УДК 51-72.530.145 *Краткое сообщение*

Расчет спектра полупроводника арсенида галлия с треугольной потенциальной функцией методом степенных рядов

И.Н. Беляева[1], Н.И. Корсунов[1], Н.А. Чеканов[1], А.Н. Чеканов[2]

[1] ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

308015, Россия, Белгородская область, Белгород, ул. Победы, 85

[2]ФГКОУ ВО «Белгородский юридический институт МВД РФ им. И.Д. Путилина»

308002, Россия, Белгородская область, Белгород, ул. Горького, 71

ibelyaeva@bsu.edu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.337

Аннотация: В работе исследованы квантовые характеристики широко используемого полупроводника арсенида галлия в современной перспективной области микроэлектроники. Для уровней энергии в треугольной потенциальной яме получены аналитические выражения с применением нулей функции Эйри. Кроме того, методом степенных рядов решено соответствующее уравнение Шрёдингера с этой потенциальной функцией и вычислены, как энергетический спектр нижних уровней, так и соответствующие волновые функции. Обнаружено удовлетворительное согласие значений энергетических уровней, полученных в обоих подходах, но отмечена перспективность расчетов квантовых характеристик непосредственно по уравнению Шрёдингера. Решение уравнения Шрёдингера ищется в виде линейной комбинации двух линейно независимых решений в виде степенных рядов. Коэффициенты этой линейной комбинации зависят от полной энергии как параметра. Учет граничных условий на границе отрезка интегрирования приводят к линейной алгебраической системе уравнений для этих коэффициентов. Нетривиальные решения этой системы определяют, как спектр энергий, так и соответствующие волновые функции. Из-за резкой зависимости уровней энергии от вида волновых функций необходим тщательный выбор граничных точек, а также числа членов в рядах волновых функций. Оптимальные значения указанных подгоночных параметров позволяют получить значения уровней энергии с высокой желаемой точностью.

Ключевые слова: гетероструктуры, компьютерное моделирование, уравнение Шрёдингера, арсенид галлия, энергетический спектр, волновые функции, метод степенных рядов, функция Эйри.

В последние несколько десятилетий во всем мире ведутся интенсивные теоретические и экспериментальные исследования микроскопических гетероструктур с целью создания приборов и устройств, которые станут элементами больших интегральных схем, способных с высокой скоростью перерабатывать и хранить огромные объёмы информации и составят основу нового поколения электронных и оптоэлектронных машин [1-8]. Наиболее удачной парой для наращивания квантовых ям является полупроводник $GaAs$ арсенид галлия и твердый раствор $Al_xGa_{1-x}As$, в котором часть атомов галлия замещена атомами алюминия. Величина x есть доля атомов галлия, замещенных атомами алюминия. Обычно x изменяется от 0,15 до 0,35. Ширина запрещенной зоны в арсениде галлия составляет 1,5 эВ, а в твердом растворе $Al_xGa_{1-x}As$

она растет с ростом x и при $x=1$ ширина равна 2,2 эВ [1]. Для теоретического описания движения электронов в арсениде галлия применяется уравнение Шрёдингера с треугольной потенциальной ямой [1]:

$$V(x)=\begin{cases}\alpha x,\ \alpha=|e|\cdot|\mathbf{E}|,\ x>0,\\ \infty,\ \ x\le 0.\end{cases}. \tag{1}$$

Таким образом, в области $x>0$ электрон движется в однородном электрическом поле с напряженностью $\mathbf{E}$, а в начале координат имеется бесконечно высокая отражающая стенка, то есть имеется треугольная потенциальная яма $V(x)$. Тогда соответствующее уравнение Шрёдингера в атомной системе единиц ($\hbar=m=e=1$) (см., например, [9]) запишется в виде:

$$\left[-\frac{1}{2}\cdot\frac{d^2}{dx^2}+\alpha x\right]\psi(x)=E\psi(x),. \tag{2а}$$

с граничными условиями:

$$\psi(0)=0,\ \psi(\infty)\to 0\,. \tag{2б}$$

функция $V(x)$ образует треугольную потенциальную яму и является функцией разрывной. Значения параметров R_{left} и R_{right} можно оценить из асимптотик функции Эйри при $x\to\pm\infty$. Эти параметры представляют левые и правые краевые точки интервала интегрируемости уравнения Шредингера в виде степенных рядов. Их конкретные значения, как и параметр числа членов в степенных рядах, определяются методом их вариации, при которых значения уровней энергии практически не изменяются. В наших расчетах эти оптимальные значения равны R_{left}= -0,28·10^{-26}. R_{right}= 13,5, а число членов ряда находится в области 150-200. При этом согласно вариационному принципу значения полученных уровней энергии будут собственными значениями краевой задачи (2а), (2б) с точностью 10^{-5}. Уравнение (2а), (2б) решаем с применением обобщенных степенных рядов [10] при помощи разработанной компьютерной программы [11]. В Таблице 1 представлен вычисленный спектр энергий уравнения Шрёдингера (2а), (2б), полученный с помощью разработанной программы EWA [11], в атомных единицах энергии (а.е.э.) в первой колонке, и для удобства в практических единицах энергии во второй колонке.

Волновые функции $\psi_n(x)$ получены в виде степенных рядов. Для получения уровней энергии с высокой точностью требуются волновые функции с несколькими десятками членов в их рядах (примерно 100-200 членов), поэтому из-за громоздкости ряды для волновых функций не приводятся.

Таблица 1. Энергетический спектр уравнения Шрёдингера (2а), (2б) при значении параметра $\alpha = 1$.

№	E_n, а.е.э.	E_n, эВ
0	1,85575	50,4949575
1	3,24446	88,2817566
2	4,381671	119,2252679
3	5,386613	146,5697397
4	6,305263	171,5662062

Уравнение (2а) перепишем в виде:

$$\psi''_{xx} - 2\alpha(x - E/\alpha)\psi(x) = 0\,. \qquad (3)$$

В уравнении (2а) выполним замену независимой переменной:

$$z = \beta(x - E/\alpha),\ (x - E/\alpha) = z/\beta\,, \qquad (4)$$

в которой величину β подберем ниже. При этой замене уравнение Шрёдингера примет вид

$$\psi''_{zz} - (2\alpha/\beta^3)z\psi(z) = 0\,. \qquad (5)$$

Если положить $2\alpha = \beta^3$, то исходное уравнение Шрёдингера сведется к специальному уравнению Эйри [12]:

$$\psi''_{zz} - z\psi(z) = 0\,. \qquad (6)$$

Решением этого уравнения, убывающим до нуля при $z \to \infty$ является функция Эйри $Ai(z)$, тогда $\psi(x) \approx 1/2 \cdot x^{-1/4} \cdot \exp\left\{-2/3 \cdot x^{3/2}\right\}$, то есть решением исходного уравнения Шрёдингера (2а), (2б) является следующая функция:

$$\psi(x) \approx const \cdot Ai\left[z(x)\right] = const \cdot Ai\left[\beta(x - E/\alpha)\right]. \qquad (7)$$

Такое представление волновой функции дает возможность записать собственные значения исходного уравнения Шрёдингера посредством значением нулей функции Эйри. В самом деле, условие $\psi(x=0)$ с учетом (7) приводит к уравнению

$$\psi(x=0) = Ai\left[\beta(-\beta E/\alpha)\right] = 0. \qquad (8)$$

И если через z_n обозначить нули функции Эйри $Ai(z_n) = 0$, все которые есть отрицательные числа [12, 13], то из уравнения (8) непосредственно получаем следующую формулу для уровней энергии в атомной системе единиц:

$$E_n = -z_{n+1} \cdot \sqrt[3]{\alpha^2/2},\ n = 0,1,2.... \qquad (9)$$

Так как основному состоянию с энергией E_0 соответствует первый корень z_1, то все остальные уровни энергии и будут вычисляться по формуле (9), которая совпадает, например, с подобной формулой из книги [4]. Значения уровней энергии, вычисленных методом степенных рядов и вычисленных по аналитической формуле (9) согласуются с точностью 10^{-4}%.

Напомним, что в атомной системе единиц единица измерения энергии равна $4{,}36\cdot10^{-11}$ эрг = 27,21 эВ. Сравнение уровней энергий E_n, полученных из решения уравнения Шрёдингера (2а), (2б) и вычисленных по формуле (9) показывает, что значения уровней энергий согласуются с точностью порядка 10^{-4} процента.

Однако этот описанный факт о связи уравнений Шрёдингера и Эйри и полученная формула (10) не дают никакой практической выгоды, так как расчеты нулей функции Эйри составляют достаточно сложную самостоятельную задачу [13]. И, без сомнения, более перспективнее и рациональнее, а также и быстрее вычислять спектр и волновые функции из уравнения Шрёдингера (2а), (2б) при любых α, например, прямым методом решения уравнения Шрёдингера, например, с применением метода степенных рядов [11] или другими имеющимися методами [14]. К сожалению, в текущей литературе не имеются сведения об экспериментальных значениях уровней энергии в арсениде галлия. Следует также отметить, что потенциальная функция в виде треугольной ямы построена только на качественном уровне на основе анализа электронных свойств и зонной структуры компонент арсенида галлия [15] и не содержит конкретных параметров этой гетероструктуры. Поэтому полученные результаты следует рассматривать как модельные, хотя разработанная программа решения уравнения Шредингера достаточно точно вычисляет энергетический спектр и волновые функции.

Библиографический список:

1. **Lesovik, G**. Electronic transport in meso- and nano-scale conductors / G. Lesovik. – Zurich: ETH Zurich, 2008. – 156 p.

2. **Supriyo, D.** Quantum transport: atom to transistor / D. Supriyo; 2nd ed. – Cambridge**:** Cambridge University Press, 2005. – 420 p. DOI: 10.1017/CBO9781139164313.

3. **Harrison, P**. Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures / P. Harrison; 2nd ed. – Chichester: John Willey & Sons, LTD, 2005. – 502 p. DOI: 10.1002/0470010827.

4. **Демиховский, В.Я.** Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер. – М.: Логос, 2000. – 248 с.

5. **Шик, А.Я.** Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков; под ред. А.Я Шика. – СПб.: Наука, 2001. – 160 с.

6. **Хлудков, С.С.** Полупроводниковые приборы на основе арсенида галлия с глубокими примесными центрами / С.С. Хлудков, О.П. Толбанов, М.Д. Вилисова, И.А. Прудаев; под. ред. О.П. Толбанова. – Томск: Издательский Дом Томского госуниверситета, 2016. – 258 с.

7. **Тавгер, Б.А.** Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках / Б.А. Тавгер, В.Я. Демиховский // Успехи физических наук. – 1968. – Т. 96. – Вып. 9. – С. 61-86. DOI: 10.3367/UFNr.0096.196809d.0061.

8. **Демиховский, В.Я.** Квантовые ямы, нити, точки. Что это такое? / В.Я. Демиховский // Соросовский образовательный журнал. – 1997. – № 5. – С. 80-86.

9. **Ландау, Л.Д.** Курс теоретической физики. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц; 6-е изд., испр. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 800 с.

10. **Степанов, В.В.** Курс дифференциальных уравнений / В. В. Степанов. – М.: ГИТТЛ, 1953. – 468 с.

11. **Беляева, И.Н.** Построение общего решения дифференциальных уравнений фуксовского типа в виде степенных рядов / И.Н. Беляева, Ю.А. Уколов, Н.А. Чеканов. Зарегистрировано в Отраслевом фонде алгоритмов и программ. – М.: ВНТИЦ, 2005. – № 50200500089.

12. **Airy, G.B.** On the intensity of light in the neighbourhood of a caustic / G.B. Airy // Transactions of the Cambridge Philosophical Society. – 1838. – V. 6. – P. 379-402.
13. **Яковлева, Г.Д**. Таблицы функций Эйри и их производных / Г.Д. Яковлева. – М.: Наука, 1969. – 377 с.
14. **Чеканов, Н.А.** Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Кириченко, Н.Н. Чеканова. – Харьків: «ИСМА», 2019 – 420 с.
15. **Штокман, Х.-Ю.** Квантовый хаос: введение / Х.-Ю. Штокман; пер. с англ. А.И. Малышева. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 376с.

References:

1. Lesovik G. *Electronic transport in meso- and nano-scale conductors*. Zurich, ETH Zurich, 2008, 156 p.
2. Supriyo D. *Quantum transport: atom to transistor*, 2nd ed. Cambridge, Cambridge University Press, 2005, 420 p. DOI: 10.1017/CBO9781139164313.
3. Harrison P. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures,* 2nd ed. Chichester, John Willey & Sons, LTD, 2005, 502 p.
4. Demixovskij V.Ya, Vugalter G. A. *Fizika nizkorazmernykh system* [Physics of quantum low-dimensional structures]. Moscow, Logos Publ., 2000, 248 p. (In Russian).
5. Shik A.Ya, Bakueva L.G., Musixin S.F., Ryghkov S.A. *Fizika nizkorazmernykh system* [Physics of low-dimensional systems], ed. by A.Ya Shik. Saint Peterburg, Nauka Publ., 2001, 160 p. (In Russian).
6. Hludkov S.S., Tolbanov O.P., Vilisova M.D., Prudaev I.A. *Poluprovodnikovye pribory na osnove arsenida galliya s glubokimi primesnymi tsentrami* [Gallium arsenide-based semiconductor devices with deep impurity centers], ed, by O.P. Tolbanov. Tomsk, Tomsk State University Publ., 2016, 258 p. (In Russian).
7. Tavger B.A., Demikhovskii V.Ya. Quantum size effects in semiconducting and semimetallic films, *Soviet Physics Uspekhi,* 1969, vol. 11, issue 5, pp. 644-658. DOI: 10.3367/UFNr.0096.196809d.0061.
8. Demikhovskii V.Ya. Kvantovye yamy, niti, tochki. Chto eto takoe? [Quantum wells, threads, dots. What are they?], *Sorosovskij obrazovatel'nyj zhurnal [Soros Educational Journal]*, 1997, no. 5, p. 80-86. (In Russian).
9. Landau L.D., Lifshits E.M. *Kurs teoreticheskoj fiziki* [Course of theoretical physics], 10 volumes. Vol. III. Kvantovaya mekhanika (nerelyativistskaya teoriya) [Quantum mechanics (non-relativistic theory)], 6th ed. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2004, 800 p. (In Russian).
10. Stepanov V.V. *Kurs differentsial'nykh uravnenij* [Course of differential equations]. Moscow, GITTL Publ., 1953, 468 p. (In Russian).
11. Belyaeva I. N., Ukolov Yu.A., Chekanov N.A. *Postroenie obshchego resheniya differencial'nykh uravnenij fuksovskogo tipa v vide stepennykh ryadov [Construction of a general solution of differential equations of Fuchsian type in the form of power series]*. Moscow, The All-Russian Scientific and Technical Information Center, 2005, no. 50200500089. (In Russian).
12. Airy G.B. On the intensity of light in the neighbourhood of a caustic, Transactions of the Cambridge Philosophical Society, 1838, vol. 6, pp. 379-402.
13. Yakovleva G.D. *Tablitsy funktsij Ejri i ikh proizvodnykh* [Tables of Airy functions and their derivatives]. Moscow, Nauka Publ., 1969, 377 p. (In Russian).
14. Chekanov N.A., Belyaeva I.N., Kirichenko I.K., Chekanova N.N. *Simvol'no-chislennye metody resheniya differentsial'nykh uravnenij klassicheskoj i kvantovoj mekhaniki* [Symbolic-numerical methods for solving differential equations of classical and quantum mechanics]. Kharkov: ISMA Publ., 2019, 420 p. (In Russian).
15. Stockman, H.-J**.** Quantum Chaos. An introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 1999, XI, 368 p. DOI: 10.1017/CB09780511524622.

Short communication

Calculation of the spectrum of a gallium arsenide semiconductor with a triangular potential function by the power series method

I.N. Belyaeva[1], N.I. Korsunov[1], N.A. Chekanov[1], A.N. Chekanov[2]
[1]*Belgorod national research university, Belgorod, Russia*
[2]*Belgorod law institute of MIA of the Russian Federation named after I.D. Putilin, Belgorod, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.337

Abstract: The paper investigates the quantum characteristics of the widely used semiconductor gallium arsenide in the modern promising field of microelectronics. For the energy levels in a triangular potential well, analytical expressions are obtained using the zeros of the Airy function. In addition, the corresponding Schrödinger equation with this potential function is solved by the power series method and both the energy spectrum of the lower levels and the corresponding wave functions are calculated. Satisfactory agreement between the values of the energy levels obtained in both approaches is found, but the prospects of calculating the quantum characteristics directly using the Schrödinger equation are noted. The solution of the Schrödinger equation is sought as a linear combination of two linearly independent solutions in the form of power series. The coefficients of this linear combination depend on the total energy as a parameter. Taking into account the boundary conditions on the boundary of the integration segment leads to a linear algebraic system of equations. Nontrivial solutions of this system determine both the energy spectrum and the corresponding wave functions. Due to the sharp dependence of the energy levels on the type of wave functions, a careful choice of boundary points is necessary, as well as the number of terms in the series of wave functions. Optimal values of the specified fitting parameters allow us to obtain the values of the energy levels with the desired high accuracy.

Keywords: heterostructures, computer modeling, Schrödinger equation, gallium arsenide, energy spectrum, wave functions, power series method, Airy function.

Беляева Ирина Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методик преподавания, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Корсунов Николай Иванович – д.т.н., профессор, профессор кафедры математического и программного обеспечения информационных систем, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры прикладной математики и компьютерного моделирования, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Чеканов Александр Николаевич – старший преподаватель кафедры обеспечения безопасности на объектах транспорта, ФГКОУ ВО «Белгородский юридический институт МВД РФ им. И.Д. Путилина»

Irina N. Belyaeva – Ph. D., Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University
Nikolay I. Korsunov – Dr. Sc., Professor, Department of Mathematical and Software Information Systems, Belgorod National Research University
Nikolay A. Chekanov – Dr. Sc., Professor, Department of Applied Mathematics and Computer Modeling, Belgorod National Research University
Aleksandr N. Chekanov – Senior Lecturer, Department of Security at Transport Facilities Belgorod Law Institute of MIA of the Russian Federation named after I.D. Putilin

Поступила в редакцию/received: 01.08.2024; после рецензирования/revised: 22.08.2024; принята/accepted 24.09.2024.