ГРАНИЧНАЯ ЗАДАЧА В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

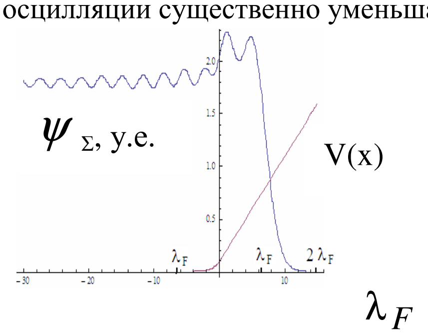
Землякова И.В., Моос Е.Н., Савушкин О.В.

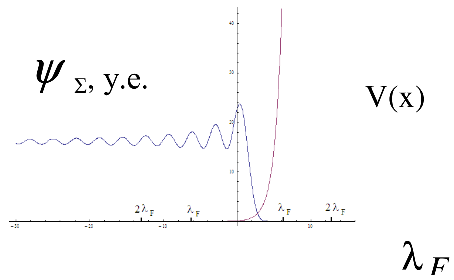
Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина,
Физико-математический факультет, Свобода 46, Рязань 390000, Россия

Свободные и интерфейсные поверхности гетероструктур требуют рассмотрение распределения электронной плотности. Применение классического подхода к решению граничной задачи твердого тела обычно ведется в модели «Желе», дающей, в частности, двойной электрический слой на граничной поверхности. При квантово-механическом из уравнения Шредингера с заданным эффективным потенциалом рассмотрение структура плотности электронного облака усложняется.

В одномерном случае эффективный потенциал часто задают резким потенциальным порогом (стенку), который можно определить, например, функцией Хэвисайда. Решения уравнения Шредингера в этом случае вдали от стенок представляются как комбинации падающих и отраженных волн де-Бройля. При суммировании электронных плотностей ψ_Σ получим осцилляции, быстро затухающие вглубь металла - осцилляции Фриделя.

Представим ход потенциальной функции V(x) различными модельными функциями: гладкими, кусочно-гладкими, ограниченными и неограниченными с различной скоростью роста V(x). Решения находили как численно, так и аналитически. Суммирование плотностей вероятностей отдельных электронов от нулевой энергии до энергии уровня Ферми производилось, в частности, в программе Wolfram Mathematica. Обнаружено, что интенсивность осцилляций Фриделя тем больше, чем больше скорость роста V(x) . Оказалось, что осцилляции существенно уменьшаются для плавного изменения V(x) на границе.





Анализ электронной плотности для поверхностных (таммовских) состояний в запрещенных зонах твердого тела моделировался для конечной ямы с дном в виде периодической функции (например, функция косинуса). Решение принимает вид уравнения Матье $\psi'' + (E - 2h\cos(2qx))\psi = 0$, где ψ - волновая функция; h, q – параметры периодической потенциальной энергии, E – энергия электрона. Его решения есть функции Матье, которые для конечного ящика финитны и, следовательно, при соответствующей нормировке могут являться волновыми функциями. Аппроксимируем функцию Матье гармонической функцией с экспоненциальным ростом амплитуды и суммирование плотностей вероятностей осуществляется примененной программой.

На рисунках представлены осцилляции для двух случаев зонной структуры с разным параметром h. Для узкой запрещенной зоны с широкими разрешенными зонами суммирование по всей зоне (значения энергий взяты в условных единицах) ультрабольшие осцилляции для таммовских состояний. В случае широкой запрещенной зоны суммирование по всей зоне не дает осциллирующих решений.