

Analityczno-numeryczna metoda badania właściwości stanów kwantowych w supersieciach półprzewodnikowych

Streszczenie. W artykule przedstawiono efektywną, pół-analityczną metodę samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona w supersieciach półprzewodnikowych. Bazuje ona na aproksymacji funkcji gęstości ładunku wielomianami, co pozwala uzyskać analityczne rozwiązania w/w równań oraz zastosować metodę macierzy przejścia.

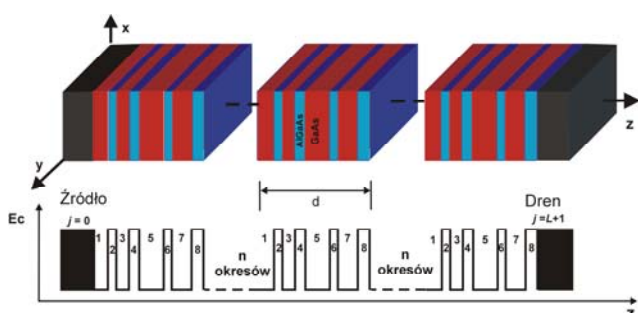
Abstract. The paper presents an efficient, semi-analytical method of self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations in semiconductor superlattices. It is based on the approximation of electrical charge density function by polynomial. This allows us to obtain the analytical solutions of the above-mentioned equations and to apply the Transfer Matrix Formulation (TMF). (Analytic-numerical method for investigating the properties of quantum states in semiconductor superlattices).

Słowa kluczowe: supersieci półprzewodnikowe, samouzgodnione rozwiązywanie równań Schrödingera i Poissona

Keywords: semiconductor superlattices, self-consistent solution of Schrödinger and Poisson equations

Wstęp

Supersieci półprzewodnikowe to struktury modułowe, w których ułożone naprzemiennie nanometrowe warstwy dwóch różnych półprzewodników lub ich stopów, wytwarzają periodyczny potencjał elektrostatyczny o okresie d znacznie przekraczającym okres zmian potencjału pola pochodzącego od atomów sieci krystalicznej (rys. 1.).



Rys.1 Fragment supersieci wykonanej z warstw AlGaAs oraz GaAs oraz ilustracja periodycznego potencjału o okresie d , który powstaje w materiale na skutek modulacyjnego ułożenia warstw

Nośniki ładunku elektrycznego poruszające się w takim środowisku ulegają efektom kwantowym, które mogą być wykorzystane do konstruowania wielu nowatorskich przyrządów elektronicznych, jak np. *kwantowy laser kaskadowy* [1], [2].

Pomimo prostej geometrii supersieci (w praktyce wystarczy zwykle rozpatrywać modele jednowymiarowe), modelowanie działania takich przyrządów okazuje się bardzo trudne, ponieważ wymaga uwzględnienia wielu rodzajów oddziaływań nośników prądu (z potencjałem supersieci, przyłożonym polem elektrycznym, innymi nośnikami, domieszkami, fotonami i fononami) [3]. Obliczenia wymagają więc uwzględnienia wielu rodzajów pól sprzężonych (elektrycznego, rozkładu ładunku, kwantowej funkcji falowej, temperatury), mają charakter iteracyjny (samouzgadnianie pól) i przy korzystaniu z metod stricte numerycznych (jak np. różnic skończonych), są zwykle bardzo czasochłonne [4].

W prezentowanej pracy zaproponowano pewne procedury o częściowo analitycznym charakterze, które mogą w znacznym stopniu przyspieszyć tego typu symulacje. Opierają się one głównie na aproksymowaniu funkcji rozkładu ładunków i potencjału elektrostatycznego w

każdej z warstw supersieci za pomocą wielomianów oraz wykorzystaniu idei metody macierzy przejścia, dzięki czemu unika się dyskretyzacji modelu supersieci.

Sformułowanie zagadnienia

Geometrię analizowanego zagadnienia wraz z przyjętym układem współrzędnych ilustruje Rys. 1. Rozważany jest stacjonarny, jednowymiarowy model supersieci, tzn. przyjmuje się, że wszystkie analizowane pola fizyczne są funkcjami jednej zmiennej z . Podyktowane jest to faktem, że w rzeczywistych strukturach tego typu (np. laserów kaskadowych) proporcje rozmiarów podłużnych do poprzecznych są rzędu 1:1000 przez co zmiany pól w kierunkach poprzecznych są zanedbywalnie małe w porównaniu do zmian w kierunku wzdłużnym.

Każda z warstw struktury jest półprzewodnikiem (domieszkowanym lub nie). Skokowa zmiana szerokości przerwy energetycznej materiałów tworzących supersieci generuje potencjał elektryczny o nieciągłym („schodkowym”) charakterze (por. Rys. 1) nazywany dalej *potencjałem struktury*.

Wskutek przyłożenia napięcia polaryzującego między skrajne warstwy (*źródło* i *dren*) w strukturze pojawia się pole elektryczne, którego potencjał nazywany będzie *potencjałem przyłożonym*.

Niezerównoważony lokalnie ładunek jonów domieszki i nośników prądu (na ogół mogą to być elektrony lub dziury; dla uproszczenia zapisów zakładamy dalej, że są to elektrony) wytwarza dodatkowy potencjał nakładający się na dwa poprzednie.

Nośniki prądu, podlegają prawom kwantowym, tzn. ich rozkład w strukturze podyktowany jest zespoloną funkcją falową ψ spełniającą równanie Schrödingera:

$$(1) \quad -\frac{\hbar^2}{2m_{ef}} \Delta \psi - eV\psi = E\psi$$

gdzie: m_{ef} – masa efektywna elektronu w danej warstwie, e – ładunek elementarny, V – potencjał elektryczny, E – energia elektronu. Obliczenia przeprowadzone w ramach dotychczasowych prac [5]-[7] wykazały, że strefy Brillouina kryształów tworzących supersieci dzielą się na tzw. minipasma w zakresie pasma przewodnictwa. Znajomość funkcji falowych w obrębie w/w minipasm pozwala określić rozkład całkowitego ładunku w supersieci:

$$(2) \quad \rho(z) = e[n(z) - N_D(z)]$$

gdzie N_D oznacza koncentracji domieszki donorowej natomiast $n(z)$ jest obliczane według wzoru:

$$(3) \quad n(z) = \sum_i n_i |\psi_i(z)|^2$$

W zależności (3) n_i określa koncentrację samoistną elektronów w minipaśmie i supersieci. generuje potencjał spełniający równanie Poissona:

$$(4) \quad \Delta V_\rho = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

gdzie ϵ – przenikalność elektryczna warstwy.

Na powierzchniach granicznych warstw struktury potencjał i funkcja falowa muszą spełniać odpowiednie warunki ciągłości. Oznaczając przez z_j współrzędną początku j -tej warstwy struktury (patrz Rys.1.), a funkcję potencjału w tej warstwie przez V_j , warunki jakie ona spełnia, można zapisać jako:

$$(5) \quad V_j(z_{j+1}) = V_{j+1}(z_{j+1})$$

$$(6) \quad \epsilon_j \frac{dV_j}{dz} \Big|_{z_{j+1}} = \epsilon_{j+1} \frac{dV_{j+1}}{dz} \Big|_{z_{j+1}}$$

Analogiczne warunki dla funkcji falowej mają postać:

$$(7) \quad \psi_j(z_{j+1}) = \psi_{j+1}(z_{j+1})$$

$$(8) \quad m_{e_j} \frac{d\psi_j}{dz} \Big|_{z_{j+1}} = m_{e_{j+1}} \frac{d\psi_{j+1}}{dz} \Big|_{z_{j+1}}$$

Dodatkowo należy uwzględnić warunki brzegowe na początku struktury (w źródle) i na jej końcu (w drenie). Dla funkcji potencjału warunki te wynikają z wartości przyłożonego napięcia U i mogą być zapisane jako:

$$(9) \quad V_1(z_1) = U, \quad V_L(z_{L+1}) = 0$$

Dla funkcji falowej warunki te dotyczą amplitud fal padających od strony źródła i drenu i na ogół mogą być różnie sformułowane [6].

Podsumowując, matematyczne sformułowanie zagadnienia polega na poszukiwaniu w badanym modelu supersieci trzech pól sprzężonych: V , ψ , ρ , spełniających równania (1) - (4), warunki brzegowe (5) - (9).

Idea i algorytm metody

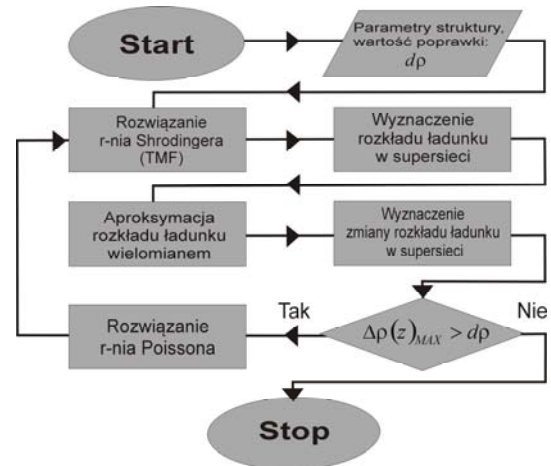
Rozwiązanie tak sformułowanego zagadnienia wymaga samouzgodnienia obliczanych pól, co można osiągnąć na drodze iteracji. Jej pierwszy krok polega na znalezieniu energii i funkcji własnych równania (1) dla potencjału struktury oraz potencjału przyłożonego.

W przypadku braku potencjału przyłożonego (napięcia polaryzującego) rozwiązanie (1) w każdej z warstw struktury można przedstawić w postaci funkcji elementarnych – kombinacji liniowej przeciwnieznnych fal płaskich. Bardzo wygodną i efektywną metodą wyznaczania współczynników tej kombinacji (amplitud fal) jest metoda macierzy przejścia [4].

Konieczność uwzględnienia potencjału przyłożonego, jak też potencjału pochodzącego od ładunków nierównoważonych (w kolejnych krokach iteracji) sprawia, że rozwiązania równania (1) nie da się już przedstawić w postaci funkcji elementarnych. Aby mimo to umożliwić

skorzystanie z metody macierzy przejścia, w niniejszej pracy proponuje się przedstawienie rozwiązania równania (1) w formie rozwinięć w szeregi potęgowe. Rozwinięcia takie można uzyskać na drodze analitycznej dla potencjału wyrażonego wielomianem (lub ogólniej – również szeregiem potęgowym). Z równania (3) nietrudno zauważyć, że taka postać potencjałów odpowiada analogicznej postaci funkcji gęstości ładunku. Proponuje się więc, aby w każdym kroku procedury obliczającej, po rozwiązaniu równania (1) i skorzystaniu z (2) aproksymować funkcję gęstości ładunku wielomianem (osobno w każdej z warstw). Na tej podstawie należy określić potencjał do następnego kroku iteracji, w którym powtarzane są opisane wyżej obliczenia.

Algorytm proponowanej procedury przedstawiono na rysunku (2).



Rys.2 Algorytm procedury samouzgodnionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona

Szczegółowy opis procedur wyznaczania rozkładów potencjału i funkcji falowej znajduje się w kolejnych rozdziałach.

Procedura obliczania potencjału

W dalszych rozważaniach wygodnie będzie używać współrzędnych ζ_j zdefiniowanych osobno dla każdej warstwy modelu supersieci jako:

$$(9) \quad \zeta_j \equiv z - z_j, \quad 0 \leq \zeta_j \leq s_j$$

gdzie s_j – grubość j -tej warstwy.

Zakłada się, że funkcja gęstości ładunku w j -tej warstwie jest aproksymowana wielomianem stopnia N :

$$(10) \quad \rho_j(\zeta_j) = \sum_{k=0}^N a_{j,k} \zeta_j^k$$

którego współczynniki $a_{j,k}$ są znane. Podstawiając (10) do (3), po scałkowaniu otrzymuje się

$$(11) \quad V_j(\zeta_j) = \sum_{k=0}^{N+2} b_{j,k} \zeta_j^k$$

gdzie

$$(12) \quad b_{j,k+2} = \frac{a_{j,k}}{(k+1)(k+2)\epsilon_j}$$

Nieznane stałe $b_{j,0}$ i $b_{j,1}$ w (11) należy wyznaczyć na podstawie warunków brzegowych (4), (5), (8). Podstawiając (11) do (4) i (5) otrzymuje się odpowiednio:

$$(13) \quad b_{j+1,0} = b_{j,0} + s_j b_{j,1} + \sum_{k=2}^{N+2} b_{j,k} s_j^k$$

$$(14) \quad b_{j+1,1} = \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}} \left(b_{j,1} + \sum_{k=2}^{N+2} k b_{j,k} s_j^{k-1} \right)$$

W notacji macierzowej równania (13) i (14) można zapisać następująco:

$$(15) \quad \begin{bmatrix} b_{j+1,0} \\ b_{j+1,1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & s_j \\ 0 & \eta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{j,0} \\ b_{j,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B_j \\ \eta_j B'_j \end{bmatrix}$$

gdzie

$$(16) \quad \eta_j = \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon_{j+1}}$$

$$(17) \quad B_j = \sum_{k=2}^{N+2} b_{j,k} s_j^k$$

$$(18) \quad B'_j = \sum_{k=2}^{N+2} k b_{j,k} s_j^{k-1}$$

Zależność (15) pozwala na rekurencyjne obliczanie stałych $b_{j,0}$ i $b_{j,1}$ w kolejnych warstwach i po skorzystaniu z (11) i (12) wyznaczenie pełnego rozkładu potencjału w strukturze supersieci.

Wartości stałych $b_{1,0}$ i $b_{1,1}$ (dla pierwszej warstwy) należy wyznaczyć z warunków (8). W tym celu konieczne jest ich powiązanie z $b_{L,0}$, $b_{L,1}$ (ostatniej warstwy). Po wykonaniu obliczeń otrzymuje się ostatecznie:

$$(19) \quad \begin{bmatrix} b_{L,0} \\ b_{L,1} \end{bmatrix} = \mathbf{A} \begin{bmatrix} b_{1,0} \\ b_{1,1} \end{bmatrix} + \mathbf{W}$$

gdzie

$$(20) \quad \mathbf{A} = \prod_{j=L-1}^{j=1} \mathbf{A}_j$$

$$(21) \quad \mathbf{A}_j = \begin{bmatrix} 1 & s_j \\ 0 & \eta_j \end{bmatrix}$$

$$(22) \quad \mathbf{W} = \sum_{i=1}^{L-2} \left(\prod_{j=L-1}^{j=i+1} \mathbf{A}_j \right) \mathbf{T}_i + \mathbf{T}_{L-1}$$

$$(23) \quad \mathbf{T}_j = \begin{bmatrix} B_j \\ \eta_j B'_j \end{bmatrix}$$

Korzystając z (8), (11) i (19) otrzymujemy:

$$(24) \quad b_{1,0} = U$$

$$(25) \quad b_{1,1} = - \frac{(a_{1,1} + a_{2,1} s_L) U + w_1 + w_2 s_L + B_L}{a_{1,2} + a_{2,2} s_L}$$

gdzie $a_{m,n}$, w_n – elementy macierzy \mathbf{A} i wektora \mathbf{W} (odpowiednio).

Reasumując, proponowana procedura wyznaczania rozkładu potencjału w analizowanej strukturze supersieci sprowadza się głównie do wykonywania działań mnożenia i dodawania macierzy rzędu 2 (por. (15), (20), (22)) oraz obliczania zwykłych sum (por. (11), (17), (18)).

Procedura obliczania funkcji falowej

Wstępnie zakłada się, że potencjał w (1) wyrażony jest w postaci wielomianu (11), którego wszystkie współczynniki

są znane. W strefach źródła ($j=0$) i drenu ($j=L+1$) przyjmuje się, że potencjały są stałe i równe (odpowiednio) U i 0 (por. (8)).

Równanie (1) wygodnie jest najpierw przekształcić do postaci bezwymiarowej (dla poprawienia przejrzystości we wzorach (26) - (35) opuszczono indeksy j numerujące warstwy supersieci):

$$(26) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} + [1 - P(u)] \psi(u) = E \psi(u)$$

gdzie

$$(27) \quad u = \sigma \zeta$$

$$(28) \quad \sigma = \frac{\sqrt{2m_{\text{ef}} e E}}{\hbar}$$

$$(29) \quad P(u) = \frac{V(u)}{E} = \sum_{k=0}^{N+2} d_k u^k$$

$$(30) \quad d_k = \frac{b_k}{E \sigma^k}$$

Poszukiwane rozwiązanie równania (26) przedstawiamy w postaci szeregu potęgowego:

$$(31) \quad \psi(u) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u^n$$

Podstawiając (29) i (31) do (26) otrzymuje się rekurencyjną zależność dla współczynników c_n :

$$(32) \quad c_{n+2} = \frac{1}{n(n-1)} \left[(d_0 - E) c_{n-2} + \sum_{k=1}^n d_k c_{n-k-2} \right]$$

Dwa niezależne rozwiązania równania (26) można otrzymać przyjmując np.:

$$(33) \quad c_0 = 1, \quad c_1 = i,$$

oraz

$$(34) \quad c_0 = 1, \quad c_1 = -i,$$

gdzie $i = \sqrt{-1}$.

Funkcja opisana wzorami (31), (32), (33) oznaczana będzie dalej jako $F^I(u)$, a funkcja opisana wzorami (31), (32), (34) jako $F^{II}(u)$.

Ogólne rozwiązanie równania (26) można więc zapisać jako:

$$(35) \quad \psi(u) = C^I F^I(u) + C^{II} F^{II}(u)$$

Korzystając z warunków ciągłości (6), (7) otrzymuje się zależności:

$$(36) \quad C_{j+1}^I + C_{j+1}^{II} = C_j^I F_j^I(u_j) + C_j^{II} F_j^{II}(u_j)$$

$$(37) \quad C_{j+1}^I - C_{j+1}^{II} = C_j^I \beta_j G_j^I(u_j) + C_j^{II} \beta_j G_j^{II}(u_j)$$

gdzie:

$$(38) \quad u_j = \sigma_j s_j,$$

$$(39) \quad \beta_j = -i \frac{m_{j+1} \sigma_j}{m_j \sigma_{j+1}}$$

$$(40) \quad G_j^K(u) = \frac{dF_j^K}{du} = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n u^{n-1}, \quad K = I, II$$

Używając notacji macierzowej równania (36), (37) można przekształcić do postaci:

$$(41) \quad \begin{bmatrix} C_{j+1}^I \\ C_{j+1}^{II} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_j \begin{bmatrix} C_j^I \\ C_j^{II} \end{bmatrix}$$

gdzie

$$(42) \quad \mathbf{M}_j = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} F_j^I(u_j) + \beta_j G_j^I(u_j) & F_j^{II}(u_j) + \beta_j G_j^{II}(u_j) \\ F_j^I(u_j) - \beta_j G_j^I(u_j) & F_j^{II}(u_j) - \beta_j G_j^{II}(u_j) \end{bmatrix}$$

Korzystając rekurencyjnie z (41) otrzymuje się

$$(43) \quad \begin{bmatrix} C_{L+1}^I \\ C_{L+1}^{II} \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} C_0^I \\ C_0^{II} \end{bmatrix}$$

gdzie

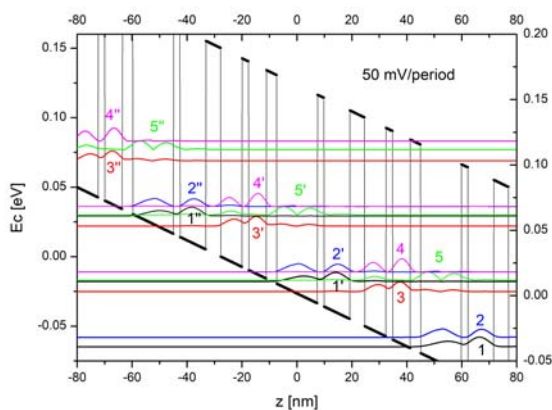
$$(44) \quad \mathbf{M} = \prod_{j=L}^{j=0} \mathbf{M}_j$$

jest macierzą przejścia dla całej struktury.

Stałe C_0^I i C_{L+1}^{II} w (43) oznaczają amplitudy fal padających na supersieć od strony źródła i drenu (odpowiednio), zaś C_0^{II} i C_{L+1}^I - amplitudy fal odbitych. W celu znalezienia konkretnej funkcji falowej opisującej elektron o zadanej energii dwie z tych wielkości należy zadać jako uzupełniające warunki brzegowe (zwykle zakłada się, że amplituda fali padającej od strony źródła jest znana, a od strony drenu zerowa). Należy jednak zaznaczyć, że wiele ważnych właściwości badanej struktury (jak np. położenie minipasm, współczynniki transmisji i odbicia itp.) można określić już na podstawie samej macierzy przejścia [5], [6].

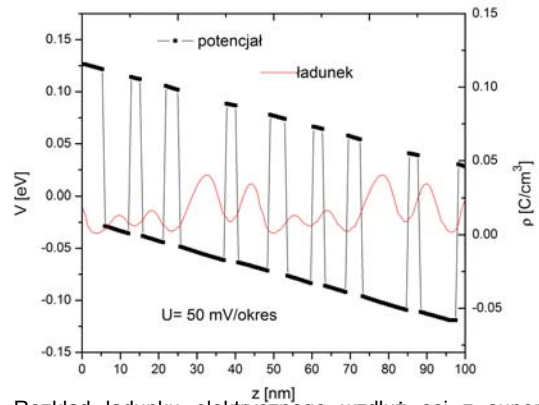
Wyniki symulacji i obliczeń

Opisana w poprzednich rozdziałach metoda została zaimplementowana w ramach modelu numerycznego symulującego typową supersieć półprzewodnikową [8] Wyniki wstępnych testów przy użyciu opisanej metody podejścia przedstawiają rysunki 3 i 4.



Rys.3 Obliczone funkcje falowe dla stanów elektronowych

Rysunek 3 ilustruje przykłady obliczonych przebiegów funkcji falowych stanów elektronowych dla napięcia polaryzującego strukturę supersieci o wartości 50 mV/okres. Na rysunku 4 zilustrowano natomiast rozkład ładunku elektrycznego wzdłuż osi z supersieci.



Rys.3 Rozkład ładunku elektrycznego wzdłuż osi z supersieci obliczony w procesie somouzonionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona

Podsumowanie

W artykule opisano efektywną, pół-analityczną metodę samouzonionego rozwiązywania równań Schrödingera i Poissona w supersieciach półprzewodnikowych. Opiera się ona na aproksymacji funkcji gęstości ładunku wielomianami, osobno dla każdej z warstw struktury supersieci. Pozwala to na uzyskanie analitycznych rozwiązań obu w/w równań i zastosowanie efektywnej procedury macierzy przejścia do spełnienia warunków ciągłości na granicach warstw. Dzięki takiemu podejściu proponowana metoda nie wymaga dyskretyzacji analizowanego modelu supersieci i rozwiązywania dużych układów równań, co pozwala znacznie przyspieszyć symulacje [9]. W pracy zaprezentowano też rezultaty wstępnych testów potwierdzających poprawność i efektywność opisanej metody.

Autorzy: dr hab. Stanisław Pawłowski, prof. PRZ, Politechnika Rzeszowska, Zakład Elektrodynamiki i Systemów Elektromaszynowych, ul. W. Pola 2, 35-959 Rzeszów, E-mail: spawlo@prz.edu.pl; dr inż. Mariusz Mączka, Politechnika Rzeszowska, Katedra Podstaw Elektroniki, ul. W. Pola 2, 35-959 Rzeszów, E-mail: mmaczka@prz.edu.pl.

LITERATURA

- [1] Faist J., Capasso F., Sivco D. L., Sirtori C. i inni, Quantum Cascade Laser, *Science*, 264, 5158 (1994), 553 – 556
- [2] Kosiel K., Bugajski M., Szerling A., Kubacka-Traczyk J. i inni, 77 K operation of AlGaAs/GaAs quantum cascade laser at 9 μm ., *Photonics Letters of Poland*, 1, 1, (2009), 16-18
- [3] Wacker A., Semiconductor superlattices: a model system for nonlinear transport, *Physics Reports*, 357 (2002), 1-111
- [4] Karbownik P., Bugajski M., Self-consistent simulation of mid-IR quantum cascade lasers based on rate equation approach, Proc. SPIE 8432, (2012), *Semiconductor Lasers and Laser Dynamics V*, 84321P
- [5] Mączka M., Pawłowski S., Hałdaś G., Study of quantum states maximal localization in nonsymmetrical semiconductor superlattice structures, Conference: 2016 13th Selected Issues of Electrical Engineering and Electronics (WZEE), *IEEE Conference Publications*, (2016), 1-5
- [6] Mączka M., Pawłowski S., Plewako J. Comparative analysis of selected models of semiconductor superlattices, *Przegląd Elektrotechniczny*, 8, (2011), 93
- [7] Pawłowski S., Mączka M.: Konstruowanie stanów kwantowych w strukturze lasera kaskadowego z wykorzystaniem skończonego i nieskończonego modelu supersieci półprzewodnikowych, *Przegląd Elektrotechniczny*, 11, (2013), 322-327
- [8] Callebaut H., Hu Q., *J. Appl. Phys.*, 98, (2005), 104505
- [9] Mączka M., Pawłowski S., Efficient method for transport simulations in quantum cascade lasers, International Conference on Nanostructures for Optoelectronics and Biosensors (IC SeNOB), *EPJ Web of Conferences*, 133, (2017).