S} = 0;001$; d-$N = 16$, $\Gamma = 10$, $\hat{S} = 0.01$. Цифры на рисунке соответствуют номеру уровня в дискретном ряду энергий (в порядке возрастания, начиная с 1).

являются монотонными функциями напряженности электрического поля. Энергия уровней дна зоны уменьшается, а энергия уровней вершины зоны растет с ростом S (в настоящей работе исследовалась решетка Кронинга–Пенни с параметром $\Gamma > 0$) (рис. 1). Аналогичные результаты получены в рамках моделей эффективной массы для электронов и дырок соответственно.[3].

Вместе с энергией изменяется и характер распределения вероятности $|\Psi(z)|^2$ (рис. 2). Зависимость $|\Psi(z)|^2$ от напряженности электрического поля, присущая состояниям дна и вершин разрешенных зон, представляется достаточно естественной. Если прибегнуть к классической аналогии, то перераспределение под действием поля $|\psi(z)|^2$ для экстремумов зон можно связать с движением электронов (дно зоны) в направлении, противоположном приложенному полю, и дырок (вершина зоны) в направлении, совпадающем с направлением приложения поля. Но для остальных уровней зоны такая аналогия оказывается совершенно неприменимой. Обсудим это на примере рис. 1,*c*, 2,*c*,*d* для уровня, помеченного цифрой 2 (возбужденного уровня, ближайшего ко дну первой зоны). В зависимости $\hat{E}_2(\hat{S})$ могут быть выделены два участка. На первом $\hat{E}_2$ растет с ростом $\hat{S}$. Для $|\psi(z)|^2$ это отражается в увеличении одного из максимумов огибающей в сравнении с другим (усилился максимум, расположенный в той половине ямы, энергия дна которой увеличивается в электрическом поле) – рис. 2,*c*. Если вновь прибегнуть к классичесокой аналогии, то можно сказать, что электрон, находящийся на втором энергетическом уровне, „сместился" в сравнении с электроном на основном уровне в противоположную сторону. Ситуация меняется с дальнейшим ростом $\hat{S}$, когда вместе с дальнейшим ростом левого максимума огибающей становится существенным смещение этого максимума в направлении действия поля (рис. 2,*d*). Аналогичные черты прослеживаются и в поведении „дырок" (верхняя половина зоны).

На рис. 2,*b* содержится еще несколько примеров зависимостей $|\psi(z)^2|$ в электрическом поле для ямы с другими значениями N и Γ.

Еще одно замечание касается того, что экстремум $\hat{E}(\hat{S})$ расположен при тем больших значениях $\hat{S}$, чем дальше расположена энергия уровня от экстремума зоны (рис. 1,*b*).

Приведенные результаты свидетельствуют о том, что влияние электрического поля на заряженную частицу внутри бесконечно глубокой ямы проявляется совершенно различным образом в зависимости от того, находится ли электрон у дна, у вершины зоны или в возбужденном состоянии.

Отметим в заключение, что нет смысла рассчитывать на полную аналогию решенной задачи с реальными структурами. Это всего лишь одномерная точно решаемая модель, позволяющая сделать некоторые общие выводы и исследовать некоторые общие закономерности влияния электрического поля на ограниченные квантовые структуры.

Список литературы

[1] Miller D.A.B., Chemla P.S., Damen T.C. Gossard A.C., Witgman W., Wood T.H., Burrus C.A. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 2. P. 1043–1060.

[2] Austin E.J., Jaros M. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 8. P. 5569–5572.

[3] A h n D., C h u a n g S.L. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 12. P. 9034–9037.
[4] Ф л ю г г е З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 341 с.
[5] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами (под редакцией М. Абрамовица и И.А. Стигуна). М.: Наука, 1979. 832 с.

Белорусский государственный
университет

Поступило в Редакцию
2 февраля 1992 г.