

## ТРАНСФОРМАЦИЯ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ СЛОИСТОЙ КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

В.Ф. Дегтярев<sup>1,а</sup>, А.П. Жилинский<sup>1,б</sup>

<sup>1</sup>Московский технический университет связи и информатики,  
Москва, Авиамоторная ул., 8а;  
E-mail: <sup>а</sup>vfsteel2008@jmail.com, <sup>б</sup>zhilinsk@yandex.ru

Поступила 14.12.2020

Установлено, что при образовании цепочки, состоящей из последовательности потенциальных ям и барьеров, возникают резонансные уровни, для которых прозрачность структуры равна единице. С увеличением числа звеньев в цепи происходит расщепление этих уровней на близкие подуровни, энергия и полуширина которых зависит от параметров барьеров и числа ячеек в цепочке. Предложена модель, позволяющая определить характеристики этих уровней, в частности их энергию и полуширину. Исследована зависимость волновой функции от параметров цепочки.

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

УДК 537.9

DOI: 10.31145/2224-8412-2020-21-2-33-48

### Введение

Изучение резонансного туннелирования представляет собой новое, быстро развивающееся направление в наноэлектронике. При этом возникает возможность использования квантовых эффектов для качественно новых технологий. Так в настоящее время полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) и барьерами (КБ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для

опто- и наноэлектроники [1]. Эффект резонансного туннелирования в тонкопленочных гетероструктурах является основой создания целого ряда новых резонансно-туннельных приборов.

Особый интерес представляет резонансное прохождение носителей заряда сквозь периодическую структуру. Исследованию этого вопроса посвящен ряд работ, например [2,3]. В этих работах рассмотрен ряд важных вопросов, связанных с поведением электронов в бесконечных структурах, и основное внимание было уделено вопросам зонной теории, энергетическому спектру электронов в идеальных и неидеальных системах.

Задачи, связанные с распространением волн (электромагнитных, электронных) в слоистых средах, возникают и во многих других разделах науки и техники. В частности, такие среды, как плазма, ионосфера, атмосфера, океан, содержат слоистые структуры. Решение задач о прохождении волн в этих средах, расчет коэффициентов отражения и прохождения при распространении электромагнитных волн имеют большое значение как для расчета радиотрасс с отражением от ионосферы, так и для многих задач дистанционной диагностики ионосферной плазмы [4,5]. Поэтому вопросы, рассмотренные в данной работе, могут представлять интерес и для специалистов этих направлений.

### Методика моделирования

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем непосредственного решения уравнения Шредингера для заданного потенциала с соответствующими граничными условиями в системе компьютерной алгебры MAPLE. Помимо одиночной ямы была рассмотрена цепочка ям и барьеров с параметрами: ширина барьера ( $a$ ) –  $10 \text{ \AA}$ , его высота ( $U$ ) –  $2 \text{ эВ}$ , ширина ямы ( $b$ ) –  $10 \text{ \AA}$ , период ( $d$ ) –  $20 \text{ \AA}$ . Амплитуда падающей волны принималась равной единице ( $\Psi_{in}(x) = e^{ikx}$ ). По зависимости  $T(E)$  ( $T$  – коэффициент прозрачности цепочки) определялось положение максимума пика ( $E_0$ ), его энергетическая ширина  $\Delta E_{05}$  на половине его высоты и добротность ( $Q = \frac{E_0}{\Delta E_{05}}$ ). Так как добротность выражается через  $E_0$  и  $\Delta E_{05}$ , то основное внимание уделялось именно этим характеристикам. Подчеркнем, что результаты, полученные на данном примере, а также развитая методика, относятся и к цепочкам с другими параметрами.

### Резонансно-туннельные уровни (РТУ) в одиночном звене.

Результаты расчета энергетического спектра и волновых функций в элементарной ячейке, состоящей из ямы и двух барьеров, приведены в данном разделе (рис. 1). Рассмотрен случай, когда энергия частицы меньше высоты барьера. Резонансные уровни и волновые функции для этого случая приведены на рис. 1.

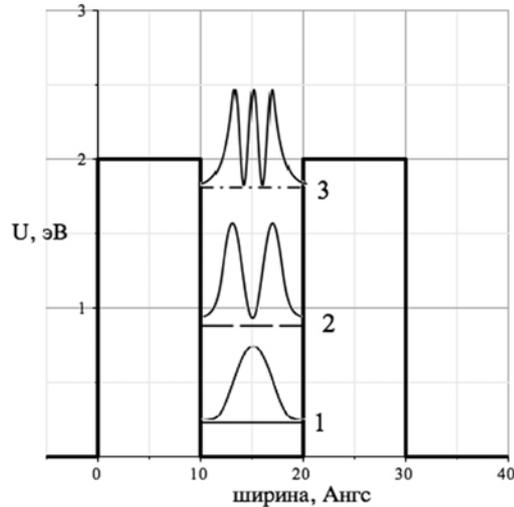


Рис. 1. Схема элементарного звена цепочки и волновые функции в случае: 1 – на ширине ямы укладывается одна полуволна, 2 – две полуволны, 3 – три полуволны.

Основные результаты расчетов перечислены ниже.

1. В одиночном звене, также как и в потенциальной яме конечной глубины (толщина барьера при этом считается бесконечно большой) при  $E < U$  образуется система резонансно-туннельных уровней (РТУ) [6,7], положение которых определяется условием  $b = n \frac{\lambda}{2}$ , где  $b$  – ширина ямы,  $\lambda$  – длина волны для энергии частицы  $E$ ,  $n = 1, 2, \dots$  – число полуволн, укладываемых на ширине ямы (рис.1 (кривые 1, 2, 3)). Прозрачность цепочки для частиц с такой энергией равна единице.

2. В элементарном звене рассматриваемой структуры число таких уровней равно 3 (рис. 1). Их энергетическое положение следующее:  $E_{01} = 0.228949$  эВ,  $E_{02} = 0.887202$  эВ и  $E_{03} = 1.818140$  эВ. Энергия этих пиков соответствует положению энергетических уровней в яме такой же глубины. Это легко понять, если учесть, что оба типа пиков соответствуют условию, что на ширине ямы уместается одинаковое число полуволн.

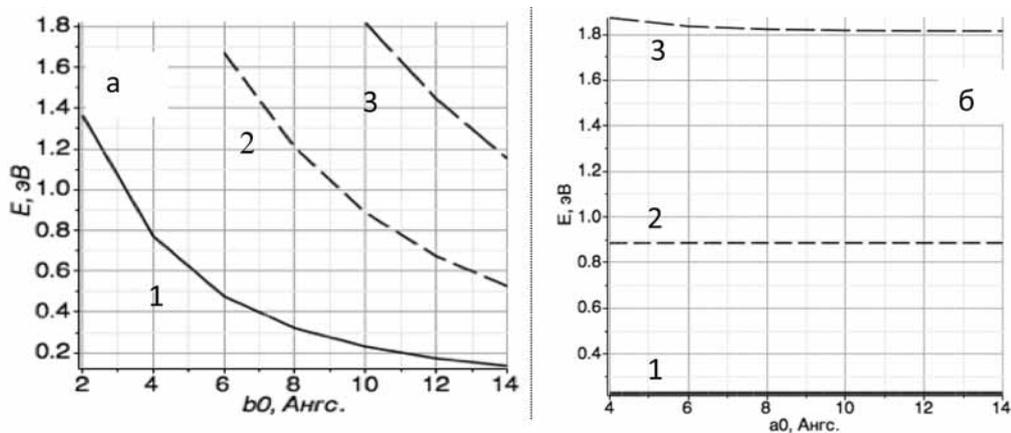


Рис. 2. Зависимость энергии РТУ от ширины ямы (а) и от ширины барьера (б). Значения энергии РТУ в одиночной ячейке ( $a_0=10$  Ангстрем и  $b_0=10$  Ангстрем): 1 –  $E_{01} = 0.228949$  эВ, 2 –  $E_{02} = 0.887202$  эВ, 3 –  $E_{03} = 1.818140$  эВ.

3. Энергетическое положение пиков зависит от ширины и глубины ямы. С ростом ширины ямы энергия РТУ уменьшается, поскольку при этом увеличивается необходимая длина волны, что возможно только при уменьшении энергии частицы (рис. 2а). При постоянной ширине ямы положение резонансных пиков практически не зависит от ширины потенциального барьера, разделяющего звенья (рис. 2б).

### Расщепление резонансных уровней на подуровни при увеличении числа звеньев

С увеличением числа звеньев в цепи резонансные уровни расщепляются на подуровни, число которых равно числу звеньев в системе (числу степеней свободы). Максимальная прозрачность каждого из подуровней равна единице. Схема расщепления уровней в цепочке, состоящей из  $N=11$  звеньев приведена на рис. 3. Такое поведение РТУ представляется вполне естественным, если считать систему до образования цепочки  $N$  кратно вырожденной [6,7]. Образование цепочки приводит к снятию вырождения и возникновению подуровней. Каждый из подуровней характеризуется своей энергией и шириной на половине высоты. Один из пиков показан на рис. 4. Как видно из рисунка, форма пиков соответствует лоренцевой и определяется механизмом рассеяния частиц в цепочке. Отметим также симметричный характер расположения пиков относительно центрального, что обеспечивает выполнение закона сохранения энергии при образовании цепочки.

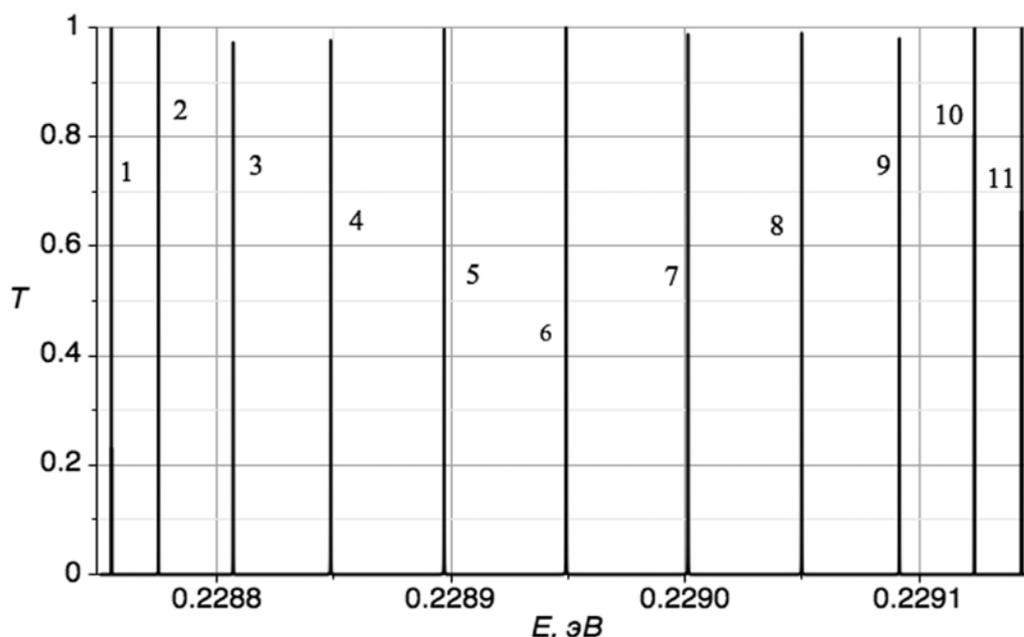


Рис. 3. Схема расщепления уровня  $E_{01}=0.228949$  эВ в цепочке, состоящей из 11 звеньев.

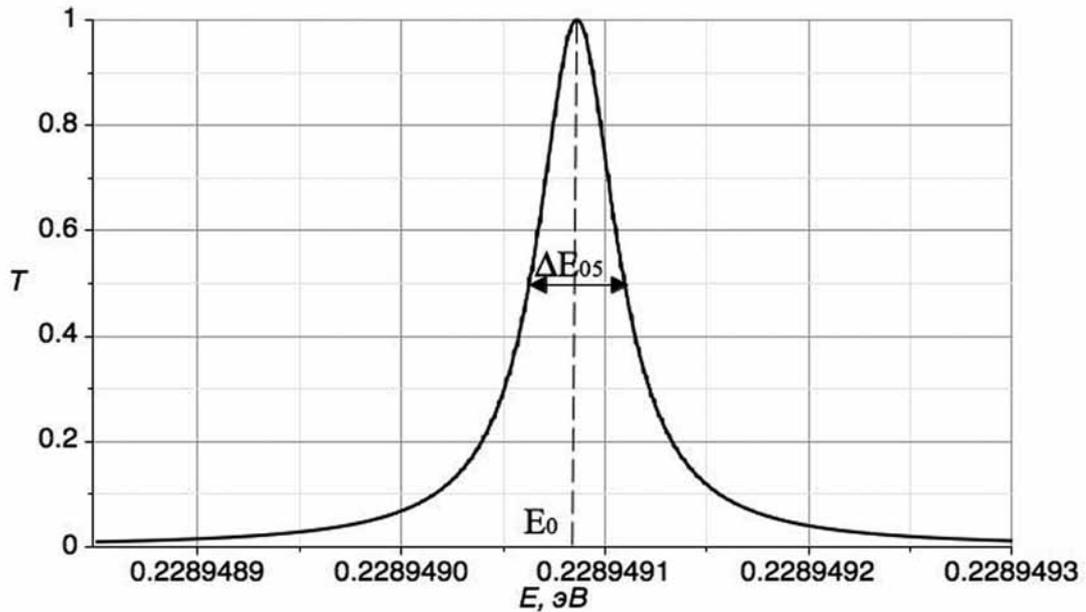


Рис. 4. Зависимость прозрачности резонансного пика  $E_{01}=0.228949$  эВ от энергии микрочастицы.

Чтобы понять основные особенности распространения электронных волн в цепочке барьеров, рассмотрим собственные колебания электронов в одномерной цепочке потенциальных ям и барьеров. Будем считать, что высота барьера больше энергии электрона ( $E < U$ ). Заметим здесь, что в дальнейшем форма барьера (прямоугольная или другая) нигде не учитывается. Поэтому приведенные в дальнейшем оценки и расчеты должны быть справедливы для барьеров любой формы. Форма барьера может быть существенна только при расчетах интегралов перекрытия.

Движение электрона в цепочке описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}\Psi, \text{ где } \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} * \frac{d^2}{dx^2} + U. \quad (1)$$

$U$  – потенциальная энергия взаимодействия электрона с барьером. Так как цепочка состоит из  $N$  одинаковых звеньев, то  $U$  и  $\Psi$ - периодические функции. В соответствии с принципом суперпозиции [5,6]  $\Psi = \sum C_n \Psi_n$ . Поскольку размеры цепочки ограничены, то необходимо учесть граничные условия, которые можно записать в виде:

$$\Psi(0) = 0 \text{ и } \Psi(x_{N+1}) = 0 \quad (2)$$

Естественно, что получить таким образом точное решение уравнения Шредингера без информации о виде потенциальной энергии взаимодействия, не удастся. Однако, некоторые выводы о можно получить и без точного знания зависимости  $U(x)$ .

В качестве базисных состояний выберем состояния, когда электрон находится в ячейке с номером  $n$ . Учитывая взаимодействие электрона только с ближайшими соседями, получим [8].

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_{n-1}}{\partial t} &= H_{n-1,n-2} C_{n-2} + H_{n-1,n-1} C_{n-1} + H_{n-1,n} C_n \\ i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} &= H_{n,n-1} C_{n-1} + H_{n,n} C_n + H_{n,n+1} C_{n+1} \\ i\hbar \frac{\partial C_{n+1}}{\partial t} &= H_{n+1,n} C_n + H_{n+1,n+1} C_{n+1} + H_{n+1,n+2} C_{n+2} \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $H_{n,m} = \int \Psi_n^* \mathcal{H} \Psi_m dx$ ,  $H_{n,n}$  – энергия электрона в  $n$ -ой ячейке,  $H_{n,n-1}$  и  $H_{n,n+1}$  – амплитуды перехода электрона к ближайшим соседям.

Пусть  $H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -A$ . Тогда уравнение, описывающее поведение электрона в  $n$ -ой ячейке принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = E_0 C_n - A C_{n-1} - A C_{n+1} \quad (4)$$

Поскольку размеры цепочки ограничены, то происходит отражение волн от передней и задней границы. Поэтому искать решение уравнения (4) следует в виде

$$C_n = \psi(x_n) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = (\alpha \exp(ikx_n) + \beta \exp(-ikx_n)) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) \quad (5)$$

Величина  $\psi(x_n)$  представляет независящую от времени часть амплитуды того, что электрон может быть обнаружен в  $n$ -ой ячейке. При этом первое слагаемое представляет собой прямую волну, а второе – отраженную. Значения коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta$  определяются из граничных условий.

Если считать, что  $n$ -я ячейка имеет координату  $x_n$ ,  $(n+1)$ -я –  $x_{n+1}$ , то  $\psi(x_{n+1}) = \psi(x_n + d)$  и  $\psi(x_{n-1}) = \psi(x_n - d)$ . Учитывая периодичность потенциала  $U(x)$ , можно записать  $x_{n+1} = x_n + d$ , а  $x_{n-1} = x_n - d$ . Подставляя выражение для  $C_n$  в (4), получим

$$C_n (E - E_0 + A \exp(ikd) + A \exp(-ikd)) = 0 \quad (6)$$

Приравниваем каждый из сомножителей (6) к нулю. Рассмотрим второй сомножитель, из которого получаем

$$E = E_0 - A e^{ikd} - A e^{-ikd} \text{ или } E = E_0 - 2A \cos(kd) \quad (7)$$

Это соотношение дает связь между энергией электрона и его волновым

числом (дисперсионное уравнение). Величина  $A = \int \Psi_n^* H_{mn} \Psi_m dx$  представляет собой интеграл перекрытия.  $E_0$  – энергия электрона в изолированном звене цепочки. Соотношение (7) позволяет оценить ширину разрешенной зоны  $\Delta E_m$  для уровня с номером  $m$  ( $m$ -число полувольт, укладываемых на ширине ямы), а также величину запрещенной зоны  $\Delta E_{gm}$  между соседними разрешенными зонами

$$\Delta E_m = 4A_m \quad (8)$$

$$\text{и } \Delta E_{gm} = (E_{0m} - E_{0(m-1)}) - 2(A_m - A_{m-1}) \quad (9)$$

Значение интеграла перекрытия можно найти, например, из данных по расщеплению исходных уровней на подуровни при росте числа звеньев. Следует отметить, что вид дисперсионного уравнения определяется только внутренней структурой цепочки, не зависит от граничных условий, типа элементов цепи и пр. [9].

Перейдем к рассмотрению первого сомножителя ( $C_n$ ). С учетом граничных условий получаем

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 0 \\ \alpha \exp(ik(N+1)d) + \beta \exp(-ik(N+1)d) &= 0 \end{aligned}$$

Отсюда

$$\exp(ik(N+1)d) - \exp(-ik(N+1)d) = 0 \text{ или } \sin(k(N+1)d) = 0 \quad (10)$$

Существует  $N$  возможных решений, соответствующих определенной моде  $m$ , где  $m=1, 2, \dots, N$ . Этим модам соответствуют значения

$$k = \frac{\pi m}{(N+1)d} \quad (11)$$

В цепочке, таким образом, существуют только такие моды, у которых на длине цепочки укладывается целое число полувольт.

Учитывая (7), можно получить выражение для энергии подуровней в цепочке в следующем виде:

$$E_m = E_0 - 2A * \cos\left(\frac{\pi m}{N+1}\right), \text{ где } m=1, 2, \dots, N \quad (12)$$

Полученная формула позволяет рассчитать энергии подуровней, образовавшихся при расщеплении исходного резонансного уровня при увеличении числа звеньев цепи.

Поскольку в ограниченной цепочке существует как прямая, так и отраженная волна, то их наложение дает стоячую волну.

Вероятность найти частицу в ячейке с номером  $n$ , если положить  $x_n = nd$  может быть найдена из соотношения

$$\Psi^2 = \alpha^2 * \sin^2\left(\frac{\pi mn}{N+1}\right) \quad (13)$$

Здесь  $N$  – число звеньев в цепочке;  $m$  – номер моды;  $n$  – номер ячейки.

Проведенное рассмотрение приводит к зонному характеру распределения состояний по энергии и позволяет найти энергетический спектр частиц в зависимости от количества звеньев в цепи, а также распределение вероятности обнаружения частиц в зависимости от номера ячейки. Сравним результаты расчета расщепления уровней, полученные по рассмотренной модели и путем решения уравнения Шредингера в системе MAPLE. В первом случае расчет проводился по формуле (12) для уровней  $m = 1, 2, 3$ , где  $m$  – число полувольт, укладываемых на ширине ямы. Схема расщепления уровней в соответствии с (12) приведена на рис. 5, а результаты расчета двумя способами приведены в таблице 1. Совпадение полученных данных говорит об адекватности использованной модели. Полученные при этом значения параметров  $A$  ( $A_1=0.0001008$  эВ;  $A_2=0.0011926$  эВ;  $A_3= 0.0168477$  эВ) также представляются разумными.

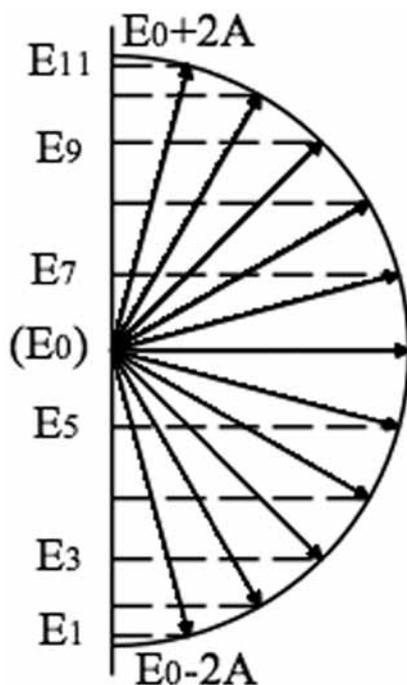


Рис. 5. Схема расщепления РТУ на подуровни согласно (12).

Из вышеприведенного рассмотрения вытекает, что при формировании цепочки образуется своеобразная зонная структура. Схема соответствующей зонной структуры показана на рис. 6. Эта структура подобна зонам, образующимся в соответствии с моделью Кронига-Пенни.

**Таблица 1.** Сопоставление расчетов энергии расщепившихся резонансных туннельных уровней по формуле (12) и в соответствии с результатами компьютерного моделирования для системы из 11 звеньев.

№ моды	Число полувольт, укладываемых на ширине ямы в одиночном звене (m)					
	m = 1		m = 2		m = 3	
	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ
1	0.2287544	0.2287548	0.8848981	0.8848990	1.7855928	1.7859004
2	0.2287745	0.2287749	0.8851364	0.8851357	1.7889590	1.7889568
3	0.2288065	0.2288068	0.8855154	0.8855131	1.7943138	1.7939338
4	0.2288483	0.2288485	0.8860094	0.8860059	1.8012923	1.8006532
5	0.2288969	0.2288970	0.8865846	0.8865816	1.8094190	1.8088450
6	0.2289491	0.2289490	0.8872020	0.8872013	1.8181400	1.8181402
7	0.2290013	0.2290012	0.8878193	0.8878233	1.8268609	1.8280474
8	0.2290498	0.2290498	0.8883945	0.8884047	1.8349876	1.8379366
9	0.2290916	0.2290915	0.8888885	0.8889056	1.8419662	1.8470320
10	0.2291236	0.2291235	0.8892676	0.8892901	1.8473210	1.8544606
11	0.2291438	0.2291437	0.8895058	0.8895334	1.8506871	1.8593638

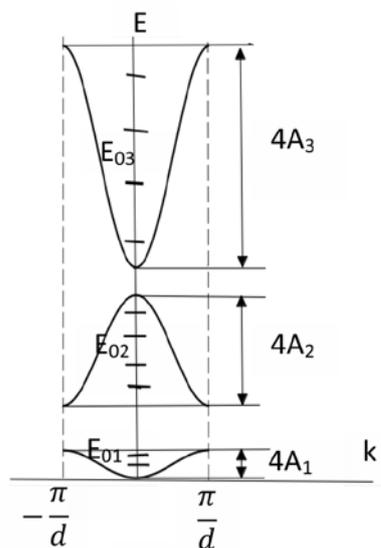


Рис. 6. Схема зонной структуры, возникающей при образовании цепочки барьеров.

В силу периодичности  $\cos(x)$  физический смысл имеют только значения  $-\frac{\pi}{d} \leq k \leq \frac{\pi}{d}$  (в этих точках происходит брегговское рассеяние). Центрами зарождения зон являются резонансно-туннельные уровни (РТУ), энергетическое положение которых определяется числом полувольт, укладываемых на ширине ямы. На схеме они обозначены как  $E_{01}$ ,  $E_{02}$  и  $E_{03}$ . В одиночных звеньях эти состояния вырождены. При увеличении числа звеньев вырождение снимается и эти уровни расщепляются на подуровни, количество кото-

рых равно числу звеньев цепи. Энергия подуровней определяется формулой (12). Эти значения энергии лежат в пределах зоны шириной  $4A_m$ . Ширина разрешенной зоны определяется выражением (8). Из (8) вытекает, что ширина разрешенной зоны увеличивается с ростом энергии электронов и определяется внутренней структурой звена (параметрами барьера и ямы, взаимодействием электрона с преградой), но не зависит от числа ячеек в цепочке. С ростом числа звеньев расстояние между подуровнями уменьшается. В зависимости от соотношения между энергией РТУ ( $E_{01}$ ,  $E_{02}$  и  $E_{03}$ ) и значениями  $A_m$  могут образовываться запрещенные зоны, разрешенные зоны могут быть отдельными, а могут и перекрываться.

Отметим, что амплитуда того, что электрон находится вблизи какого-либо определенного атома определяется выражением  $C_n \sim \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$ . Отсюда вытекает, что вероятность обнаружить частицу возле любого атома не зависит от координаты и времени. Это означает, что в периодическом поле бесконечно длинной цепочки электрон при своем движении не испытывает никакого сопротивления. Заметим также, что проведенный расчет и полученные результаты не зависят от вида барьера, препятствующего движению частицы.

### **О волновых функциях электрона в слоистой квантово-размерной структуре.**

Полученные результаты показывают, что волновая функция в цепочке из  $N$  звеньев представляет собой стоячую волну, образованную наложением прямой и отраженной волн.

При этом наблюдается определенная аналогия между колебаниями грузиков, связанных пружинками, и колебаниями осцилляторов в потенциальных ямах. В обоих случаях колебания происходят с определенными частотами, обусловленными структурой колебательной системы. При образовании цепочки происходит расщепление исходных РТУ, наблюдавшихся в одиночном звене, на систему подуровней. Каждому такому подуровню соответствует определенная мода колебаний всей цепочки. При этом первому РТУ соответствует первая мода с энергией 0.2287548 эВ. Схема расщепления и перечень энергий мод приведен в таблице 1. Графики волновых функций для цепочки из 11 звеньев показаны на рис.7. Отметим основные особенности волновых функций.

1. Каждому расщепленному подуровню соответствует своя мода колебаний. Состоянию с наименьшей энергией соответствует первая мода и т.д. При этом для первого типа колебаний на длине цепочки укладывается одна полуволна, для второго – две и т.д. Число мод равно числу звеньев в цепочке. Так как все эти пики порождены одним и тем же исходным уровнем (когда в яме размещалась только одна полуволна), то и в цепочке в яме размещается тоже только одна полуволна (рис. 7).

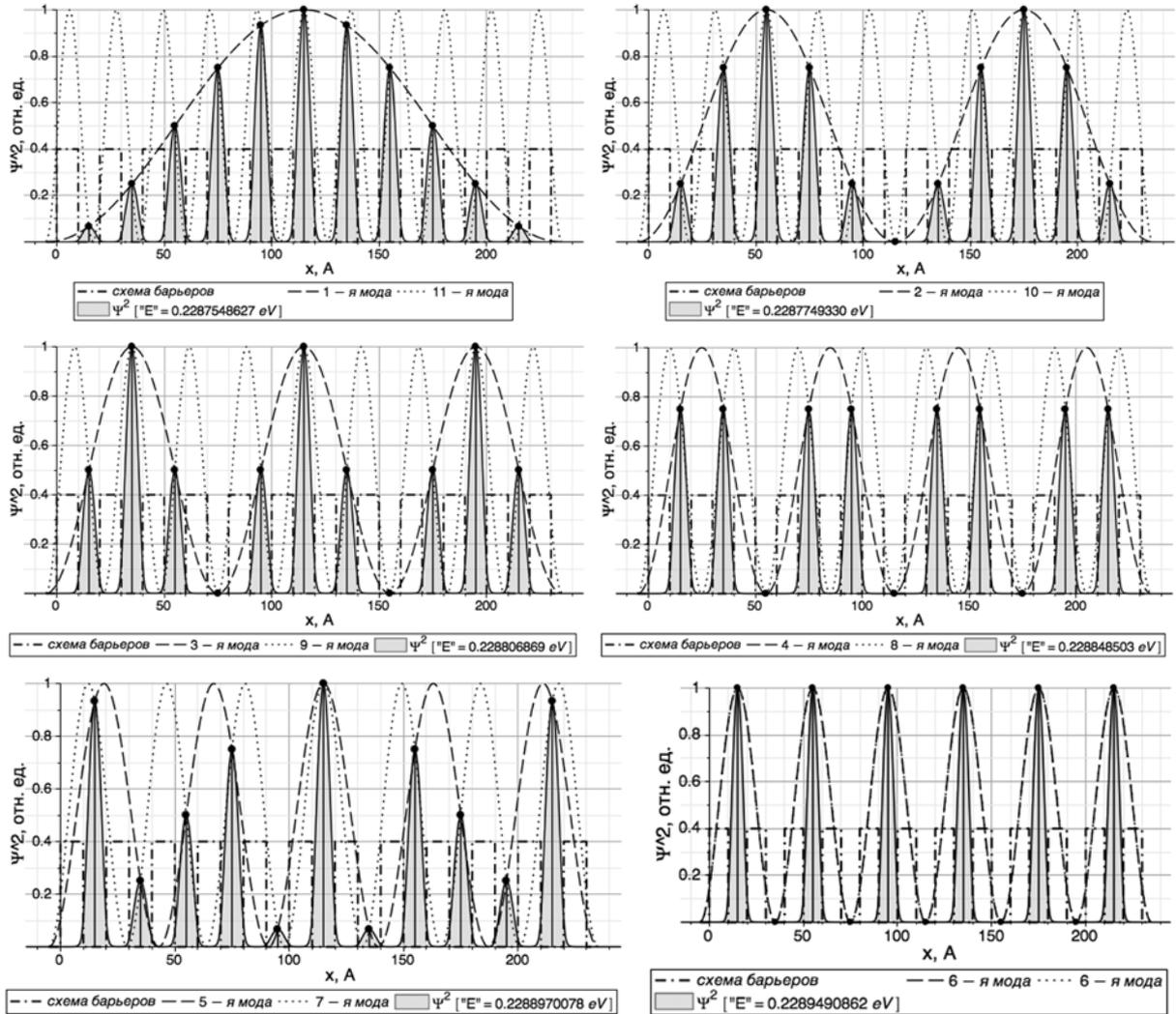


Рис. 7. Волновые функции цепочки из 11 звеньев (сплошная кривая с заливкой) для различных мод колебаний. Штриховая кривая –  $m$ -я мода, точечная кривая  $N - m$ -я мода. Эти кривые являются огибающими для  $\Psi^2(x)$ . Точки – расчет по формуле (13). Штрих-пунктирная кривая – схема барьеров.

2. Обращает на себя внимание симметричный вид волновых функций относительно середины цепочки. Именно такой вид волновой функции обеспечивает, по нашему мнению, равенство потоков частиц слева направо и справа налево, что и приводит к высокой прозрачности цепочки.

3. Следует отметить, что волновые функции  $m$ -ой и  $(N-m)$ -ой мод имеют совершенно одинаковый вид. Эта особенность вытекает из (13), согласно которому для цепочки из  $N$  звеньев  $\Psi_m^2(x) = \Psi_{N-m}^2(x)$  для одинаковых значений координаты, т.е. огибающие в соответствующих точках цепочки для  $m$ -ой и  $(N-m)$ -ой мод совпадают.

4. Максимальное значение  $\Psi^2$  определяется соотношением (13). Из этого соотношения видно, что максимумы  $\Psi^2$  располагаются в точках пересечения  $m$ -ой и  $(N-m)$ -ой мод (см. рис.7а). Отсюда понятно, что амплитуда стоячей волны (13) является огибающей для зависимости  $\Psi^2(x)$ . Такой подход по-

звонит понять, почему в некоторых ячейках  $\Psi^2(x)=0$ . Оказывается, что в этих ячейках амплитуда стоячей волны равна нулю и соответствующие колебания не возбуждаются.

Аналогичные заключения могут быть сделаны и относительно других РТУ, возникающих в одиночной ячейке.

### Туннельное уширение резонансных уровней

Рассмотрим теперь вопрос о ширине резонансных пиков (см. рис. 4) [9-11]. Полагая, что пики имеют лоренцеву форму, можно прийти к заключению, что ширина линии определяется прежде всего временем пребывания частицы в цепочке. Чем больше это время, тем уже линия. В нашем случае основную роль играют следующие факторы: число столкновений в единицу времени с потенциальным барьером, прозрачность этого барьера, вероятность нахождения частицы в ячейке. На рис. 8 приведена зависимость ширины РТУ от толщины потенциального барьера, разделяющего ячейки. Из рисунка видно, что во всех трех случаях эта зависимость носит экспоненциальный характер. Такой характер кривой свидетельствует в пользу туннельного механизма движения частицы, поскольку прозрачность барьера экспоненциально уменьшается с ростом его толщины. Рассмотрим сначала цепочку, состоящую лишь из одного звена. Ширину пика РТУ ( $\Delta E_1$ ) в этом случае можно оценить, используя соотношение неопределенностей:

$$\Delta E_1 = \frac{h}{\tau_1} \quad (14),$$

где  $\tau_1$  – время пребывания частицы в одиночном звене;  $h$  – постоянная Планка. Зная величину  $\Delta E_1$  (хотя бы из результатов моделирования), из соотношения (14) можно определить  $\tau_1$ .

С учетом возникновения в ячейке квазистоячей волны

$$\tau_1 = \tau_0 * \Psi_1^2, \quad (15)$$

Здесь  $\Psi_1^2$  – квадрат модуля волновой функции частицы в одиночном звене,  $\tau_0 = \frac{1}{\nu_0}$ , где  $\nu_0$  – частота перехода частиц из данного звена в соседнее. К сожалению, величина  $\nu_0$  не известна с достаточной точностью и поэтому использовать её можно только для оценок по порядку величины. Более точным представляется эмпирический подход, использующий данные о волновой функции и ширине РТУ в одиночном звене.

В цепочке, состоящей из  $N$  звеньев, полуширину РТУ, соответствующего  $m$ -ой моде, можно определить следующим образом:

$$\Delta E_m = \frac{h}{\tau_m} = \frac{h}{\tau_0 \sum_{n=1}^N \Psi_{nm}^2} \quad (16)$$

Здесь  $\Psi_{nm}^2$  – волновая функция электрона в n-ом звене цепочки, состоящей из N ячеек (учитывает вероятность нахождения электрона в данной ячейке при m-ой моде).  $\tau_m = \tau_0 \sum \Psi_{nm}^2$  – полное время пребывания электрона в цепочке (для m-ой моды);

Величина  $\tau_0$  может быть определена из (14) и (15). В результате простых преобразований получаем  $\tau_0 = \frac{h}{\Delta E_1 \Psi_1^2}$

$$\text{И тогда } \Delta E_m = \Delta E_1 \cdot \frac{\Psi_1^2}{\sum_{n=1}^N \Psi_{nm}^2} \quad (17)$$

Здесь  $\Delta E_m$  – полуширина расщепленного пика, соответствующего m-ой моде колебаний в цепочке из N звеньев;

$\Delta E_1$  – ширина резонансного уровня в одиночном звене;

$\sum_{k=1}^N \Psi_{nm}^2$  – волновая функция электрона, соответствующая m-ой моде колебаний, в цепочке из N звеньев (например, рис. 7).

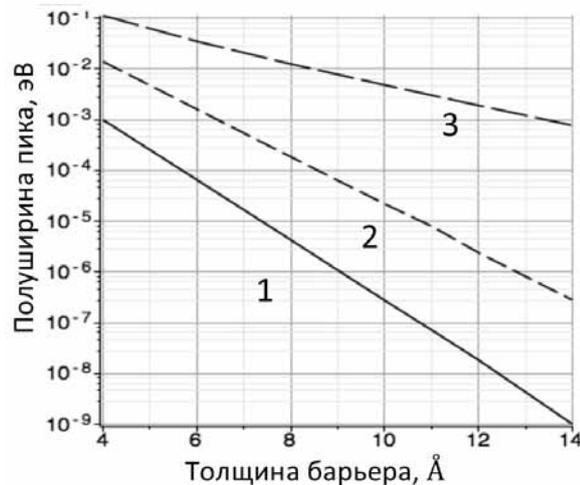


Рис. 8. Зависимость полуширины резонансных пиков от толщины барьера, разделяющего ячейки: 1 – на ширине ямы укладывается одна полуволна; 2 – две полуволны; 3 – три полуволны.

Результаты, приведенные в таблице 2, показывают, что значения ширины пиков, рассчитанные двумя методами достаточно хорошо совпадают между собой. Наибольшее расхождение наблюдается в случае, когда на ширине ямы укладывается три полуволны ( $E_{03} = 1.818140$  эВ). Такое различие может быть связано с тем, что энергия  $E_{03}$  близка к высоте барьера  $U$ .

**Таблица 2.** Полуширина резонансно-туннельных уровней в цепочке

Число ячеек	№ моды	Число полувольт, укладываемых на ширине ямы в одиночном звене (m)								
		m=1			m=2			m=3		
		Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$	Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$	Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$
1	1	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$
11	1	0.228754	$3.20 \cdot 10^{-9}$	$3.15 \cdot 10^{-9}$	0.884899	$2.40 \cdot 10^{-7}$	$2.37 \cdot 10^{-7}$	1.785904	$4.5 \cdot 10^{-5}$	$4.48 \cdot 10^{-5}$
	2	0.228774	$1.11 \cdot 10^{-8}$	$1.17 \cdot 10^{-8}$	0.885136	$8.40 \cdot 10^{-7}$	$8.92 \cdot 10^{-7}$	1.788957	$1.53 \cdot 10^{-4}$	$1.64 \cdot 10^{-4}$
	3	0.228806	$2.30 \cdot 10^{-8}$	$2.33 \cdot 10^{-8}$	0.885513	$1.80 \cdot 10^{-6}$	$1.78 \cdot 10^{-6}$	1.793934	$3.15 \cdot 10^{-4}$	$3.37 \cdot 10^{-4}$
	4	0.228848	$3.49 \cdot 10^{-8}$	$3.50 \cdot 10^{-8}$	0.886006	$2.64 \cdot 10^{-6}$	$2.67 \cdot 10^{-6}$	1.800653	$5.04 \cdot 10^{-4}$	$5.27 \cdot 10^{-4}$
	5	0.228897	$4.38 \cdot 10^{-8}$	$4.40 \cdot 10^{-8}$	0.886581	$3.36 \cdot 10^{-6}$	$3.33 \cdot 10^{-6}$	1.808845	$6.84 \cdot 10^{-4}$	$7.03 \cdot 10^{-4}$
	6	0.228949	$4.67 \cdot 10^{-8}$	$4.67 \cdot 10^{-8}$	0.887201	$3.60 \cdot 10^{-6}$	$3.57 \cdot 10^{-6}$	1.818140	$8.1 \cdot 10^{-4}$	$8.08 \cdot 10^{-4}$
	7	0.229001	$4.38 \cdot 10^{-8}$	$4.38 \cdot 10^{-8}$	0.887823	$3.24 \cdot 10^{-6}$	$3.33 \cdot 10^{-6}$	1.828047	$8.37 \cdot 10^{-4}$	$8.11 \cdot 10^{-4}$
	8	0.229050	$3.50 \cdot 10^{-8}$	$3.50 \cdot 10^{-8}$	0.888405	$2.64 \cdot 10^{-6}$	$2.67 \cdot 10^{-6}$	1.837936	$7.56 \cdot 10^{-4}$	$7.13 \cdot 10^{-4}$
	9	0.229092	$2.34 \cdot 10^{-8}$	$2.34 \cdot 10^{-8}$	0.888906	$1.80 \cdot 10^{-6}$	$1.78 \cdot 10^{-6}$	1.847032	$5.49 \cdot 10^{-4}$	$5.05 \cdot 10^{-4}$
	10	0.229124	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.17 \cdot 10^{-8}$	0.889290	$9.60 \cdot 10^{-7}$	$8.92 \cdot 10^{-7}$	1.854460	$3.06 \cdot 10^{-4}$	$2.72 \cdot 10^{-4}$
	11	0.229144	$3.2 \cdot 10^{-9}$	$3.2 \cdot 10^{-9}$	0.889533	$2.44 \cdot 10^{-7}$	$2.38 \cdot 10^{-7}$	1.859364	$9.0 \cdot 10^{-5}$	$7.65 \cdot 10^{-5}$
	$\Sigma$		$2.78 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$		$2.15 \cdot 10^{-5}$	$2.14 \cdot 10^{-5}$		$5.05 \cdot 10^{-3}$	$4.96 \cdot 10^{-3}$

- 1) Расчет, исходя из решения уравнения Шредингера.
- 2) Расчет по соотношению (17).

Из таблицы видно, что сумма полуширин отдельных расщепленных подуровней есть величина постоянная для различных цепочек и равная полуширине исходного одиночного пика (примерно  $2.8 \cdot 10^{-7}$  эВ). Это, по нашему мнению, вызвано тем обстоятельством, что возбуждение различных мод происходит независимо друг от друга [10, 11]. Тогда для перехода системы из начального состояния в конечное существует  $N$  независимых каналов и  $\frac{1}{\tau_1} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{\tau_n}$ . Суммирование проводится здесь по всем модам колебаний. В итоге

$$\sum_{n=1}^N \Delta E_n = \sum_{n=1}^N \frac{h}{\tau_n} = h \sum_{n=1}^N \frac{1}{\tau_n} = \frac{h}{\tau_1} = \Delta E_1$$

Таким образом, сумма полуширин всех расщепленных пиков в цепочке оказывается равной полуширине исходного пика до расщепления.

## Заключение

В работе рассмотрены некоторые свойства резонансно-туннельных уровней, возникающих при образовании цепочки потенциальных ям и барьеров.

1. Установлено, что при образовании цепочки РТУ расщепляются на систему подуровней, число которых равно числу звеньев в цепочке.

2. Определены значения энергии этих подуровней и соответствующие им волновые функции в зависимости от числа звеньев. Прозрачность цепочки для этих значений энергии равна единице. Предложена методика, позволяющая рассчитать эти энергии и построить соответствующие волновые функции.

3. Рассмотрен вопрос о полуширине резонансно-туннельных и механизме ее зависимости от параметров цепочки.

4. Предложена методика расчета полуширины РТУ. Показано, что суммарная полуширина всех пиков в цепочке равна полуширине пика в элементарном звене. Получено хорошее совпадение значений, полученных в результате компьютерного моделирования и расчета по предложенной методике.

### Литература

1. Демиховский В.Я, Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур// М., Логос, 2000, 248 с.
2. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники// Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
3. Аладышкин А.Ю. Туннельные явления в нанофизике // Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
4. Стефанчук А.Д. Расчет полей электромагнитных волн в слоистой ионосфере с учетом нелинейных эффектов. Автореферат// М., 2000, 24 с.
5. Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы// СПб, изд. Лань, 2011, 448 с.
6. Давыдов А.С. Квантовая механика //М., Наука, 1973, 702 с.
7. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики, т. 2// М., Наука, 1971, 936 с.
8. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике, т. 9, Квантовая механика (II)// М., «Мир», 1967, 259 с.
9. Крауфорд Ф. Берклеевский курс физики, т. 3, Волны// М., Наука, 1984, 521 с.
10. Курбатов Л.Н. Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра// М., МФТИ, 1999, 320 с.
11. Пихтин А.Н. Физические основы квантовой электроники и оптоэлектроники// М., «Высшая школа», 1983, 304 с.

# TRANSFORMATION OF RESONANCE TUNNEL LEVELS IN THE FORMATION OF A LAYERED QUANTUM-DIMENSIONAL STRUCTURE

V.F. Degtyarev<sup>1,a</sup>, A.P. Zhilinsky<sup>1,b</sup>

<sup>1</sup>*Moscow Technical University of Communications and Informatics,*

*Moscow, Aviamotornaya st., 8a;*

*E-mail: <sup>a</sup>vfsteel2008@jmail.com, <sup>b</sup>zhilinsk@yansdex.ru*

Received 14.12.2020

It was found that the formation of a chain consisting of a sequence of potential wells and barriers gives rise to resonance levels for which the transparency of the structure is equal to unity. When the number of chain links increases, these levels are split into close sublevels, the it's energy and half-width depends on the parameters of the barriers and the chain cells number. The proposed model makes possible to determine the characteristics of these levels, in particular, their energy and half-width. The dependence of the wave function on the parameters of the chain is investigated.

*Key words: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.*