

ПЕРЕСТРОЙКА РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ В СВЯЗАННЫХ КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ ЯЧЕЙКАХ

В.Ф. Дегтярев

Московский технический университет связи и информатики, Москва, Россия

E-mail: vfsteel2008@gmail.com

Поступила 22.12.2022

Исследован процесс перестройки резонансных туннельных уровней в связанных квантово-размерных ячейках. Установлено, что взаимодействие между соседними ячейками существенным образом изменяет спектр прозрачности структуры. Для частиц с энергией, равной энергии уровней, прозрачность структуры равна единице. Рассмотрены два механизма взаимодействия ячеек. В первом случае связь изменяется за счет изменения толщины барьера между ячейками. Во втором — за счет изменения ширины потенциальной ямы, возникающей при раздвигании звеньев. В этом случае коэффициент связи между ячейками имеет резонансный характер. Предложены схемы и рассмотрен механизм перестройки уровней. Изучена зависимость параметров уровней от коэффициента связи между барьерами.

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

УДК 537.9

DOI: 10/31145/2224-8412-2022-22-2-23-36

Введение

Резонансное туннелирование в квантово-размерных структурах представляет собой новое быстро развивающееся направление исследований в наноэлектронике. Особенно ярко эти эффекты проявляются в сверхрешетках, содержащих большое число элементарных ячеек. Описанию свойств сверхрешеток посвящен ряд обзоров, например [1-3]. В этих работах достаточно подробно рассмотрена их энергетическая структура, оптические и электрические свойства.

В современных нанoeлектронных приборах (резонансных туннельных диодах и транзисторах и др.) активная область имеет размеры порядка нескольких нанометров. Эта величина сравнима с длиной волны электрона и межатомным расстоянием типичных полупроводников, что приводит к существенному влиянию квантово-размерных эффектов на их работу. Среди этих эффектов значительную роль играют резонансные явления при туннелировании. Полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) и барьерами (КБ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для опто- и нанoeлектроники [1].

Размерное квантование приводит к значительной перестройке энергетического спектра наноструктур [4,5]. При этом в квантово-размерных цепочках возникают новые резонансные уровни, приводящие к существенному изменению их электрических и оптических свойств. Все вышеперечисленные свойства относятся к длинным цепочкам, содержащим десятки и сотни ячеек. К сожалению, начальный этап образования сверхрешетки, когда образуются первые звенья решетки исследован недостаточно.

В данной работе изучено взаимодействие двух связанных между собой ячеек и обусловленная этим перестройка спектров прозрачности и волновых функций. Изменение коэффициента связи происходит либо за счет изменения толщины барьера между ячейками, либо за счет изменения ширины потенциальной ямы между ними.

Модели структур, изучаемые в работе, и 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. Системы компьютерной алгебры помимо численного решения поставленной задачи во многих случаях 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 работе рассмотрена система из двух связанных ячеек, для которых изучена зависимость спектров прозрачности и волновых функций от характера взаимодействия между ними. Высота барьеров принималась равной 2 эВ, ширина потенциальных ям — 1 нм, ширина барьеров варьировалась в пределах от 0 до 10 нм. Амплитуда падающей волны принималась равной единице ($\Psi_{in}(x) = 1 \cdot e^{ikx}$). Энергия налетающих электронов при компьютерном моделировании изменялась в пределах от 0 до 5 эВ.

Параметры резонансных туннельных уровней (РТУ) в одиночном звене

В рассматриваемой структуре в качестве элементарного звена принималась двухбарьерная квантовая структура (ДБКС), показанная на рис. 1. Рассмотрен случай, когда энергия частицы меньше высоты барьера. Резонансные уровни и волновые функции для этого случая показаны на рисунке. Основные результаты компьютерного моделирования перечислены ниже.

В элементарном звене, также как и в потенциальной яме конечной глубины (толщина стенок которой считается бесконечно большой) при $E < U$ образуется система резонансно-туннельных уровней (РТУ) [7]. Прозрачность структуры для частиц с такой энергией равна единице.

В рассматриваемой структуре число таких уровней равно трем (рис. 1). Как показывают расчеты, 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 ширины и глубины, что неудивительно при малой прозрачности барьеров, разделяющих ячейки. Это легко понять, если учесть, что оба типа пиков соответствуют условию, что на ширине ямы уместается одинаковое число полувольт.

Рис. 1. Схема элементарного звена и волновые функции в случае, когда на ширине ямы укладывается 1- одна полуволна, 2 — две полуволны, 3 — три полуволны

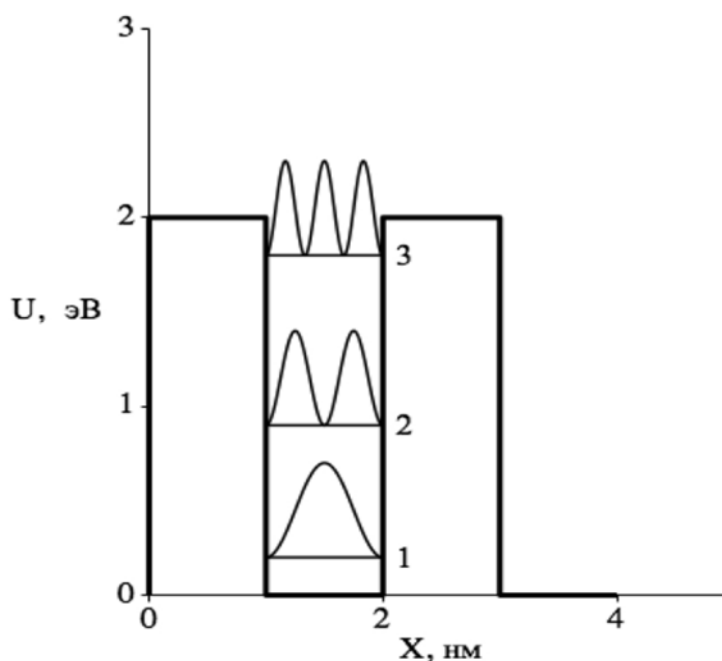


Рис. 1. Схема элементарного звена и волновые функции в случае, когда на ширине ямы укладывается
1 — одна полуволна, 2 — две полуволны, 3 — три полуволны

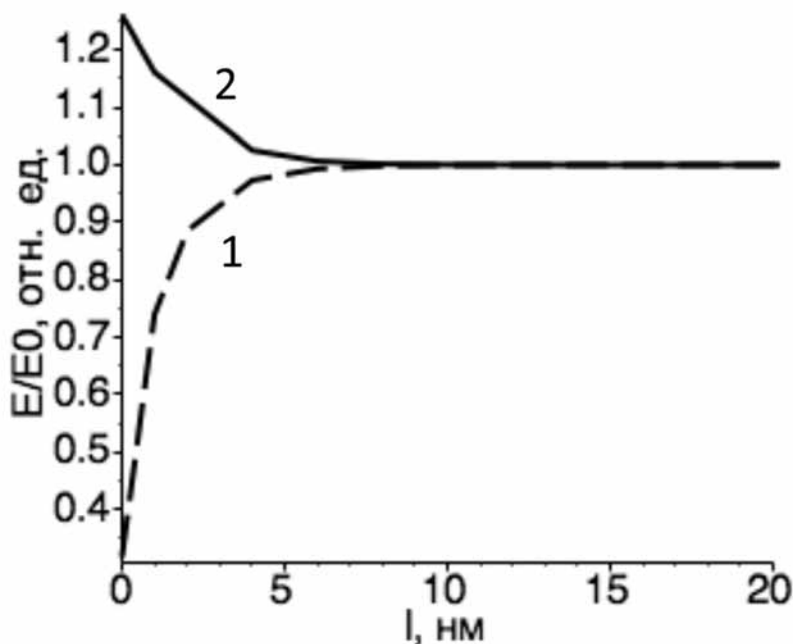


Рис. 2. Зависимость расщепления исходного уровня с энергией 0.228949 эВ от ширины барьера между ячейками.

1 — четная конфигурация волновой функции; 2 — нечетная конфигурация.

Спектр прозрачности двух связанных ячеек

Прозрачность системы из двух ячеек существенным образом зависит от степени связи между звеньями. Регулировать связь ячеек можно, изменяя толщину потенциального барьера между ними. В данной работе толщина барьера изменялась в пределах от 0 до 20 нм. Зависимость прозрачности от толщины барьера между ячейками для различных конфигураций волновой функции приведена на рис. 2. Из рисунка видно, что при толщине барьера > 10 нм ячейки практически не взаимодействуют между собой (уровень 0.228949 эВ оказывается двукратно вырожденным). При уменьшении толщины барьера, разделяющего ячейки, наблюдается расщепление этого уровня на два подуровня. По мере сближения ячеек энергия нижнего уровня уменьшается, а энергия большего — возрастает. Относительная энергия нижнего уровня уменьшается сильнее и при $l=0$ нм составляет ~ 0.25 от исходного значения. Увеличение энергии верхнего уровня составляет ~ 1.25 раза.

Понять влияние взаимодействия ячеек на волновые функции и расщепления уровней можно, используя подход, развитый в [6]. Согласно развитым в [6] представлениям, низший уровень в изолированной ячейке соответствует одной полуволне, укладывающейся на ширине ямы. Аналогичная ситуация и со второй ячейкой. При наличии взаимодействия волновые функции в различных ячейках образуют либо симметричную (когда фазы

колебаний в ячейках одинаковы) или антисимметричную (фазы колебаний противоположны) конфигурацию (рис.3). При слабом взаимодействии разницы между значениями энергии уровней практически нет, что следует из сравнения рисунков 3(А-1 и Б-1). Это вытекает из равенства средней кинетической ($\sim \left| \frac{d\Psi}{dx} \right|^2$) энергии. При сближении ячеек волновая функция меняет форму. Волновая функция, соответствующая симметричной конфигурации будет давать меньшее значение полной энергии, поскольку для нее среднее значение потенциальной ($\sim U(x)|\Psi|^2$) энергии меньше, чем для нечетной (нет точек смены фазы колебаний).

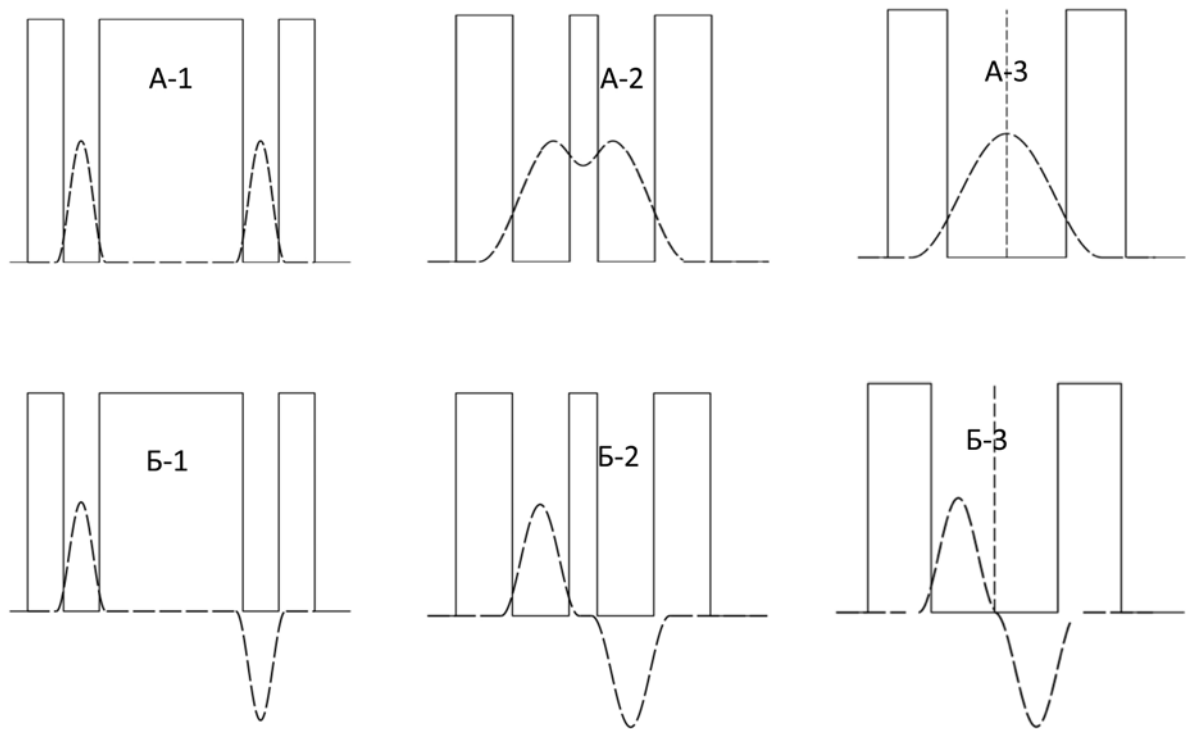


Рис.3. Схема трансформации волновых функций при изменении ширины барьера, разделяющего ячейки.

А — симметричная конфигурация; Б — антисимметричная конфигурация.

Рассмотрим предельный случай, когда ширина барьера равна нулю, т.е. ямы только что соприкоснулись. Ψ -функция симметричного состояния есть не что иное, как волновая функция основного состояния для квантовой ямы шириной $2l$ (рис. 3(А-3)). Энергия антисимметричного состояния соответствует второму состоянию в яме шириной $2l$ (рис. 3(Б-3)). Поскольку в квантовой яме $E \sim \frac{n^2}{l^2}$ (l -ширина рассматриваемой ямы) энергия антисимметричного состояния изменяется слабо, то энергия симметричной волновой функции оказывается примерно в 4 раза меньше энергии антисимметричного состояния, что соответствует рис. 2. Результаты компьютерного моделиро-

вания показывают, что энергии нижнего и верхнего состояний действительно соответствуют первому и второму состояниям в яме удвоенной ширины (0.072483 эВ и 0.288560 эВ) соответственно [4]. При увеличении длины цепочки третье звено взаимодействует с предыдущими аналогичным образом. В результате этого число пиков прозрачности соответствует числу звеньев в цепи. Отметим также, что расщепление уровней во взаимодействующих квантовых ячейках аналогично расщеплению резонансных частот в связанных резонансных контурах [7,8].

Допустим, что определяющим является движение частицы в потенциальной яме внутри ячейки. Тогда внутри ячейки можно считать $U=0$ и уравнение Шредингера примет вид $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0$.

Две связанные ячейки можно рассматривать как два осциллятора, связанные емкостной связью. Роль «конденсатора связи» играет барьер, разделяющий ячейки. Тогда получим

$$\begin{cases} \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 - \alpha k_2^2\Psi_2 = 0 \\ \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 - \alpha k_1^2\Psi_1 = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Здесь Ψ_1 и Ψ_2 , k_1 и k_2 — волновые функции и волновые числа в 1 и 2 ячейках соответственно. α — коэффициент связи ($0 < \alpha < 1$). Такая система будет совершать нормальные колебания с собственными значениями волнового числа κ , которые определяются из уравнения

$$(k_1^2 - \kappa^2)(k_2^2 - \kappa^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2 = 0 \quad (2)$$

$$\text{Если ячейки одинаковы, то } k_1 = k_2 = k_0 \text{ и } \kappa = k_0 \sqrt{1 \pm \alpha} \quad (3)$$

Пусть на первую ячейку падает плоская волна, координатная часть которой имеет вид $F e^{ipx}$, где p — волновое число падающей волны, F — амплитуда. Тогда система уравнений приобретает вид

$$\begin{cases} \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 - \alpha k_2^2\Psi_2 = F e^{ipx} \\ \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 - \alpha k_1^2\Psi_1 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Решение системы (4) следует искать в виде

$$\Psi_1 = \Psi_{10} e^{ipx} \text{ и } \Psi_2 = \Psi_{20} e^{ipx}. \quad (5)$$

Подставляя эти выражения в (4) и сокращая на общие множители, получим

$$\Psi_{10} = \frac{k_2^2 - p^2}{(k_1^2 - p^2)(k_2^2 - p^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2} F \quad (6)$$

$$\Psi_{20} = \frac{\alpha k_1^2}{(k_1^2 - p^2)(k_2^2 - p^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2} F \quad (7)$$

Для одинаковых ячеек, что имеет место в рассматриваемом случае, выражения (6) и (7) существенно упрощаются

$$\Psi_{10} = \frac{k_0^2 - p^2}{(k_0^2 - p^2)^2 - \alpha^2 k_0^4} F. \quad (8)$$

$$\Psi_{20} = \frac{\alpha k_0^2}{(k_0^2 - p^2)^2 - \alpha^2 k_0^4} F. \quad (9)$$

Рассматривая выражения для Ψ_{10} и Ψ_{20} , можно отметить, что данные выражения в точках $p^2 = k_0^2(1-\alpha)$ и $p^2 = k_0^2(1+\alpha)$ имеют максимумы, соответствующие резонансным частотам (рис. 4). Из рисунка 4 видно, что в точке $p = k_0$ волновая функция Ψ_{10} обращается в ноль, а Ψ_{20} в знаменателе имеет максимум, что в итоге дает минимальное значение прозрачности системы. Приведенные рассуждения подтверждаются результатами моделирования, где изображены спектры прозрачности (рис.5) и волновые функции в первой и во второй ячейках (рис. 6). Из рис. 5 видно, что при достаточно сильной связи между ячейками в точке $p = k_0$ прозрачность системы действительно имеет минимум.

$$\text{Рассмотрим отношение } q = \frac{\Psi_1}{\Psi_2} = \frac{k_0^2 - p^2}{\alpha k_0^2}. \quad (10)$$

Отсюда видно, что при $p < k_0$ величина $q > 0$ и, следовательно, колебания в первой и второй ячейках происходят синфазно. Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 образуют симметричную конфигурацию. При $p > k_0$ величина $q < 0$ и, следовательно, колебания в первой и второй ячейках происходят в противоположных фазах. Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 образуют при этом антисимметричную конфигурацию (рис. 4). В результате при уменьшении ширины промежуточного барьера энергия первого уровня уменьшается (т.к. колебания в ячейках происходят синфазно), а второго — растет.

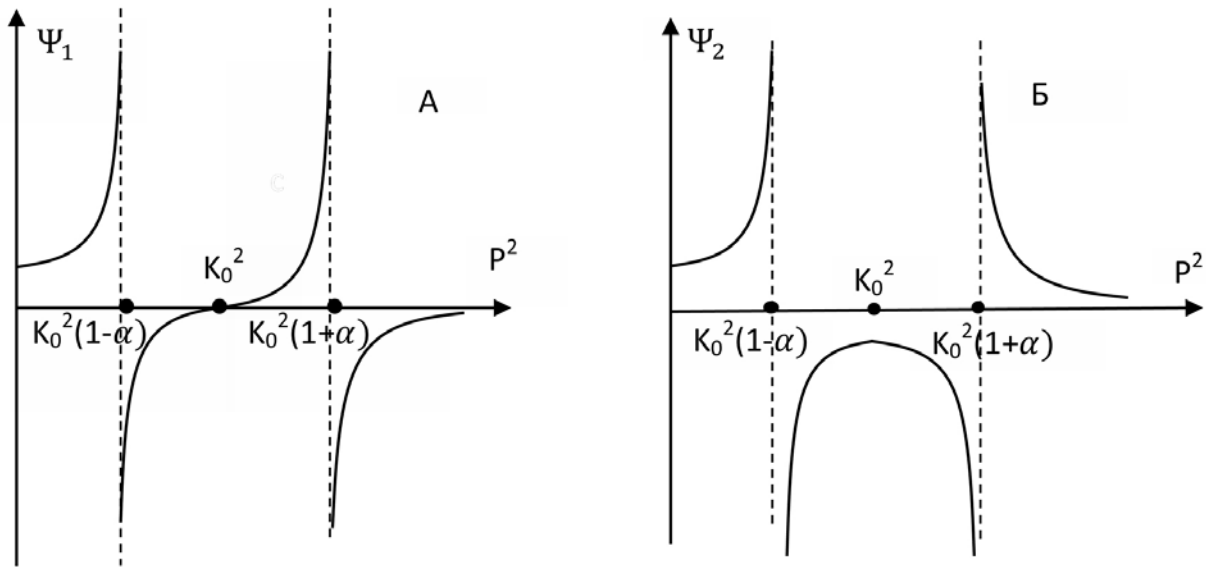


Рис. 4. Схема конфигурации волновой функции в первом (А) и втором (Б) звене. При $p^2 < k_0^2$ — симметричная конфигурация; при $p^2 > k_0^2$ — антисимметричная конфигурация. В точках $p^2 = k_0^2(1-\alpha)$ и $p^2 = k_0^2(1+\alpha)$ наблюдается резонанс.

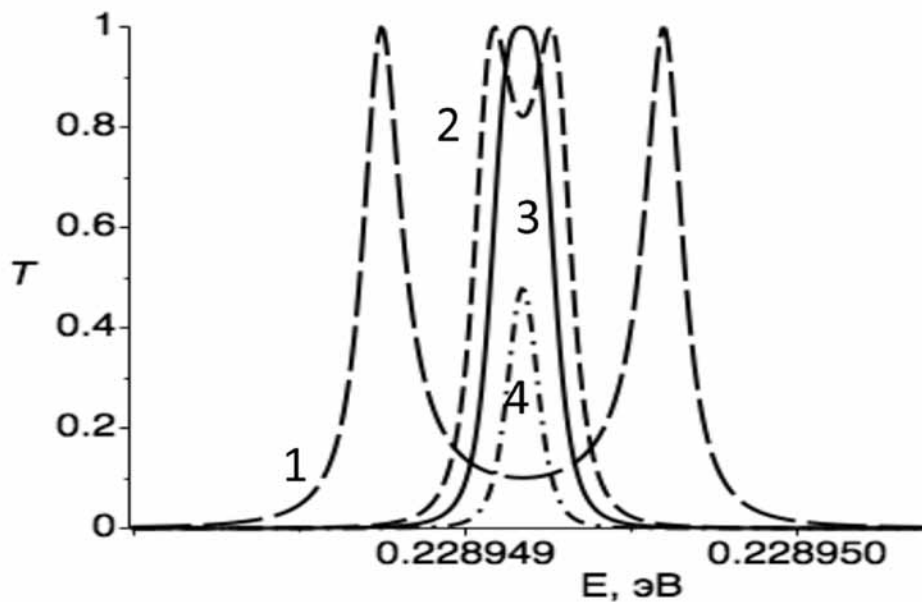


Рис. 5. Зависимость прозрачности системы двух ячеек от толщины барьера между ними 1 — 18 нм, 2 — 20 нм, 3 — 21 нм, 4 — 22 нм.

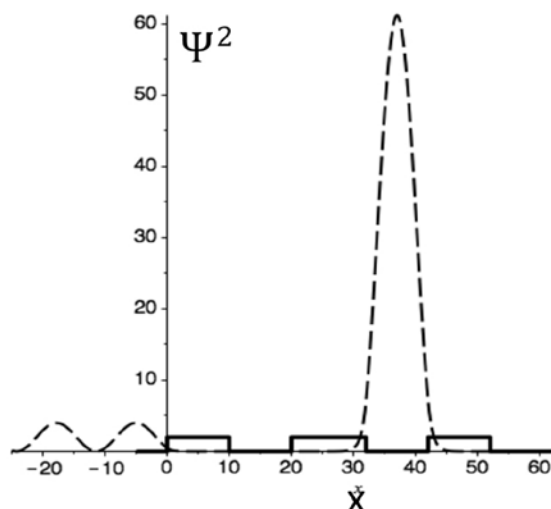


Рис. 6. Волновая функция двух связанных ячеек в случае, когда $p^2 = k_0^2$.

Зависимость расщепления резонансных туннельных уровней связанных ячеек от расстояния между ними.

В предыдущих разделах рассматривалось влияние толщины барьера между ячейками на эффективность связи между ними. Представляет также интерес рассмотреть характер расщепления уровней в зависимости от ширины ямы, возникающей при раздвигании звеньев. Параметры ячеек принимались такими же, как описано выше и показано на рис. 1. В этом случае между звеньями образуется дополнительная яма, ширина которой и определяет коэффициент связи между ячейками. Зависимость расщепления уровней от ширины промежуточной ямы показана на рис. 7.

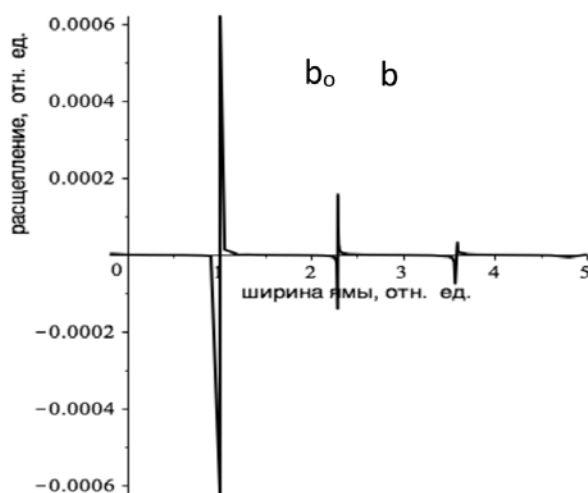


Рис. 7. Зависимость расщепления $(E - E_0) / E_0$ уровней от относительного расстояния b / b_0 между ячейками. b_0 — ширина потенциальной ямы в элементарной ячейке ($b_0 = 1$ нм). b — ширина ямы между ячейками.

Отметим следующие особенности.

1. Зависимость расщепления от относительного $\frac{b}{b_0}$ расстояния носит резонансный характер. Значительное расщепление наблюдается только при определенной ширине промежуточной ямы.

2. Положение первого резонансного пика расщепления соответствует значению $\frac{b}{b_0} = 1$. Положение последующих пиков определяется соотношением $\frac{b}{b_0} \approx 1.15 \cdot n$, где $n = 2, 3, 4, \dots$. Заметим, что при $n \geq 4$ взаимодействие между ячейками настолько мало, что при расчетах расщепление уровней не обнаруживается.

Понять отмеченные особенности можно, если учесть, что плоская волна может распространяться в структуре если, ее длина во всех ячейках одна и та же, и при этом в каждой ячейке укладывается целое число полувольт.

В случае $\frac{b}{b_0} = 1$ структура представляет собой систему трех идентичных элементарных ячеек. Взаимодействие между ними наиболее сильное. Поэтому и расщепление уровней оказывается наибольшим.

При увеличении расстояния между ячейками (величина b на рис.7) эта идентичность нарушается. Коэффициент связи между ячейками падает, и величина расщепления уровней уменьшается. При $b = n \cdot b_0$, где $n = 2, 3, 4, \dots$ в средней ячейке уже не уместится целое число полувольт, в результате чего прозрачность системы резко уменьшается. Для того, чтобы условие максимального расщепления было выполнено, необходимо увеличить ширину промежуточной ячейки на длину интервала перекрытия полувольт.

Следующий пик прозрачности наблюдается, если на расстоянии между ячейками размещается три полуволны (четыре полуволны и т.д.). Но, так как внутри промежуточной ямы отдельные полуволны не могут перекрываться, ширина этого промежутка оказывается больше, чем $n \cdot b_0$, n -число полувольт.

Заключение

В работе рассмотрены некоторые особенности взаимодействия квантовых ячеек между собой.

1. Показано, что при образовании квантово-размерной структуры элементарные ячейки, взаимодействуя между собой, образуют систему квантовых туннельных подуровней.
2. Установлено, что с уменьшением толщины барьера между ячейками коэффициент связи увеличивается и возрастает величина расщепления между подуровнями. При этом энергия подуровня с симметричной конфигурацией волновой функции уменьшается, а с антисимметричной — возрастает.

3. Рассмотрена модель взаимодействия квантовых ячеек между собой. Установлено, что характер взаимодействия аналогичен классическому взаимодействию резонансных контуров. На основании рассмотренной модели рассчитаны спектры прозрачности и волновые функции связанных ячеек.
4. Установлено, что, если раздвигать звенья цепочки с образованием промежуточной потенциальной ямы между ними, то коэффициент связи носит резонансный характер. При этом, если на ширине промежуточной ямы укладывается целое число полуволн, расщепление будет максимальным. При других значениях ширины промежуточной ямы прозрачность системы и расщепление подуровней пренебрежимо мало.

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

Литература:

1. Демиковский 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, т. 47, вып. 3, с. 7, 485-516.
4. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Нанoeлектроника, часть 1.//М., «Юрайт», 2019, 285 с.
5. Аладышкин А. Ю. Туннельные явления в нанofизике.// Н. Новгород: Нижегород. гос. ун-т., 2011. 32 с.
6. Лафлин Р. Квантовая двумерная холловская проводимость. //Квантовый эффект Холла, М., Мир, 1986, 160 с.
7. Стрелков С.П. Введение в теорию колебаний.// СПб: Лань, 2005. 440 с.
8. Демирчян К. С. , Нейман Л. Р, Коровкин Н. В. ,. Чечурин В. Л. Теоретические основы электротехники, т. 1// СПб, Питер, 2003, 463 с.

RECONSTRUCTION OF RESONANT TUNNEL LEVELS IN COUPLED QUANTUM-SIZE CELLS

V.F. Degtiarev

*Moscow Technical University of Communications and Informatics, Moscow, Russia
E-mail: vfsteel2008 @gmail.com*

Received 22.12.2022

The process of rearrangement of resonant tunneling levels in coupled quantum-well cells is studied. It is found that the interaction between neighboring cells significantly changes the transparency spectrum of the structure. For particles with an energy equal to the energy of the levels, the transparency of the structure is equal to unity. Two mechanisms of cell interaction are considered. In the first case, the bond is changed by changing the thickness of the barrier between the cells. In the second — due to a change in the width of the potential well that occurs when the links are pulled apart. In this case, the coupling coefficient between cells has a resonant character. Schemes are proposed and the mechanism of level restructuring is considered. The dependence of the level parameters on the coupling coefficient between the barriers has been studied.

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