Занятие 2.
Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме

Цель: изучить условия формирования дискретного спектра и решения соответствующих задач, допускающих аналитическое решение

Где такая задача встречается?

Лазеры с квантовыми ямами (*quantum well lasers – QWL*), транзистор с высокой подвижностью электронов (*high electron mobility transistor – HEMT*), подобные задачи: квантовые точки (как обобщение одномерной задачи на трехмерную квантовую яму).

Условия формирования дискретного спектра. С точки зрения квантовой механики в направлении 0*z* дискретный спектр формируется, если выполняется условие:

$$\lim_{z\to\pm\infty}\psi(z)=0\,. \tag{2.1}$$

Тогда говорят, что частица заключена в некотором конечном объеме пространства, а ее состояния являются «связанными». Если хотя бы одно из условий (2.1) не выполняется, то частица уже не локализована в конечном объеме, а, как говорят, «уходит на бесконечность».

Условие (2.1) с несущественными оговорками равносильно условию

$$\lim_{z\to\pm\infty}\{E-U(z)\}<0 \tag{2.2}$$

Действительно, в силу (2.2) вероятность найти электрон на больших расстояниях от начала координат будет убывать в соответствии с элементарными представлениями о туннельном эффекте [Блохинцев, оценка проникновения]. Таким образом, для самых невообразимых потенциальных рельефов, зная асимптотическое поведение *U*(*z*), легко определить интервалы энергии, в которых спектр электрона дискретный, а в каких – непрерывный (рис. 2.1).

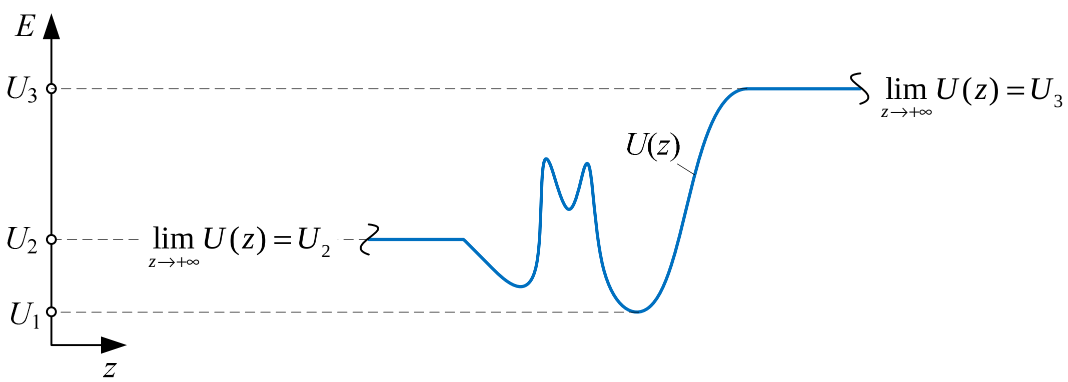

Рис. 2.1. В интервале энергий $E_1 < E < E_2$ спектр электронов дискретный, при $E > E_2$ – непрерывный. Когда $E < E_1$ электронных состояний нет.

Подобная задача имеет место при проектировании лазеров с квантовыми ямами (рис. 2.2), ведь положение энергетических уровней в них определят частоты переходов, а значит –

длину излучаемой волны. Кроме того, ряд задач сводятся к рассматриваемой задаче или же их особенности могут быть поняты, если уяснить способ решения данной задачи.

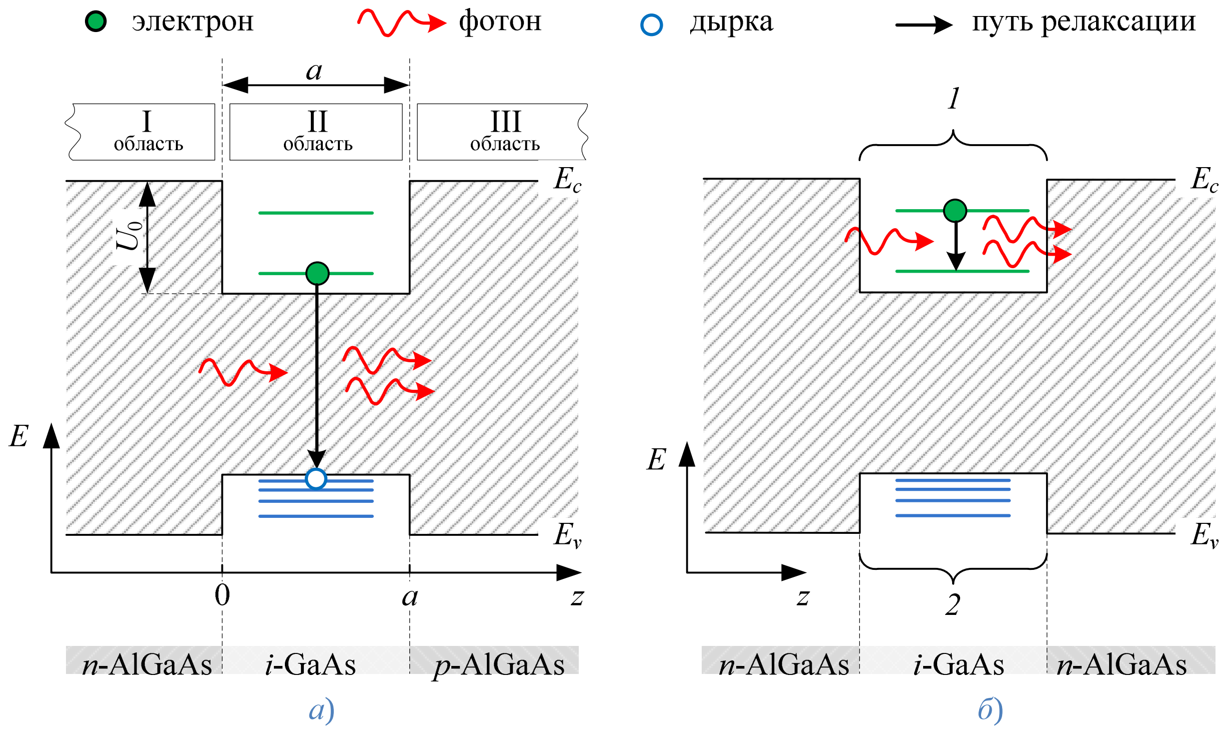

Рис. 2.2. Упрощенная зонная структура *LQW*, работающего на межзонных (*а*) и межподзонных переходах (*б*). *1*(*2*) – квантовые ямы, формирующиеся в ЗП (ВЗ). Адаптировано из http://spie.org/x8882.xml?ArticleID=x8882.

Рассмотрим яму, которая формируется в направлении 0z в зоне проводимости слоя GaAs (рис. 2.2, *а*), заключенного между массивными областями AlGaAs. Соответствующие области обозначим индексами I, II, III, как показано на рис. 2.2, *а*. Пусть ее ширина равна *a*, а глубина – U_0. Положим, что левому краю ямы соответствует координата $z = 0$, тогда правая ее стенка находится в плоскости $z = a$. Из всех долин ЗП будем рассматривать лишь Г-долину, эффективная масса в которых считается известной и равной m_w^* (m_b^*) в области ямы (барьеров).

Задача. Найти уровни энергии и волновые функции электрона в квантовой яме, в зоне проводимости (рис. 2.2, *а*).

Решение. Одномерное уравнение Шредингера для огибающей волновой функции гласит:

$$\frac{d}{dz}\frac{1}{m^*}\frac{d}{dz}\psi + \frac{2}{\hbar^2}(E - U(z))\psi = 0 \tag{2.3}$$

Алгоритм решения задачи будет заключаться в следующем:

1. В каждой из областей I, II, III находим общее решение уравнения (2.3).
2. Используя общие условия, накладываемые на волновую функцию, и граничные условия **Ошибка! Источник ссылки не найден.** (это в сумме четыре уравнения) и

исключить максимальное количество постоянных интегрирования (их в общем случае шесть).

3. Исключить последнюю постоянную интегрирования, потребовав выполнения равенства $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi dz = 1$ (нормировка волновой функции).

– 1 –

Следуя алгоритму, во-первых, записываем общие решения (2.3) в каждой из областей I, II, III:

$$\psi_{\mathrm{I}} = c_1 e^{\chi x} + c_2 e^{-\chi x}, \qquad \chi \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_b^*(U_0 - E)} \tag{2.4}$$

$$\psi_{\mathrm{II}} = C\sin(kx + \delta), \qquad k \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_w^* E}, \tag{2.5}$$

$$\psi_{\mathrm{III}} = c_1 e^{\chi x} + c_2 e^{-\chi x}, \qquad \chi \equiv \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_b^*(U_0 - E)}, \tag{2.6}$$

В формуле (2.4) замечаем, что если $c_2 \neq 0$, второе слагаемое не удовлетворяет условию конечности. Действительно, $\lim\limits_{z\to-\infty} e^{-\chi x} = 0$. Таким образом, единственное значение этой постоянной, которое не противоречит общим требованиям к волновой функции, есть $c_2 = 0$. Само решение в первой области (2.4) при этом перепишется:

$$\psi_{\mathrm{I}} = c_1 e^{\chi x}, \tag{2.7}$$

Проводя аналогичные рассуждения для уравнения (2.6), получим для третьей области:

$$\psi_{\mathrm{III}} = c_2 e^{-\chi x}, \tag{2.8}$$

– 2 –

В дальнейшем нам понадобится такое представление χ, которое выражает его через $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_w E}$, а не саму энергию:

$$\chi = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_b^*(U_0 - E)} = \sqrt{\frac{2m_b^* U_0}{\hbar^2} - k^2} \equiv \sqrt{k_0^2 - k^2} \tag{2.9}$$

Имеем две граничные точки $z = 0$ и $z = a$. Для первой из них система **Ошибка! Источник ссылки не найден.** примет вид:

$$\begin{cases} C_1 = C\sin\delta, \\ \dfrac{C_1}{m_b^*}\chi = \dfrac{C}{m_w^*}k\cos\delta. \end{cases} \tag{2.10}$$

Разделив второе уравнение системы (2.10) на первое, получим:

$$\frac{\chi}{k\alpha} = \mathrm{ctg}\delta, \qquad (2.11)$$

где $\alpha \equiv m_b^* / m_w^*$.
Для точки $z = a$ получим систему:

$$\begin{cases} C_1 \mathrm{e}^{-ka} = C \sin(ka + \delta), \\ -\dfrac{C_1 \chi}{m_b^*} e^{-ka} = \dfrac{C}{m_w^*} k \cos(ka + \delta). \end{cases} \qquad (2.12)$$

Разделив второе уравнение системы (2.12) на первое, получим:

$$\frac{\chi}{k\alpha} = -\mathrm{ctg}(ka + \delta). \qquad (2.13)$$

Используя известное тригонометрическое тождество $\sin\delta = \dfrac{1}{\sqrt{1 + \mathrm{ctg}^2\delta}}$, (2.11) и (2.13) можно переписать в виде:

$$\sin\delta = \frac{1}{\sqrt{1 + \dfrac{\chi^2}{k^2\alpha^2}}}, \ \sin(ka + \delta) = -\frac{1}{\sqrt{1 + \dfrac{\chi^2}{k^2\alpha^2}}}. \qquad (2.14)$$

Исключив из (2.14) δ, получим:

$$\frac{\pi n}{2} - \frac{ka}{2} = \frac{1}{\sqrt{1 + \dfrac{\chi^2}{k^2\alpha^2}}}, \qquad (2.15)$$

где $n = 1,\ 2,\ \ldots$, а значения arcsin берутся между 0 и $\pi/2$. Корни (2.15) определяют собственные значения энергии согласно формуле $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_w^*}$. Для каждого n имеется, вообще говоря, один корень; значения n нумеруют в порядке их возрастания.
Аргумент arcsin не может превышать 1, из чего следует, что $E \le U_0$.

В то же время если брать значения arcsin в интервале от 0 до $\dfrac{\pi}{2}$ (в других интервалах корни будут просто повторяться), то левая часть (2.15) тоже должна находиться в этих пределах, из чего следует, что

$$\frac{ka}{\pi} \le n \le 1 + \frac{ka}{\pi} \qquad (2.16)$$

Из (2.16) можно нетрудно получить суммарное количество уровней N в квантовой яме:

Действительно, $n \le 1+\frac{ka}{\pi} \le 1+\frac{k_0 a}{\pi} = 1+\frac{a\sqrt{2m_w U_0}}{\pi\hbar}$ (здесь введена величина $k_0 = \frac{\sqrt{2m_w U_0}}{\hbar}$). Отсюда заключаем, что $N = 1+\left[\frac{a\sqrt{2mU_0}}{\pi\hbar}\right]$, где квадратные скобки означают операцию взятия целой части.

Введем обозначения, подобные [Ладнау, с. 69]:

$$\xi = \frac{ka}{2},\ \gamma = \frac{2}{k_0 a}. \tag{2.17}$$

В них решение (2.15) запишется:

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1)-\xi\right) = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{1}{\alpha}\left(\frac{1}{\gamma^2\xi^2}-1\right)}}, \tag{2.18}$$

которое в случае равных масс $(\alpha = 1)$ сводится к интуитивно понятному, хотя и трансцендентому уравнению

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1)-\xi\right) = \gamma\xi. \tag{2.19}$$

Очевидно, что чем меньше отличаются эффективные массы, тем более подобна правая часть (2.18) прямой с угловым коэффициентом γ. В любом случае,

$$f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{1}{\alpha}\left(\frac{1}{\gamma^2\xi^2}-1\right)}}$$

есть монотонно возрастающая функция, выходящая из начала координат, что дает интуитивно понятное представление об особенностях решения. Один из способов – это искать точки пересечения $\cos\xi(\sin\xi)$ с прямыми $\pm\gamma\xi$, учитывая что sin следует брать в интервалах $\left(2\pi(n-1), \pi+2\pi(n-1)\right)$, а косинус – во всех остальных, где $n = 1, 2, 3, \ldots$ (рис. 2.3).

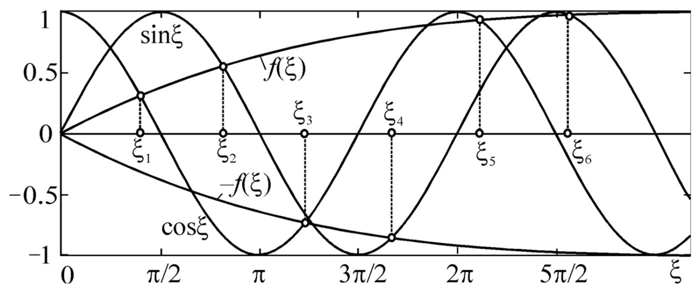

Рис. 2.3. Графическое решение (2.18) для случая, когда $m_w > m_b$.

Предельный случай. В случае бесконечно глубокой квантовой ямы ($U_0 \to \infty$) задачу решение можно получить уже на этапе получения (2.11) и (2.13). Действительно, коль скоро $U_0 \to \infty$, $\chi \to \infty$. При этом из (2.11) и (2.13) следует, что:

$$\delta = \pi n_1,\ \delta + ka = \pi n_2, \tag{2.20}$$

где n_1 и n_1 – целые числа.
Исключив из (2.20) δ, получим спектр значений волнового вектора:

$$k_n = \frac{\pi n}{a}. \tag{2.21}$$

которому, в силу (2.5), соответствует спектр энергий

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2 m_w a^2}. \tag{2.22}$$

В силу (2.20), из (2.11) и (2.13) следует, что C_1 и C_2 равны нулю, что физически означает запрет электрону находится с областях барьеров: $\psi = 0$ при $0 \ge z \ge a$. Лишь в области квантовой ямы решением уравнения Шредингера будут функции:

$$\psi_n = C \sin\left(\frac{\pi n z}{a}\right),\ 0 < z < a. \tag{2.23}$$

Чтобы величина $|\psi_n(z)|^2$ приобрела смысл вероятности найти электрон с энергией E_n в точке с координатой z, необходимо нормировать ψ, а именно найти такое C, чтобы нахождение электрона с энергией E_n где-либо в пространстве было событие достоверное:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z)|^2 \, dz = 1 \tag{2.24}$$

Несложные вычисления с использованием формулы $\sin^2 x = \{1 - \cos(2x)\}/2$ приводят к выводу, что $C = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

Таким образом, в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной а положение уровней не зависит от отношения эффективных масс и определяется:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2 m_w a^2}. \tag{2.25}$$

Собственные функции отличны от нуля лишь в области ямы и равны там:

$$\psi_n(z)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}z\right),\ 0<z<a. \tag{2.26}$$

* * *

Домашнее задание (+3 балла**)**:

1. Рассчитать положение первых трех уровней:

а) бесконечно глубокой ямы;

б) ямы шириной 4 нм и ямы глубиной 1 эВ, считая, что масса электрона в барьерных слоях в четыре раза меньше (для четных вариантов) или больше (для нечетных) массы в квантовой яме.

2. Изобразить результаты расчетов на зонной диаграмме. Сделать выводы.

Для размышлений (+2 балла за аргументированный ответ):

→ *Можно ли пронормировать волновые функции, описывающие состояния непрерывного спектра?*