

Использование метода трансфер-матриц для расчета коэффициента прохождения электронов в наноструктурах

Орленсон В.Б.¹, Арутюнов Н.Э.², Шевченко А.И.³

1 - , E-mail: wolf.orson@mail.ru; 2 - , E-mail: kintiri1997@gmail.com; 3 - , E-mail: shevshenkoai@cfuw.ru

Нами был изучен способ описания активных слоев полупроводниковых приборов нанометрового масштаба с использованием метода трансфер-матриц, определяющих каждое из взаимодействий свободного электрона с атомной решеткой [1]. Рассмотрена структура, состоящая из N атомов, расположенных между полубесконечными областями, при условии, что в каждом барьере и в крайних областях потенциал постоянен, т.е. принят прямоугольным [2]. В данной задаче о движении электронов в периодически-неоднородных средах решения уравнения Шредингера записываются отдельно для каждой области, где потенциал не изменяется, в виде суперпозиции падающей и отраженной волн де Бройля, а нахождение амплитуд этих волн производится с использованием граничных условий на интерфейсах между слоями. Такая модель с использованием метода матриц переноса может быть использована для составления программы по расчету амплитуд волн де Бройля, коэффициентов отражения и прохождения в многослойных средах и дальнейшего определения ширины запрещенных зон. В программе, написанной на языке C#, а также с помощью алгоритма, реализованного в математическом пакете «Mathcad» (рисунок 1), был найден коэффициент прохождения для электронов при их движении по наноструктурным ячейкам решетки. В результате проделанных расчетов было показано, что увеличение количества атомов в одной цепочке приводит к более плотному заполнению энергетических зон и более четким границам разрешенных и запрещенных зон. Также данный метод позволяет описать отклонение от симметрии атомной решетки и ввести дефектные и примесные состояния в структуру полупроводникового прибора.

Источники и литература

- 1) Yu P.Y., Cardona M. Fundamentals of semiconductors. Heidelberg: Springer, 2010.
- 2) 2. Мазин А.С., Орленсон В.Б., Шевченко А.И. Возможность применения трансфер-матриц для расчета наноструктурированных систем // 26-я Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии (КрыМиКо'2016)». Материалы конференции. Севастополь, 2016. С. 1568–1573.

Иллюстрации

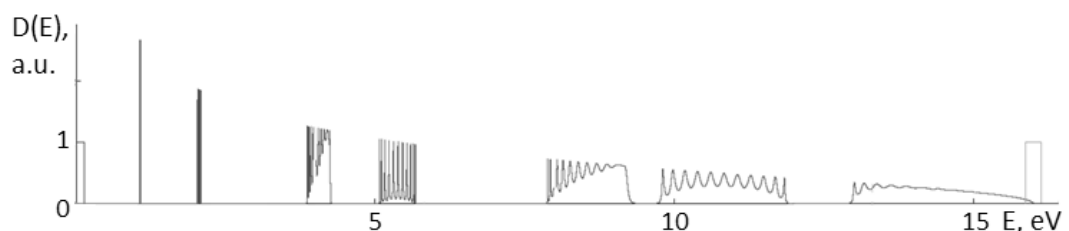


Рис. 1. Коэффициент прохождения для одной из моделированных наноструктур