

Продолжение таблицы

|     |              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                        |
|-----|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|
| II  | ХП $\mu$     | $A_1 = 0$ , $A_2 = (\pi k T)^2$ , $A_3 = -3 n_e \pi^2 (\hbar c)^3$ ,<br>$A_0 = \pi^2 (k T)^3 m_e^2 c^4 / 2$ , где $\hbar$ – постоянная Планка,<br>$k$ – постоянная Больцмана, $n_e$ – концентрация<br>электронов, $m_e$ – масса электрона $c$ – скорость<br>света в вакууме, $T$ – температура                                                                                                                                                                                  | Да, поскольку можно менять $n_e$ и $T$ |
| III | ССП $\rho_n$ | $A_3 = -\frac{64}{27 \Omega^3(B)}$ , $A_2 = -\frac{2}{9}$ , $A_1 = -\frac{4}{9} \Omega^3(B)$ ,<br>$A_0 = 1 + \frac{1}{27} \Omega^6(B)$ , $\Omega(B) = 4 m_n \sigma_n \mu_n B (3 \pi^2 \hbar^3 n_n)^{-2/3}$ ,<br>где $\mu_n$ – ядерный магнетон, $\sigma_n = -1,9126$ – отношение<br>собственного магнитного момента нейтрона<br>к ядерному магнетону, $m_n$ – масса нейтрона, $\hbar$ –<br>постоянная Планка, $n_n$ – концентрация нейтронов,<br>$B$ – индукция магнитного поля | Да, поскольку можно менять $n_n$ и $B$ |

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сивухин, Д. В. Общий курс физики : учеб. пособие для вузов : в 5 т. / Д. В. Сивухин. – М. : Наука, 1977. – Т. 3 : Электричество. – 688 с.
2. Серый, А. И. Аналитическое решение уравнения для химического потенциала релятивистского электронного газа при низких отличных от нуля температурах / А. И. Серый // Молодежь, наука, образование: актуальные вопросы, достижения и инновации : сб. ст. IV Междунар. науч.-практ. конф. В 2 ч. Ч. 1. – Пенза : МЦНС «Наука и просвещение», 2021. – С. 11–13.
3. Секержицкий, В. С. Равновесные системы фермионов и бозонов в магнитных полях : монография / В. С. Секержицкий ; Брест. гос. ун-т им. А. С. Пушкина. – Брест : Изд-во БрГУ, 2008. – 198 с.

УДК 539.2:621.3.049.77

**С. В. ЧУГУНОВ<sup>1</sup>, А. С. ЧУГУНОВ<sup>1</sup>, Э. В. ЧУГУНОВА<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Брест, БрГТУ

<sup>2</sup>Брест, гимназия № 4

#### САМОСОГЛАСОВАННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА И ПУАССОНА В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ COMSOL MULTIPHYSICS

С уменьшением размеров элементов интегральных схем большое влияние на работу приборов оказывают различные квантовые эффекты.

Такие эффекты наблюдаются, например, в двумерном электронном газе (2D-газе), заключенном в области вблизи границ раздела различных полупроводников, а также полупроводника и диэлектрика, т. е. в объектах, которые в широком смысле слова можно назвать гетероструктурами.

При соединении полупроводников различного химического состава, т. е. материалов с разной шириной запрещенной зоны, например AlGaAs/GaAs, происходит разрыв зоны проводимости и валентной зоны на их границе, что приводит к образованию двумерного электронного газа.

Система уравнений для гетеропереходов включает в себя уравнение Шредингера, Пуассона и граничные условия. Эта система в высшей степени нелинейна и сложна для численных расчетов.

В данной работе представлена модель нанопроволоки AlGaAs/GaAs, реализованная в модуле Semiconductor программного продукта COMSOL Multiphysics.

Мультифизический интерфейс уравнения Шредингера – Пуассона, доступный в COMSOL Multiphysics, создает двунаправленную связь между интерфейсом электростатики и уравнением Шредингера для моделирования носителей заряда в квантово ограниченных системах. Для решения двусторонней связанной системы уравнение Шредингера и уравнение Пуассона решаются итеративно до тех пор, пока не будет получено самосогласованное решение. Итерационная процедура состоит из следующих шагов:

Шаг 1. Чтобы обеспечить хорошее начальное условие для итераций, мы решаем уравнение Пуассона

$$\nabla(\varepsilon \nabla V) = \rho, \quad (1)$$

для электрического потенциала  $V$ , в котором  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $\rho$  – плотность объемного заряда.

Шаг 2. Электрический потенциал  $V$  из предыдущего шага вносит вклад в член потенциальной энергии  $V_e$  в уравнении Шредингера:

$$V_e = qV, \quad (2)$$

где  $q$  – заряд частицы-носителя, который определяется выражением

$$q = z_q e, \quad (3)$$

где  $z_q$  – номер заряда,  $e$  – элементарный заряд.

Шаг 3. С обновленным термином потенциальной энергии  $V_e$ , данным уравнением 2, уравнение Шредингера решается с получением набора соб-

ственных энергий  $E_i$  и соответствующего набора нормированных волновых функций  $\Psi_i$ .

Шаг 4. Профиль плотности частиц  $n_{sum}$  рассчитывается с использованием статистически взвешенной суммы плотностей вероятностей:

$$n_{sum} = \sum_i N_i |\Psi_i|^2 \quad (4)$$

где множитель  $N_i$ , определяется:

$$N_i = g_i \frac{m_d}{\pi \hbar^2} k_B T F_0 \left( \frac{E_f - E_i}{k_B T} \right), \quad (5)$$

где  $g_i$  – коэффициент вырождения ямы,  $E_f$  – уровень Ферми,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура,  $m_d$  – эффективная масса плотности состояния,  $F_0$  – интеграл Ферми – Дирака.

Шаг 5. Учитывая профиль плотности частиц  $n_{sum}$ , мы переоцениваем плотность пространственного заряда  $\rho$ , а затем повторно решаем уравнение Пуассона, чтобы получить новый профиль электрического потенциала  $V$ . Простая формула для новой плотности пространственного заряда:

$$\rho = q n_{sum}, \quad (6)$$

почти всегда приводит к расхождению итераций. Намного лучшую оценку дает:

$$\rho = q n_{sum} \exp \left( e^{-\alpha} \frac{-q(V - V_{old})}{k_B T} \right), \quad (7)$$

где  $V_{old}$  – электрический потенциал из предыдущей итерации, а  $\alpha$  – дополнительный параметр настройки. Уравнение (7) используется решающей последовательностью для вычисления плотности  $\rho$  пространственного заряда.

Формула основана на том, что плотность частиц  $n_{sum}$  является результатом  $V_{old}$  и изменится после повторного решения уравнения Пуассона для получения нового. Другими словами, уравнение 6 можно более подробно записать как:  $\rho_{new} = q n_{sum,old}$ .

Поскольку  $n_{sum}$  является результатом  $V_{old}$ ,  $\rho$  используется для повторного решения уравнения Пуассона, чтобы получить новое  $V$ .

Чтобы достичь самосогласованного решения, лучшая формула была бы  $\rho_{\text{new}} = q n_{\text{sum, new}}$ .

Однако мы можем только сформулировать прогноз для него, используя статистику Больцмана, которая обеспечивает простую экспоненциальную связь между потенциальной энергией  $V_e = qV$  и плотностью частиц,  $n_{\text{sum}}$ .

$$n_{\text{sum, new}} = n_{\text{sum, old}} \exp\left(\frac{-q(V - V_{\text{old}})}{k_B T}\right), \quad (8)$$

ШАГ 6. После получения нового профиля электрического потенциала  $V$ , путем повторного решения уравнения Пуассона сравниваем его с электрическим потенциалом из предыдущей итерации  $V_{\text{old}}$ . Если два профиля совпадают в пределах желаемого допуска, то можно сделать вывод, что достигнута самосогласованность. В противном случае переходим к шагу 2, чтобы продолжить итерацию.

Полученный нами результат распределения плотности и потенциальной энергии электронов по гетероструктуре (рисунок) хорошо согласуется с данными, опубликованными в [1].

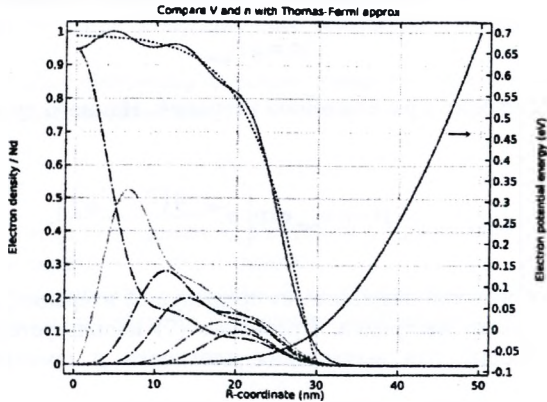


Рисунок 1 – Распределение плотности и потенциальной энергии электронов по гетероструктуре

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luscombe, J. H. Electron confinement in quantum nanostructures: Self-consistent Poisson-Schrödinger theory / J. H. Luscombe, A. M. Bouchard, M. Luban // Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 46, № 16. – P. 10262.