

О ПЕРЕСТРОЙКЕ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ

В.Ф. Дегтярев

*Московский технический университет связи и информатики,
Москва, Авиамоторная ул., 8а;
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Поступила 07.10.2024

Исследован механизм перестройки резонансных туннельных уровней в процессе образования слоистой квантово-размерной структуры с базисом из двух барьеров различной высоты. Установлено, что с увеличением числа звеньев происходит расщепление этих уровней на близкие подуровни и изменение волновой функции. Рассмотрен механизм перестройки уровней в цепочке, основанный на представлениях о смене фаз колебаний осцилляторов. Рассмотрен подробно случай, когда энергия частицы превышает высоту малого барьера.

Ключевые слова: квантовая механика, квантовый барьер, волновая функция, прозрачность, наноэлектроника, резонансное туннелирование.

DOI: 10/31145/2224-8412-2024-24-1-5-20

Введение

Резонансное туннелирование в квантово-размерных структурах представляет собой новое быстро развивающееся направление исследований в наноэлектронике. Описанию свойств подобных структур посвящен ряд обзоров, например [1-3]. В этих работах достаточно подробно рассмотрена их энергетическая структура, оптические и электрические свойства.

В современных наноэлектронных приборах (резонансных туннельных диодах и транзисторах и др.) активная область имеет размеры порядка не-

скольких нанометров. Эта величина сравнима с длиной волны электрона и межатомным расстоянием типичных полупроводников, что приводит к существенному влиянию квантово-размерных эффектов на работу приборов. Размерное квантование приводит также к перестройке энергетического спектра наноструктур [4,5]. При этом в цепочке возникают новые резонансные уровни, приводящие к значительному изменению их электрических и оптических свойств.

В данной работе изучен процесс перестройки этих уровней при изменении параметров цепочки. Значительное внимание уделено случаю, когда энергия частицы (E) превосходит высоту малого барьера (U_1), т. е. выполнено условие $U_1 < E < U_2$. Случай малой энергии микрочастицы ($E < U_1$) достаточно подробно рассмотрен в работах [6,7].

Методика моделирования и структуры, исследованные в работе

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем решения уравнения Шредингера в системе компьютерной алгебры MAPLE. Подобные системы помимо численного решения поставленной задачи позволяют получить и аналитическое решение, что делает расчеты более наглядными, и позволяет не только построить теоретическую модель физического процесса, но и визуализировать полученные результаты. В основу расчета положены основные результаты работ [8,9] по распространению волн через многослойные среды. Используемые методы удобно применять к распространению одномерных (в том числе и электронных) волн в прямом и обратном направлении, но возможно их применение и к электромагнитным волнам. В работе рассмотрена цепочка со сложным базисом, состоящим из барьеров различной высоты. Результаты исследования резонансных

туннельных уровней (РТУ) в элементарной ячейке из двух барьеров приведены в [6,7]. В данной работе увеличение длины цепочки производится путем последовательного присоединения к элементарному звену дополнительных барьеров. Рассмотрены два варианта: 1) когда в начале цепочки стоит высокий (случай А) барьер; 2) когда в начале низкий (случай Б) барьер.

Последующие барьеры присоединяются к предыдущим регулярным образом путем чередования высоких и низких барьеров. Схемы образовавшихся цепочек показаны на рис. 1.

Параметры барьеров в цепочке принимались следующими: ширина барьеров (a) и ям (b) — 1 нм, что примерно соответствует межатомному расстоянию в кристаллах. Высота большого барьера (U_2) составляла 2, высота малого барьера (U_1) — 1. Амплитуда падающей волны принималась равной единице. В работе исследована зависимость волновых функций, прозрачности и положения резонансных туннельных уровней (РТУ) от характеристик цепочки.

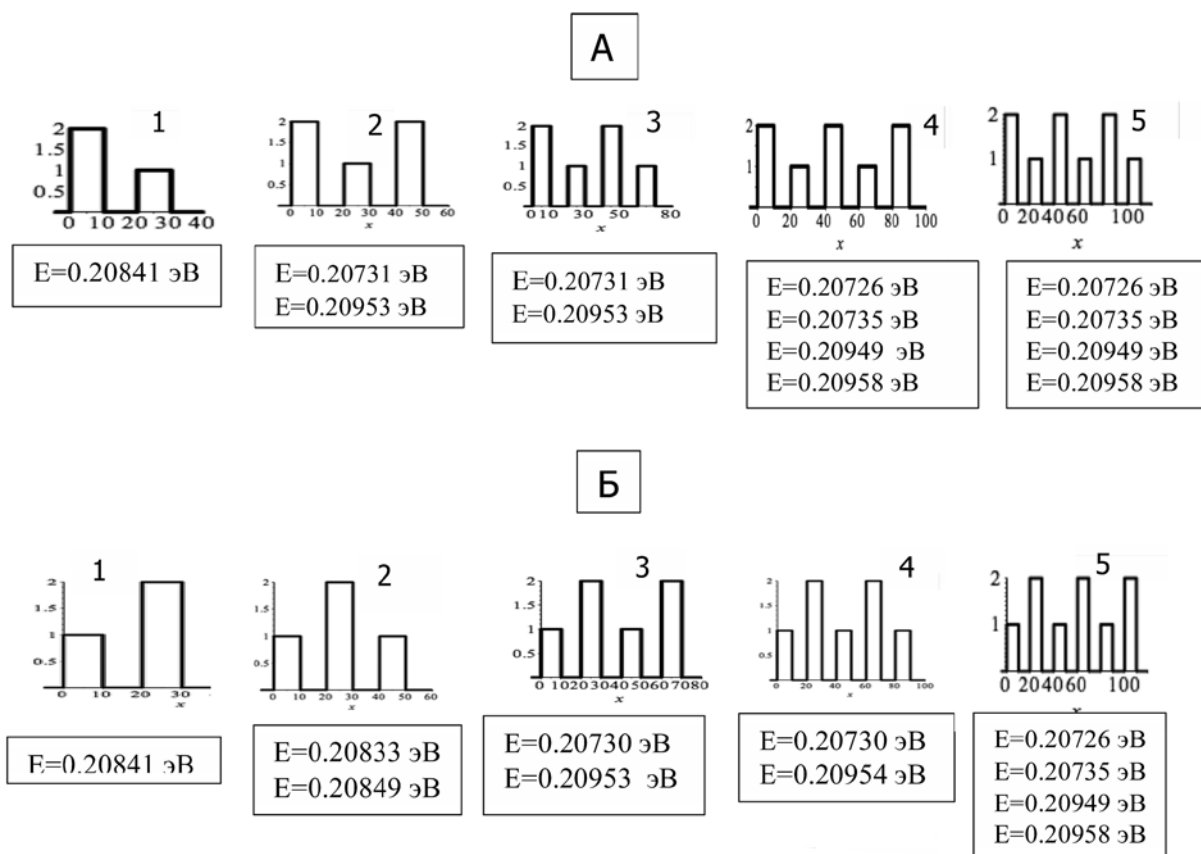


Рис.1 Схемы цепочек и энергии резонансных уровней в них.

Некоторые свойства резонансных туннельных уровней в звеньях из двух и трех барьеров

Результаты моделирования показывают, что в двухбарьерной структуре (рис.1-1А и рис.1-1Б) наблюдаются энергетические уровни $E_1=0.2084$ эВ и $E_2=0.78$ эВ. Их энергия меньше, чем в ячейке с барьерами одинаковой высоты (0.228 эВ и 0.88 эВ соответственно). Зависимость энергии уровней от соотношения высот барьеров приведена в [6]. Рассмотрим спектры прозрачности, соответствующие различным уровням в трехбарьерной структуре с конфигурацией типа А и Б. Здесь представляет интерес рассмотреть три варианта: 1) $E < U_1$ (подбарьерное движение), 2) $U_1 < E < U_2$ (промежуточный случай), 3) $E > U_2$ (надбарьерное движение). Спектры прозрачности структур показаны на рис. 2.

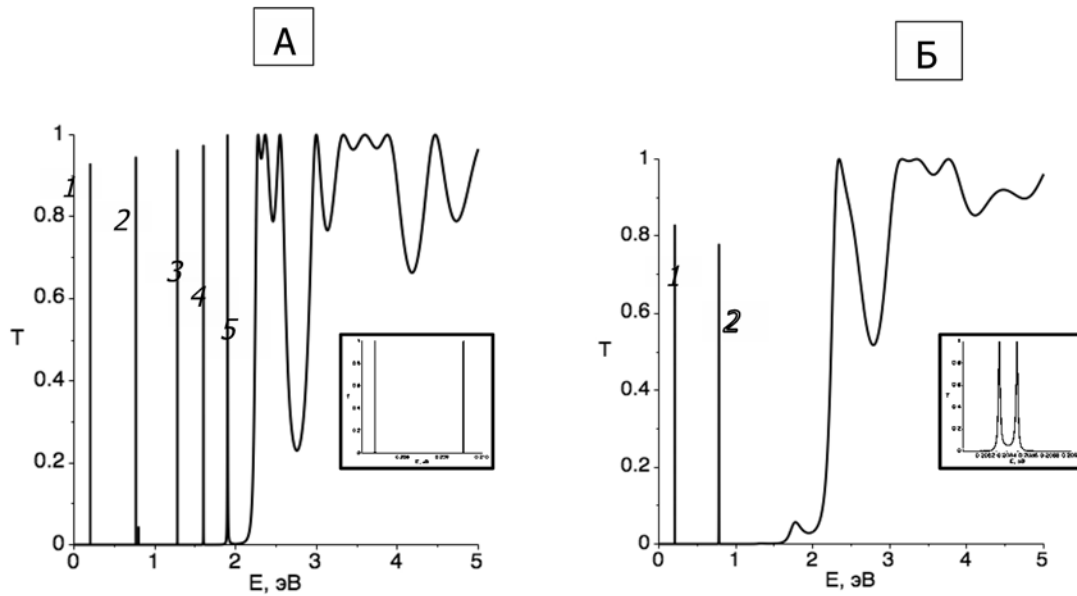


Рис. 2. Спектр прозрачности структур типа 2А (А) и 2Б(Б) (см. рис. 1).

Энергии РТУ: 1-0.208 эВ; 2-0.78 эВ; 3-1.28 эВ; 4-1.60 эВ ; 5-1.90 эВ.

На вставках показана схема расщепления уровня E_1 (0.208 эВ)

в структурах типа А и Б.

В случае 1 наблюдаются РТУ, обусловленные резонансом при отражении волны от высокого и низкого барьеров. Это пики 1 и 2 на рис. 2А и 2Б (0.208 эВ и 0.78 эВ). Величина расщепления при этом определяется конфигурацией системы и коэффициентом связи между элементарными ячейками. В структуре, показанной на рис. 2-А, связь достаточно велика и величина расщепления составляет 0.002 эВ. Энергия основного состояния составляет 0.2073 эВ. Этому состоянию соответствует четная конфигурация волновой функции, при которой волны в соседних звеньях складываются в одной фазе. При этом волновая функция не обращается в ноль ни в одной точке рассматриваемого интервала (см. рис. 3А- вставка). Для системы рис. 2-Б расщепление мало и равно 0.00015 эВ, что обусловлено тем обстоятельством, что между ячейками располагается высокий барьер, препятствующий эффективному взаимодействию звеньев. Первому возбужденному состоянию в этом случае соответствует нечетная конфигурация. Волны в соседних ямах при этом складываются в противоположных фазах и наблюдается одна точка смены фаз колебаний и волновая функция обращается в ноль один раз (рис. 3-Б).

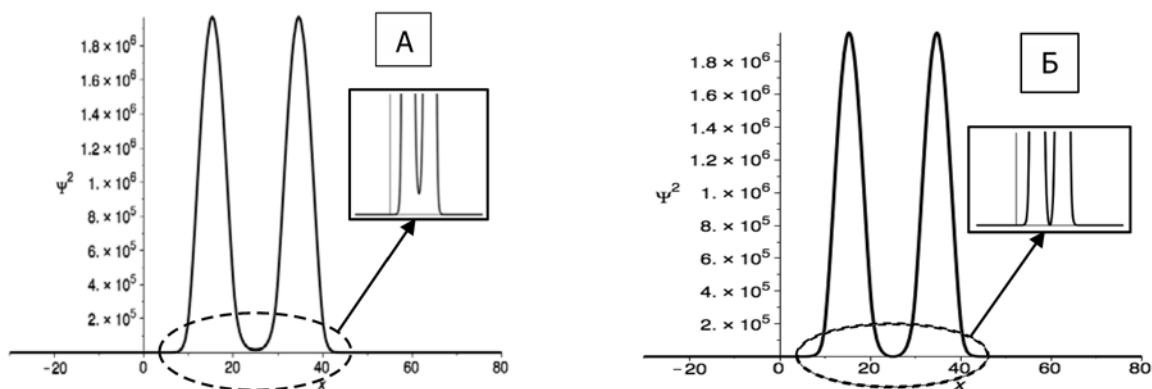


Рис.3. Волновые функции основного (А) и возбужденного (Б) состояний уровня $E=0.2084$ эВ в цепочке из трех барьеров (рис. 2А).

А-четное (основное) состояние, $E=0.2073$ эВ.

Точек смены фаз колебаний нет;

Б-1-ое возбужденное состояние, $E=0.2095$ эВ.

Одна точка смены фаз колебаний;

Точками смены фаз колебаний являются точки, в которых волновая функция обращается в ноль.

Во втором случае, когда $U_1 < E < U_2$, в системе, показанной на рис.1 -2А наблюдаются уровни $E_3=1.28$ эВ, $E_4=1.60$ эВ и $E_5=1.90$ эВ, отсутствующие в системе 2Б. Энергия этих уровней превышает высоту низкого барьера. Их образование происходит при взаимодействии с высокими барьерами. Влиянием низкого барьера при этом можно пренебречь. В ячейках типа рис.1- 2Б на концах располагаются низкие барьеры. Уровни с энергией $E > U_1$ вследствие слабой связи не возникают.

При надбарьерном движении энергия частицы $E > U_2$. Кривая прозрачности для этого случая показана на рис. 2 (область $E > 2$ эВ). Здесь вместо отдельных пиков наблюдаются более широкие полосы, что обусловлено более слабым взаимодействием электрона с барьером. Расчеты прозрачности для симметричной двухбарьерной структуры для случая $E > U_2$ приведены, например, в [4]. Уровень с энергией 2.37 эВ наблюдается как в двух-, так и в трехбарьерной структуре. Он является наиболее близким к барьеру и взаимодействует с ним более сильно. Из рис. 2 следует, что этот пик представляет собой суперпозицию двух уровней с энергиями 2.371 эВ и 2.376 эВ. В случае уровня $E=2.371$ эВ, как следует из [4,6], между соседними высокими барьерами образуется стоячая волна, что говорит о взаимодействии барьеров между собой. Когда $E=2.376$ эВ, между барьерами стоячая волна не образуется, и в промежутке частица движется свободно. Такое движение можно рассматривать как движение над системой невзаимодействующих изолированных барьеров. Это подтверждается также сходством волновых

функций и равенством энергии прозрачности этого уровня и одиночного барьера.

Перестройка резонансных уровней в многобарьерной цепочке

Рассмотрим процесс перестройки РТУ при образовании многозвенной цепочки. Пусть $E < U_2$. Этому условию удовлетворяют уровни с энергией 0.208 эВ, 0.78 эВ, 1.28 эВ, 1.60 эВ и 1.88 эВ. Рассмотрим сначала уровень 0.208 эВ. Расщепление остальных уровней происходит аналогично. Схемы расщепления уровня 0.208 эВ в цепочках типа А и Б приведены на рисунках 4-6. Отметим основные моменты.

1. Увеличение длины цепочки приводит к существенному изменению их энергетического спектра. Прежде всего для расщепления РТУ необходимо, чтобы сформировались соответствующие резонансные звенья. В рассматриваемом случае это звено представляет собой два барьера (высокий и низкий), разделенные потенциальной ямой. Перестройка уровней наблюдается, если связь между ячейками достаточно велика. Для этого необходимо, чтобы эти элементарные ячейки были разделены барьером малой высоты (рис. 1- 2А). В этих структурах происходит расщепление уровней $E=0.2084$ эВ, наблюдающихся в двухбарьерных звеньях (рис. 4 и 5). Два малых барьера, разделенные высоким, взаимодействуют между собой слабо, и расщепление уровня 0.2084 эВ не наблюдается (рис.1-2Б). Поскольку в формировании подобных ячеек участвуют два элементарных звена, расщепление уровня 0.2084 эВ происходит в два раза реже.

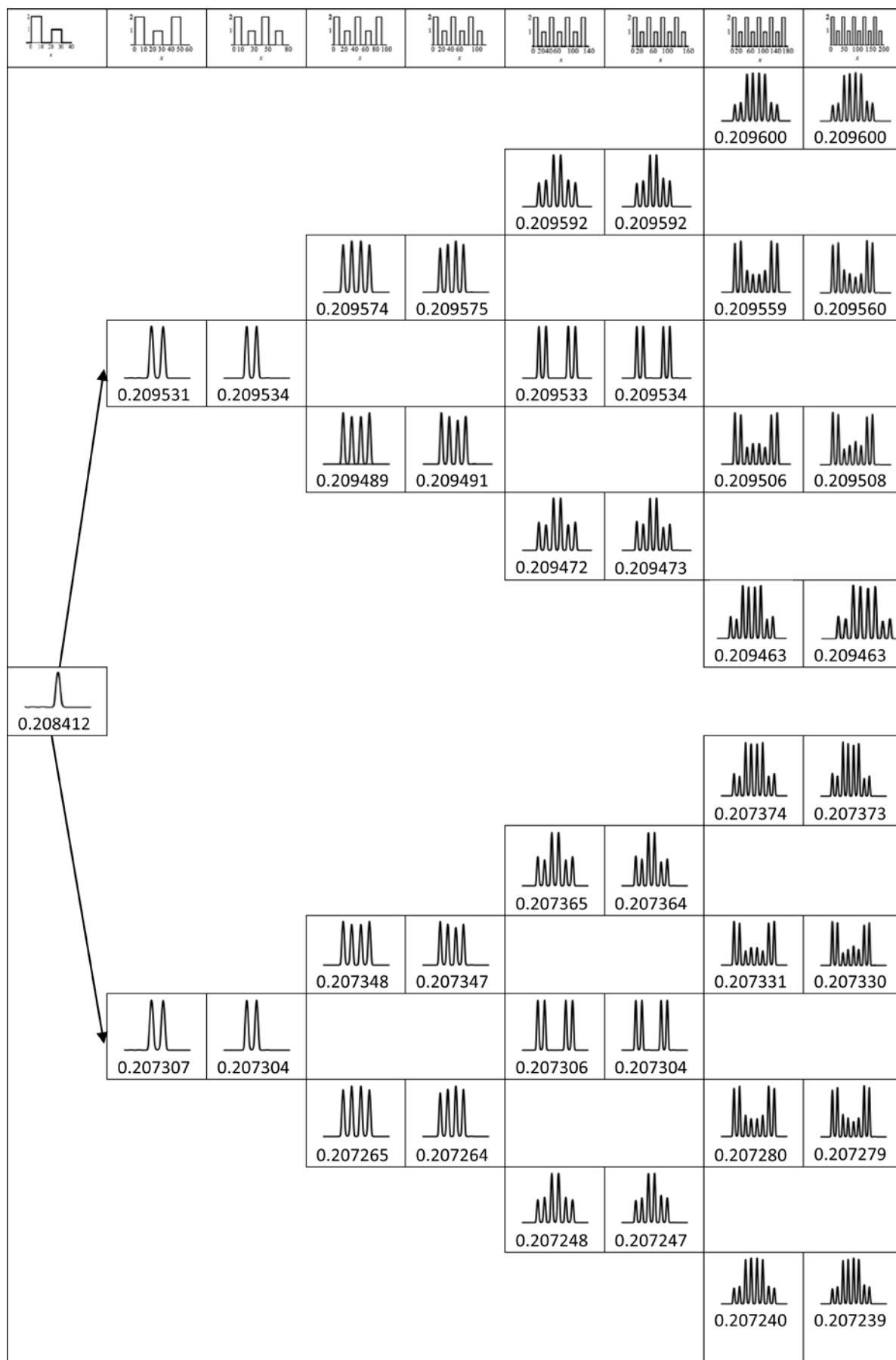


Рис.4. Схема перестройки уровня $E=0.208$ эВ в цепочке в базисом (тип А)

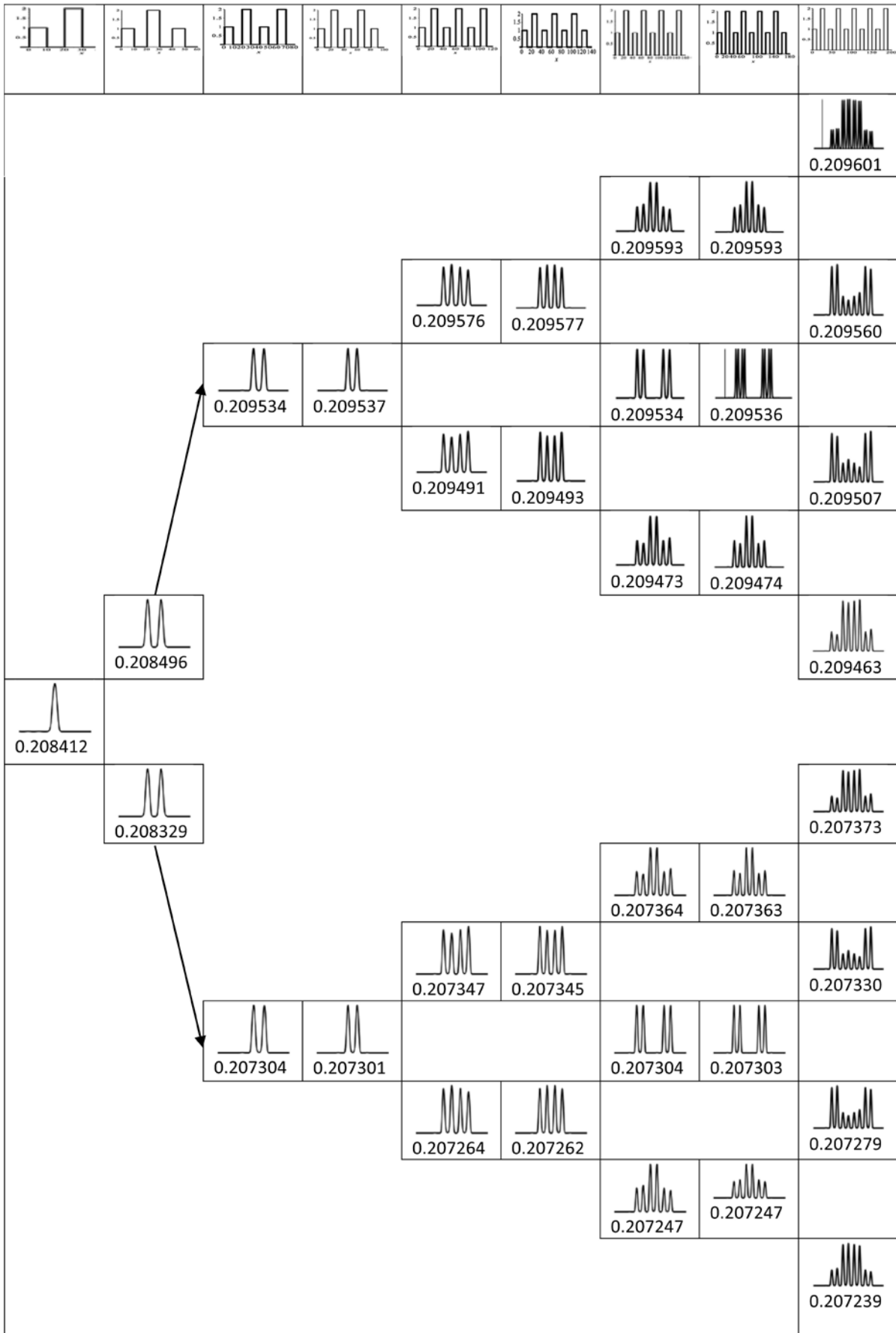


Рис. 5. Схема перестройки уровня $E=0.208$ эВ в цепочке в базисом (тип Б)

2. Низкие потенциальные барьеры при перестройке РТУ играют второстепенную роль. Так низкий барьер, стоящий в конце или в начале цепочки, не влияет на расщепление РТУ (рис. 2.). Перестройка происходит только, когда в конце или в начале цепочки появляется высокий барьер. Поскольку при увеличении длины цепочки происходит чередование высоких и низких барьеров в конце, то и расщепление уровней происходит через один шаг (рис. 4, 5).

3. Понять механизм расщепления РТУ, можно исходя из представлений о смене фаз колебаний, развитых в [4,6,7]. Уровень $E_1=0.2084$ эВ, удовлетворяющий условию $E < U_1$, образуется в звене, состоящем из высокого и низкого барьеров. В этом случае между двумя соседними барьерами укладывается одна полуволна де Бройля. Если к этой структуре добавить третий высокий барьер (структура рис. 1-2А), то вследствие взаимодействия звеньев между собой этот уровень расщепится на два уровня с энергиями 0.207 эВ и 0.209 эВ. Причем нижнему уровню соответствует четное состояние [3,4], а верхнему — нечетное. При этом нижнему состоянию соответствуют колебания в одной фазе (точек смены фазы колебаний в этом случае нет), а в верхнем — в противоположных фазах (имеется одна точка смены фазы) (рис.3). Если к имеющимся ячейкам добавлять новые, результат будет зависеть от вида барьера, стоящего в конце цепочки. При добавлении низкого (рис. 4,5) барьера взаимодействие между ячейками будет слабым и расщепление уровня 0.208 эВ не произойдет. Следующий высокий барьер существенным образом изменяет энергетический спектр структуры и приводит к возникновению новых уровней. При этом уменьшение энергии первого подуровня компенсируется увеличением энергии второго, что обеспечивает выполнение закона сохранения энергии. Следует отметить, что аналогичным образом изменяется частота колебаний и в связанных электрических контурах [10,11].

Рассмотрим, например, систему, состоящую из четырех элементарных звеньев. В каждом из них между барьерами размещается одна полуволна. Соединяться между собой они могут различными способами, образуя комбинации с разным числом точек смены фаз (рис. 6). Это может быть четная (невозбужденная) конфигурация, когда $\Psi^2 > 0$, для всех X (рис. 6А) или возбужденная, когда в отдельных точках $\Psi^2 = 0$. Первому возбужденному состоянию соответствует одна точка смены фаз, второму — две и т.д. Возбужденные состояния в цепочке из четырех звеньев показаны на рис. 6 Б-Г. Здесь наблюдается аналогия с волновыми функциями в потенциальной яме.

В общем случае число точек смены фаз колебаний может изменяться от 0 до максимального значения $N-1$, где N -число звеньев в цепи. Число подуровней при этом будет равно числу элементарных звеньев в цепочке. Подуровень, который соответствует колебаниям, происходящим синфазно, об-

ладает наименьшей энергией. С ростом числа точек смены фаз колебаний энергия подуровней возрастает.

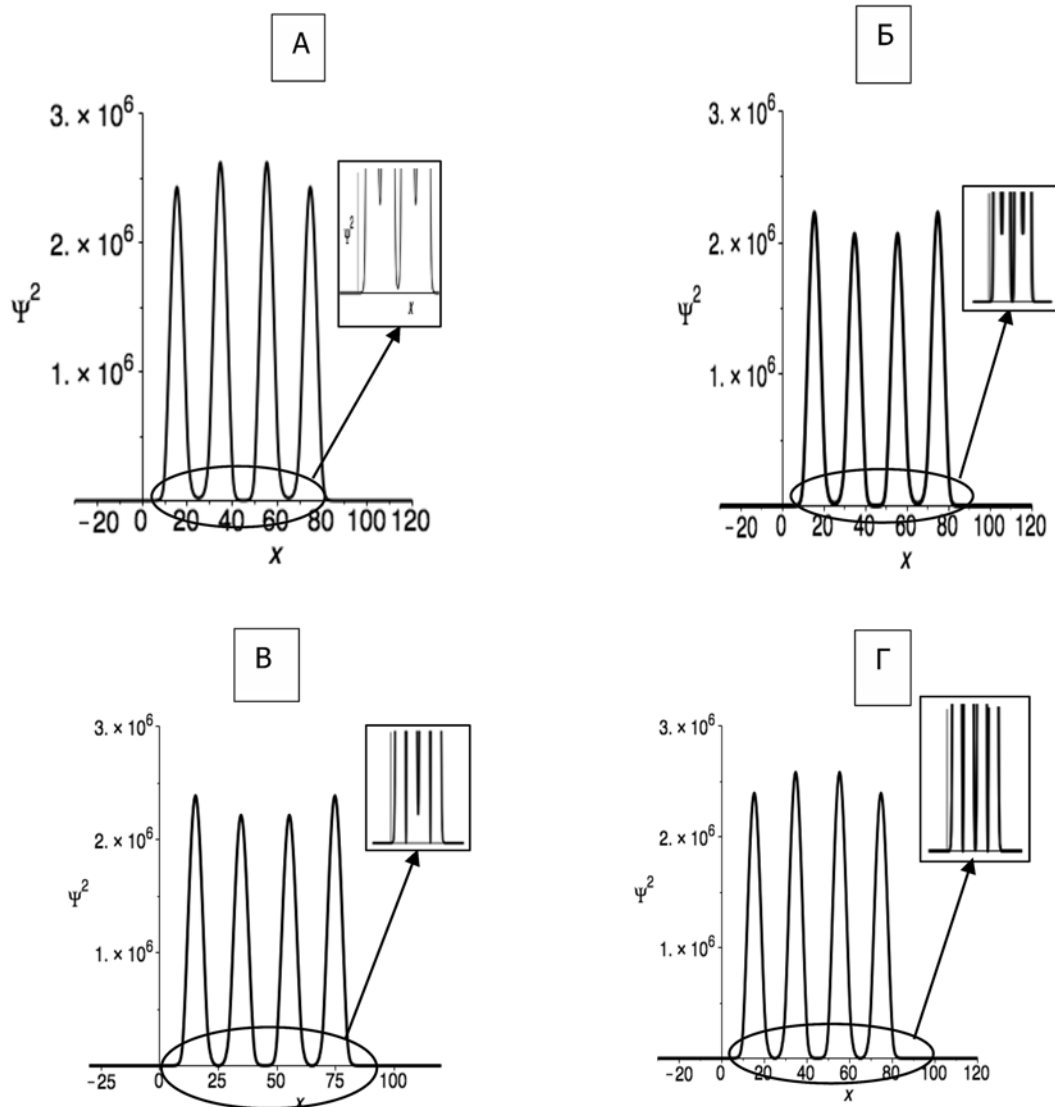


Рис.6. Волновые функции основного (А) и возбужденных (Б-Г) состояний уровня $E=0.208$ эВ в цепочке из четырех элементарных звеньев.

А-четное (основное) состояние, $E=0.207265$ эВ.

Точек смены фаз колебаний нет;

Б-1-ое возбужденное состояние, $E=0.207348$ эВ.

Одна точка смены фаз колебаний;

В- 2-ое возбужденное состояние, $E=0.209489$ эВ.

Две точки смены фаз колебаний;

Г-3-е возбужденное состояние, $E=0.209574$ эВ.

Три точки смены фаз колебаний.

Точками смены фаз колебаний являются точки, в которых волновая функция обращается в ноль.

4. В случае, когда $U_1 < E < U_2$, взаимодействием частицы с низкими барьерами можно пренебречь. Число резонансных ячеек в этом случае оказывается в два раза меньшим, хотя механизм расщепления уровней остается прежним. В силу этого уравнения, описывающие взаимодействие электронов с барьерами остаются неизменными. Схема расщепления уровней в этом случае показана на рис. 7,8.

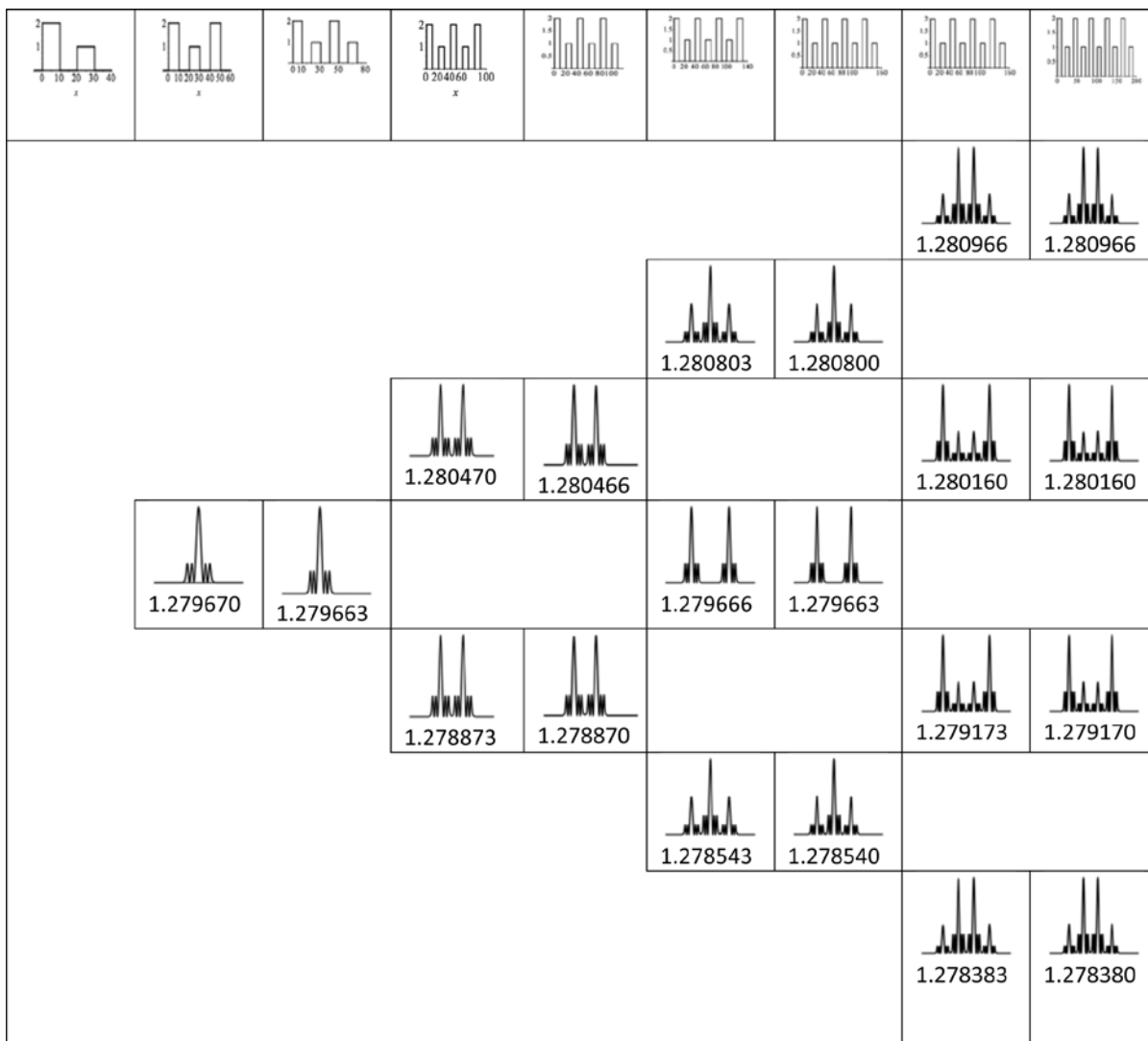


Рис.7. Схема перестройки уровня $E=1.28$ эВ в цепочке в базисом (тип А)

Для описания процесса расщепления уровней необходимо рассмотреть уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi, \text{ где } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U \quad (1)$$

Здесь U — потенциальная энергия взаимодействия электрона с барьером. Так как цепочка состоит из N одинаковых звеньев, то потенциальная

энергия и волновая функция — периодические функции. В соответствии с принципом суперпозиции [12,13] $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$. Здесь C_n — амплитуда вероятности нахождения электрона у n-го атома. Коэффициенты C_n могут быть найдены из соотношения

$$C_n = \int \psi \psi_n^* dx .$$

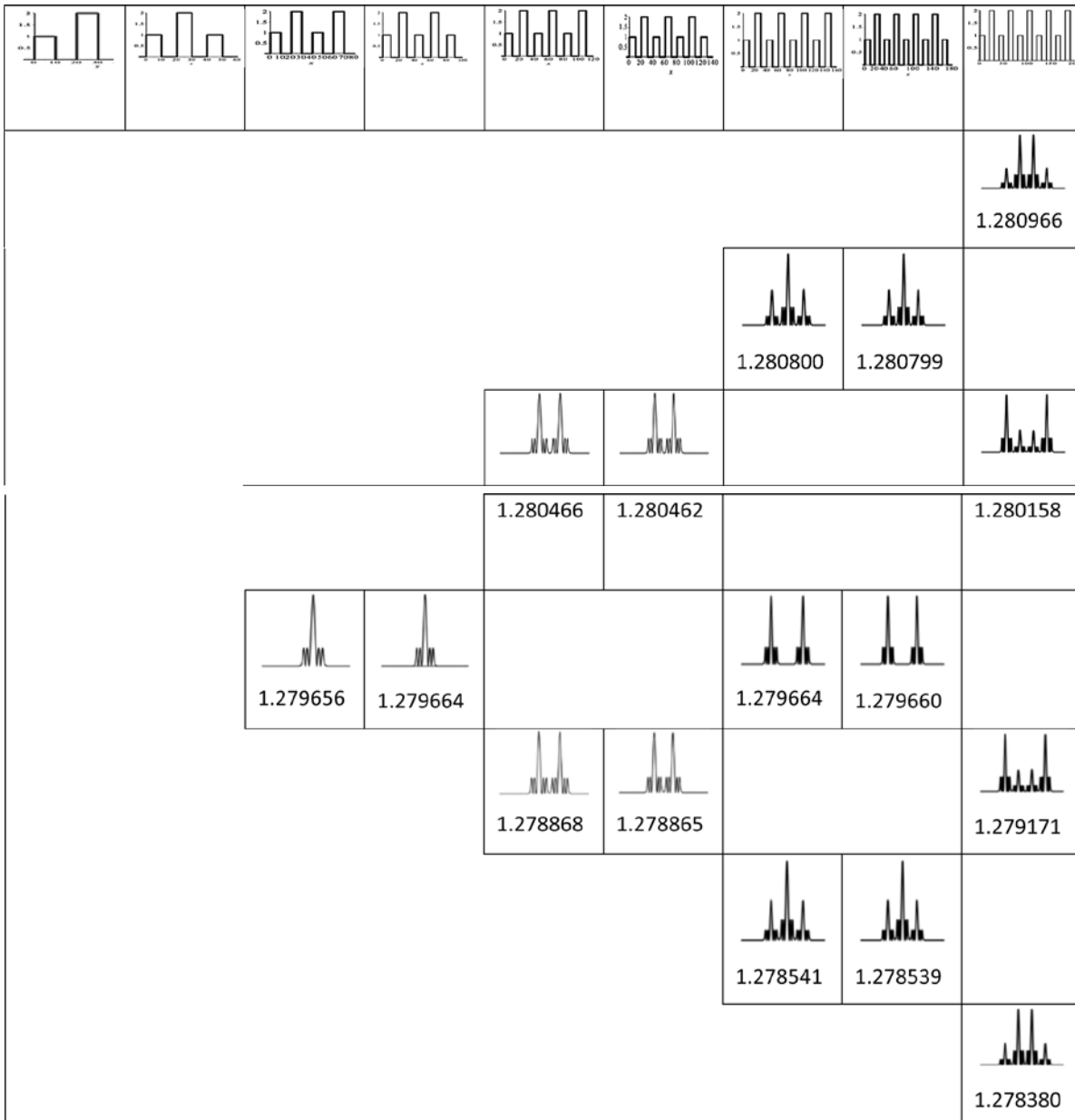


Рис. 8. Схема перестройки уровня $E=1.28$ эВ в цепочке в базисом (тип Б)

С учетом взаимной ортогональности волновых функций и условий нормировки приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = \sum_m H_{mn} C_m, \quad \text{где } H_{mn} = \int \psi_m \hat{H} \psi_n dx, \quad (2)$$

Здесь H_{mm} — энергия системы в состоянии ψ_m , а H_{mn} — матричный элемент, характеризующий вероятность перехода из состояния ψ_m в состояние ψ_n .

Учитывая взаимодействие электрона с ближайшими соседями, получим уравнение

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = H_{n,n-1} C_{n-1} + H_{nn} C_{n-1} + H_{n,n+1} C_{n+1} \quad (3)$$

Коэффициенты $H_{n,n-1}$ и $H_{n,n+1}$, характеризующие вероятность просачивания электрона сквозь барьер будем считать равными друг другу

$$H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -A \quad (4)$$

Допустим, цепочка начинается с высокого барьера (рис. 1-А). В этом случае уравнения Шредингера для низкого и высокого барьеров можно записать следующим образом [12]

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dC_{2n}}{dt} = E_0 C_{2n} - A C_{2n+1} - A C_{2n-1} \\ i\hbar \frac{dC_{2n-1}}{dt} = E_0 C_{2n-1} - A C_{2n-2} - A C_{2n} \end{cases} \quad (5)$$

Учитывая подобие уравнений и сходство механизмов расщепления уровней, рассмотрим только одно уравнение. Поскольку размеры цепочки ограничены, то происходит отражение волн от передней и задней границы и образуется стоячая волна. Поэтому искать решение уравнения (5) следует в виде

$$C_n = \varphi_n \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = u_n (a_n \exp(ikx_n) + b_n \exp(-ikx_n)) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (6)$$

где a_n и b_n — амплитуды прямой и обратной волн. Комплексное число φ_n с дает не зависящую от времени часть амплитуды того, что электрон может быть обнаружен возле n -го барьера.

Если считать, что n -й барьер находится в точке с координатой x_n , а $(n+1)$ -й — в точке с координатой $x_{n+1} = x_n + d$, получим

$$(E - E_0)\varphi(x_n) = -A[\varphi(x_n + d) + \varphi(x_n - d)]. \quad (7)$$

Поскольку размеры цепочки ограничены, то необходимо учесть граничные условия, которые можно записать в виде

$$\Psi(0) = 0 \quad \text{и} \quad \Psi(x_{N+1}) = 0. \quad (8)$$

Учитывая первое граничное условие, после преобразований получим

$$\sin(x_n) \cdot [(E - E_0) + 2A \cdot \cos(kd)] = 0 \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет нетривиальное решение, если $E = E_0 - 2A \cos(kd)$. Из второго граничного условия получим $\sin(k(N+1)d) = 0$. Отсюда

$$k(N + 1)d = \pi m, \quad \text{где } m = 1, 2, \dots, N. \quad (10)$$

$$\text{и } E = E_0 - 2A \cos\left(\frac{\pi m}{N+1}\right) \quad (11)$$

Здесь N - число резонансных ячеек в цепочке которое определяется строением цепочки и связано с энергией электрона. Рассмотрим, например, расщепление уровня $E = 0.2084$ эВ ($E < U_1$). В этом случае во взаимодействии участвуют и высокие и низкие барьеры, которые и необходимо учитывать. Если речь идет о расщеплении уровня $E = 1.28$ эВ, энергия которого превышает высоту низкого барьера, то в расчетах необходимо учитывать только число ячеек между высокими барьерами (их число в два раза меньше). Напомним еще раз, что низкие барьеры, стоящие в начале и в конце цепочки на расщепление уровней влияния не оказывают.

Заключение

В работе рассмотрен процесс перестройки резонансных уровней при образовании линейной цепочки, содержащий базис из барьеров различной высоты.

Показано, что при образовании квантово-размерной структуры элементарные ячейки, взаимодействуя между собой, образуют систему квантовых туннельных подуровней. В трехбарьерной структуре изучена роль коэффициента связи в образовании подуровней. Если связь между ячейками достаточно велика, происходит заметное расщепление уровней. При малой связи расщепление практически не наблюдается. Таким образом характер расщепления существенно зависит от структуры цепочки и энергии частиц. При этом основное влияние оказывают высокие барьеры. Низкие барьеры играют второстепенную роль. Находясь в начале или в конце цепочки они не приводят к образованию дополнительных подуровней.

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность проф. А.П. Жилинскому за постоянный интерес к работе и полезные замечания.

Литература:

1. Демиховский В. Я, Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. //М.: , Логос, 2000, 248 с.
2. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки.// М., Мир, 1989. , 240 с.
3. Силин А.П. Полупроводниковые сверхрешетки.// УФН, 47, (3), с. 485-516.
4. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники. // Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
5. Аладышкин А. Ю. Туннельные явления в нанofизике. //Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
6. Дегтярев В.Ф. Перестройка резонансных туннельных уровней при образовании квантово-размерной цепочки с базисом // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2023, 23, (1), 5-18.
7. Дегтярев В.Ф., Жилинский А.П. Перестройка резонансных уровней прозрачности при образовании квантово-размерной цепочки //Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2023, 22, (1), 5-17.
8. Антонец И. В., Щеглов В. И. Распространение волн через многослойные структуры, ч.1. Монография. //Изд. СыктГУ, Сыктывкар, 2011, 134 с.
9. Антонец И. В., Щеглов В. И. Распространение волн через многослойные структуры, ч.5. Монография.// Изд. СыктГУ, Сыктывкар, 2014, 120 с.
10. Демирчян К.С., Нейман Л.Р., Коровкин Н.В., Чечурин В.Л. Теоретические основы электротехники, т.1. //СПб.: Питер, 2003, 463 с.
11. Стрелков С.П. Введение в теорию колебаний.// СПб: Лань, 2005. 440 с.
12. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике, т. 9, Квантовая механика (II) //М., «Мир», 1967, 259 с.
13. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики, т. 2. //М.:, Наука, 1971, 936 с.

ON THE RECONSTRUCTION OF RESONANT TUNNEL LEVELS IN THE PROCESS OF FORMATION OF A QUANTUM-SIZE CHAIN

V.F. Degtiarev

*Moscow Technical University of Communications and Informatics,
Moscow, Aviamotornaya st., 8a;
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Received 07.10.2024

The mechanism of reconstruction of resonant tunnel levels in the process of formation of a layered quantum-size structure with a basis of two barriers of different heights is investigated. It is established that with an increase in the number of links, these levels are split into close sublevels and the wave function changes. The mechanism of reconstruction of levels in the chain is considered, based on the concepts of phase change of oscillators. The case when the particle energy exceeds the height of the small barrier is considered in detail.

Keywords: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.