

Д. т. н. Е. А. НЕЛИН

Украина, НТУУ «Киевский политехнический институт»
E-mail: ye.nelin@gmail.com

Дата поступления в редакцию
23.12 2008 г. — 25.06 2009 г.

Оппонент к. ф.-м. н. М. А. ДРОЗДОВ
(НИЛ ВИ ОНПУ, г. Одесса)

МОДЕЛЬ ЛИНИИ ПЕРЕДАЧИ ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Предложена новая модель для решения квантово-механических задач. В рамках этой модели получены аналитические выражения для резонансных параметров и характеристик типичных барьерных структур нанoeлектроники.

Физико-технические принципы электроники и микроэлектроники основаны на управлении дрейфовым движением электронов в кристаллической решетке твердого тела, а нанoeлектроники — на управлении туннелированием электронов сквозь барьерные структуры. В последнее время интенсивно исследуются туннельные барьерные структуры для электромагнитных и упругих волн.

Традиционное решение барьерных квантово-механических задач заключается в «сшивании» решений на границах из условий непрерывности волновой функции и ее производной. В [1] рассмотрена импедансная модель для таких задач, в которой граничные условия учитываются автоматически, что существенно упрощает решение. Импедансная модель имеет важный физический смысл, обладает значительной общностью как основанная на понятии импеданса, позволяет воспользоваться аппаратом теории линий передачи. В настоящей работе на основе модели линии передачи получены аналитические выражения для резонансных параметров и характеристик типичных барьерных структур нанoeлектроники. Традиционные же методы позволяют получить лишь отдельные частные результаты.

Импеданс характеризует реакцию среды на волновое возмущение. Квантово-механический импеданс равен

$$Z = 2\sqrt{2(E \mp V)} / m, \quad (1)$$

где E — энергия электрона;

V — потенциальная энергия;

m — эффективная масса электрона.

Здесь и далее верхний знак соответствует барьеру.

Импеданс и волновое число k связаны соотношением $Z = 2\hbar k / m$. Согласно импедансной модели, потенциальные яма или барьер моделируются отрезком линии передачи с волновым импедансом Z . Входной импеданс отрезка линии передачи определяется выражением

$$Z_{\text{вх}} = Z \frac{Z_n - ZC}{Z - Z_n C}, \quad (2)$$

где Z_n — импеданс нагрузки;

$C=A$ — для ямы;

$C=B$ — для барьера;

$A = itgka$;

$B = itgk_b b$;

k и k_b — волновое число в области ямы и барьера;

a и b — соответственно ширина ямы и толщина барьера.

В нашем случае $Z_n = Z_0 = 2\sqrt{2E/m}$ — импеданс внешней среды, где m — эффективная масса электрона во внешней среде.

Коэффициент отражения от границы между областями с импедансами Z и $Z_{\text{вх}}$ равен

$$R = \frac{Z - Z_{\text{вх}}}{Z + Z_{\text{вх}}}. \quad (3)$$

Анализ квантово-механической структуры сводится к анализу неоднородной линии передачи. Поскольку коэффициент отражения R зависит от соотношения импедансов, то нормирование импедансов к импедансу внешней среды позволит упростить выкладки. В связи с этим далее будем оперировать величиной Z как нормированным импедансом среды с параметрами m_1 и k_1 , т. е. $Z = k_1 m_1 / (k m_1)$. Это отношение входит в известные конечные выражения квантово-механических барьерных задач.

Симметричная двухбарьерная структура (ДБС) (рис. 1, а) является базовой для понимания физических основ формирования зонных диаграмм, принципов работы и конструирования нанoeлектронных устройств. В этой структуре наблюдается необычное явление — резонансное туннелирование электронов (РТЭ), при котором коэффициент прохождения равен единице. РТЭ — ключевой эффект барьерных электронных структур.

Области барьера и внешней среды имеют различающиеся импедансы. Для нахождения входного импеданса ДБС необходимо последовательно находить входные импедансы на границах барьеров. Согласно (1), нормированный импеданс барьера определяется формулой

$$Z = \sqrt{m(E - V)} / (m_b E),$$

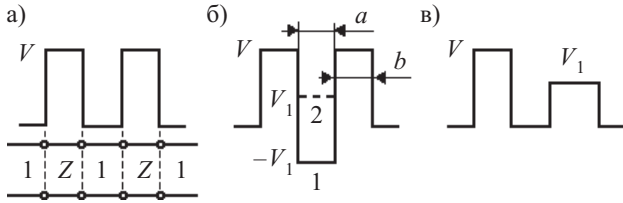


Рис. 1. Двухбарьерные структуры:

а — симметричная ДБС с симметричными барьерами (1 и Z — нормированные импедансы внешней среды и барьера); б — симметричная ДБС с несимметричными барьерами (1 и 2 — варианты расположения дна потенциальной ямы V_1); в — несимметричная ДБС (V_1 — высота правого барьера)

где m_b — эффективная масса электрона в области барьера, и тогда, согласно (2), нормированный входной импеданс барьера

$$Z_b = \frac{1 - ZB}{1 - Z^{-1}B}. \quad (4)$$

Исходя из (2)–(4), коэффициент отражения симметричной ДБС равен

$$R = \frac{(1 - Z^2)[2Z + (Z^2 + 1)AB]B}{(Z^4 + 1)AB^2 + 2Z\{[(Z^2 + 1)B - Z](1 - A) - ZB^2\}}. \quad (5)$$

В режиме туннелирования ($E < V$) величины Z и k_b — мнимые. При РТЭ $R=0$, откуда получим условие для собственных значений энергии ДБС:

$$\operatorname{tg} ka = \frac{2\operatorname{cth}\chi b}{|Z|^{-1} - |Z|}, \quad (6)$$

где $\chi = |k_b|$.

Если $m_b = m$, из (6) имеем

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{E(V - E)}\operatorname{cth}\chi b}{E - 0,5V}. \quad (7)$$

При $b \rightarrow \infty$ $\operatorname{cth}\chi b \rightarrow 1$ и (7) совпадает с известным выражением для собственных значений энергии по-

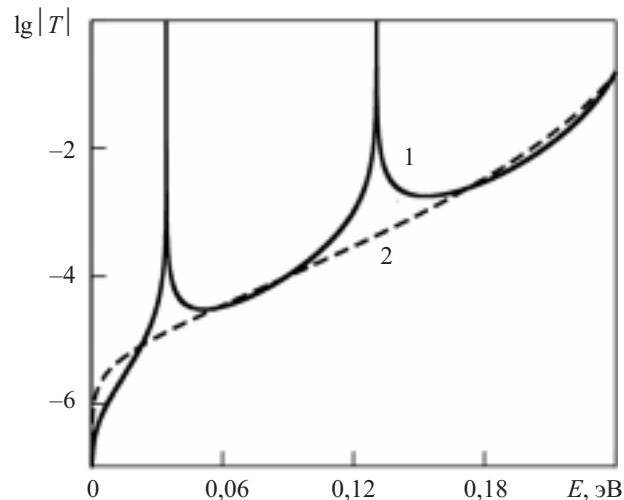


Рис. 2. Энергетическая зависимость коэффициента прохождения симметричной ДБС (1) и одиночного потенциального барьера удвоенной толщины (2) с параметрами: $V=0,24$ эВ, $a=b=2,5$ нм, $m_b=m_0$ (m_0 — масса электрона)

тенциальной ямы [2]. Практически, если $\chi b \geq 2$, то $\operatorname{cth}\chi b \approx 1$.

На рис. 2 приведены зависимости коэффициента прохождения симметричной ДБС и одиночного барьера, соответствующего ДБС без потенциальной ямы. Зависимость T рассчитана, исходя из (5), с учетом того, что $|T|^2 = 1 - |R|^2$. Собственные значения ДБС, соответствующие РТЭ, равны 0,03 и 0,13 эВ, при этом $|T|=1$. Из сравнения зависимостей видно, что вдалеке от собственных значений ДБС потенциальная яма практически не влияет на коэффициент прохождения ДБС.

ДБС представляет собой резонатор, образованный потенциальными барьерами. Условия РТЭ аналогичны условиям баланса амплитуд и фаз при генерации. Эти условия выражаются равенствами

$$|r| = |r_1|; \quad (8)$$

$$2ka + \varphi + \varphi_1 = 2\pi n, \quad (9)$$

где r и r_1 — коэффициенты отражения от левого и правого барьеров;

φ и φ_1 — фазы коэффициентов отражения r и r_1 ;

n — номер энергетического уровня, $n=1, 2, \dots$

Условие баланса фаз (9) позволяет определить собственные значения.

Исходя из (3) и (4), при $E < V$ получим

$$r = \frac{|Z| + |Z|^{-1}}{|Z|^{-1} - |Z| + 2i\operatorname{cth}\chi b}; \quad (10)$$

$$\varphi = \begin{cases} \arctg \frac{2\operatorname{cth}\chi b}{|Z| - |Z|^{-1}}, & |Z| \leq 1, \\ \pi + \arctg \frac{2\operatorname{cth}\chi b}{|Z| - |Z|^{-1}}, & |Z| > 1. \end{cases} \quad (11)$$

Ранее полученное выражение (6) для собственных значений энергии симметричной ДБС следует также из (9) и (11).

Модель резонатора позволяет определить ширину уровня Γ , равную полосе резонанса (ширине характеристики $|T|^2$) при значении 0,5 от максимума: $\Gamma = E/Q$, где E — собственный уровень энергии согласно (9); Q — добротность резонатора.

Исходя из [3], после преобразований для обычного резонатора имеем

$$Q = \alpha\beta, \quad (12)$$

где $\alpha = \pi n$;

$$\beta = \arcsin^{-1} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{r_1}} - \sqrt{r_1} \right) / 2 \right];$$

r и r_1 — действительные числа одного знака и не зависят от частоты.

Множитель α равен набегу фаз в резонаторе на резонансной частоте: $\alpha = ka = \Delta\varphi Q$, где $\Delta\varphi$ — сдвиг фаз в полосе резонанса. Поскольку $r^2 + t^2 = 1$, где t — коэффициент прохождения, при выполнении условия (8) и $t \ll 1$ имеем $\beta \approx |r|/t^2$.

Для квантово-механического резонатора необходимо учесть особенности зависимостей $k(E)$ и $r(E)$. В этом случае $\Delta\varphi = \Delta\varphi_a + \Delta\varphi_r$, и $\alpha = \alpha_a + \alpha_r$, где

Значения первого энергетического уровня и его ширины для симметричной ДБС

Материал барьера	Толщина барьера, нм	Ширина ям, нм	E, эВ		Г, эВ		
			Формула (6)	Источник [4]	Формула (5)	Формула (14)	Источник [4]
AlGaAs	5,0	5,0	0,07352	0,07348	$4,0 \times 10^{-4}$	$4,1 \times 10^{-4}$	$3,9 \times 10^{-4}$
	4,0	5,0	0,07342	0,07337	$1,4 \times 10^{-3}$	$1,4 \times 10^{-3}$	$1,3 \times 10^{-3}$
	3,0	5,0	0,07305	0,07301	$4,5 \times 10^{-3}$	$4,8 \times 10^{-3}$	$4,5 \times 10^{-3}$
AlAs	2,5	4,5	0,13723	0,13712	$4,0 \times 10^{-6}$	$4,0 \times 10^{-6}$	$4,0 \times 10^{-6}$
	1,5	4,5	0,13711	0,13700	$3,2 \times 10^{-4}$	$3,2 \times 10^{-4}$	$3,2 \times 10^{-4}$
	2,8	6,2	0,08532	0,08524	$3,6 \times 10^{-7}$	$3,6 \times 10^{-7}$	$4,0 \times 10^{-7}$

$\Delta\phi_{a,r} = \alpha_{a,r}/Q$ — составляющие сдвига фаз, обусловленные шириной ямы и фазами коэффициентов отражения. Исходя из (11) и учитывая, что $Q \gg 1$, имеем

$$\alpha_r \approx \frac{V}{(V-E)(|Z|+|Z|^{-1})}. \quad (13)$$

Поскольку $\alpha_a \approx ka/2$, а при $E \ll V$ $\alpha_r \approx \phi/2$, то с учетом (9) получим $\alpha \approx \pi n/2$. Подставив в (12) α и $|t|$ при $|r| \approx 1$ [1], получим относительную ширину уровня

$$\hat{\Gamma} \approx \frac{8}{\pi n} \left(\frac{\text{sh}^{-1} \chi b}{|Z|+|Z|^{-1}} \right)^2. \quad (14)$$

В таблице приведены значения первого энергетического уровня и его ширины для симметричной ДБС, рассчитанные согласно (6) и (14), в сравнении с данными [4], полученными традиционными методами. Материал ямы — GaAs, $m=0,067m_0$. Для AlGaAs $V=0,23$ эВ и $m_b=0,09m_0$, для AlAs $V=1,355$ эВ и $m_b=0,15m_0$. Значения уровней, полученные из формулы (6), являются более точными, поскольку баланс фаз высокочувствителен к отстройке. Для сравнения с результатами (14) приведены точные значения ширины уровня, рассчитанные исходя из (5). Здесь видно, что они не совпадают лишь в первом и третьем случаях с погрешностями соответственно 3 и 7%. При использовании формулы (13) получено несовпадение с (5) только в третьем случае с погрешностью 4%.

При $m_b=m$ и $\chi b \geq 1,2$ из (14) получим

$$\hat{\Gamma} \approx \frac{32}{\pi n} \frac{E(V-E)}{V^2} \exp(-2\chi b). \quad (15)$$

На рис. 3 приведены кривые энергетической зависимости относительной ширины уровня симметричной ДБС, полученные из (15) и путем точных вычислений. Как видим, выражение (15) справедливо в широком диапазоне значений энергии.

В режиме надбарьерного прохождения ($E > V$) спектр собственных значений энергии симметричной ДБС состоит из собственных значений потенциальной ямы, ограниченной барьерами, и собственных значений барьера. Из (4) и (9) для первой составляющей имеем

$$\text{tg } ka = \frac{2\text{ctg} k_b b}{Z + Z^{-1}}. \quad (16)$$

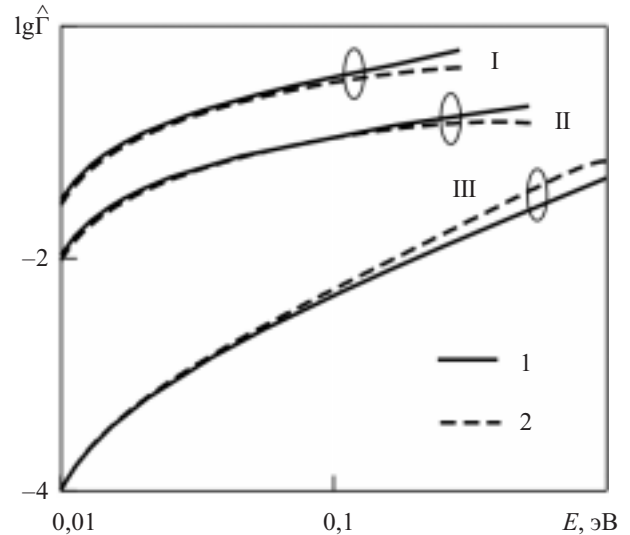


Рис. 3. Энергетическая зависимость относительной ширины уровня симметричной ДБС:

1 — построенная путем точных вычислений; 2 — рассчитанная по (15) с параметрами: $V=0,23$ эВ, $m_b=m=0,1m_0$, $b=2$ нм, $n=1$ (I) и 3 (II); $b=6$ нм, $n=1$ (III)

Полученное выражение справедливо и для режима туннелирования ($E < V$): из формулы (16) следует (6).

В симметричной ДБС с несимметричными барьерами (рис. 1, б) коэффициент отражения равен $r=(Z_1-Z_b)/(Z_1+Z_b)$, где Z_1 — импеданс в области ямы. Согласно (9), для собственных значений имеем

$$\text{tg } ka = \frac{2ZZ_1(1-Z^2)\text{tg} k_b b}{Z^2(Z_1^2-1)+(Z_1^2-Z^4)\text{tg}^2 k_b b}. \quad (17)$$

Для симметричных барьеров $V_1=0$, $Z_1=1$ и тогда из (17) следует (16).

При $E < V$ и $m_a=m_b=m$

$$\text{tg } ka = \frac{\sqrt{E(V-E)}\mu}{(E-0,5V)\text{th}\chi b + n},$$

где m_a — эффективная масса электрона в области ямы;

$$\mu = (E \pm V_1)/E;$$

$$v = \pm V_1(V-E \pm E \text{th}^2 \chi b)/V \text{th} \chi b;$$

знаки «+» и «-» соответствуют вариантам 1 и 2 дна ямы.

Полученное выражение отличается от (7) параметрами μ и v .

В несимметричной ДБС (рис. 1, в) условие баланса амплитуд (8) в общем случае не выполняется.

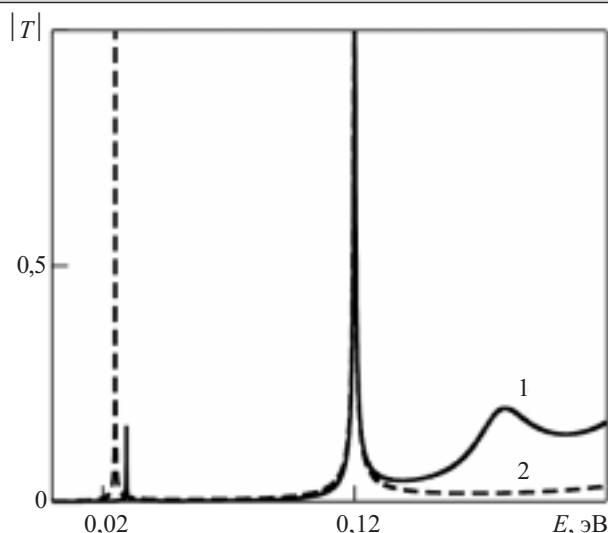


Рис. 4. Энергетическая зависимость коэффициента прохождения несимметричной (1) и симметричной (2) ДБС ($V=0,22$ эВ, $V_1=0,14$ эВ, $a=7$ нм, $b=2$ нм для несимметричной и $b=2,1$ нм для симметричной ДБС, толщина правого барьера $b_1=10$ нм, $m_b=0,5m_0$, $m_{b1}=m=0,1m_0$)

Рассмотрим частный случай: $r_1=r$ в режиме туннелирования ($E < V$, $E < V_1$). Из (10) следует, что $|Z_1|=|Z|$ и $\chi_1 b_1 = \chi b$, где индекс 1 относится к правому барьеру. Отсюда $E = (V_1 m_b - V m_{b1}) / (m_b - m_{b1})$ и $m_{b1}/m_b = b/b_1$. Значения a и $\hat{\Gamma}$ определяются из (6) и (14).

Такая несимметричная ДБС имеет лишь один уровень РТЭ, что позволяет реализовать однополосную характеристику прохождения в отличие от нескольких полос симметричной ДБС. Рис. 4 иллюстрирует подавление нежелательного отклика за счет несимметрии ДБС. Параметры совпадающих уровней несимметричной и симметричной ДБС: $E=0,12$ эВ, $\Gamma=7 \cdot 10^{-4}$ эВ.

Резонансное (безотражательное) прохождение волн имеет исключительную значимость в формировании характеристик волновых структур. Такое прохождение в режиме туннелирования — резонансное туннелирование волн — имеет необычные свойства, которые можно использовать в различных применениях, в том числе в спектральной селекции. Формирование условий перехода из резонансного туннелирования в обычное обеспечивает чрезвычайно высокую развязку сигналов в рабочей и нерабочей областях частоты или энергии.

Рассмотрим физические особенности условий резонансного прохождения (туннелирования) волн. Значение обычного, нерезонансного, коэффициента прохождения меньше единицы вследствие отражения падающей волны от неоднородностей структуры. На собственных (резонансных) частотах, соответствующих резонансному прохождению, в структуре формируется стоячая волна. Возмущения стоячей волны компенсируют неоднородности волновых возмущений на неоднородностях структуры, и падающая волна проходит среду с этими неоднородностями как однородную. В соответствии с импедансной моделью, возмущения стоячей волны согласуют среды с

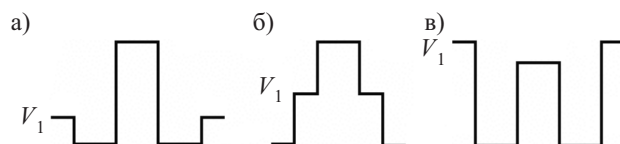


Рис. 5. Однобарьерные симметричные структуры (а — с потенциальными ямами; б — с потенциальными ступеньками V_1 и двукратный потенциал (в))

различающимися волновыми импедансами. При таком согласовании в любой точке дисперсивных слоев структуры входные импедансы в противоположных направлениях равны. Это условие может быть использовано для нахождения резонансных параметров структуры. При конструировании структур с резонансным прохождением (туннелированием) волн необходимо сформировать в структуре внутренние компенсирующие резонансные области.

В ДБС резонатор, формирующий стоячую волну, помещен внутри барьера так, что образуются два барьера с потенциальной ямой между ними. Другое решение — поместить барьер в поле стоячей волны резонатора, образованного потенциальной ямой или барьером. В результате получим симметричные однобарьерные структуры с РТЭ (рис. 5, а, б). Линия передачи, моделирующая эти структуры, аналогична линии передачи для ДБС. Как и ДБС, эти структуры образованы тремя областями — внутренней и двумя внешними. Из выражения для коэффициента отражения получим условие для собственных значений:

$$B = \frac{2ZZ_1(Z_1^2 - 1)A}{(Z^2 - Z_1^4)A^2 + Z_1^2(1 - Z^2)}, \quad (18)$$

где внутренней области соответствуют Z , B и b , внешним областям — Z_1 , A и a .

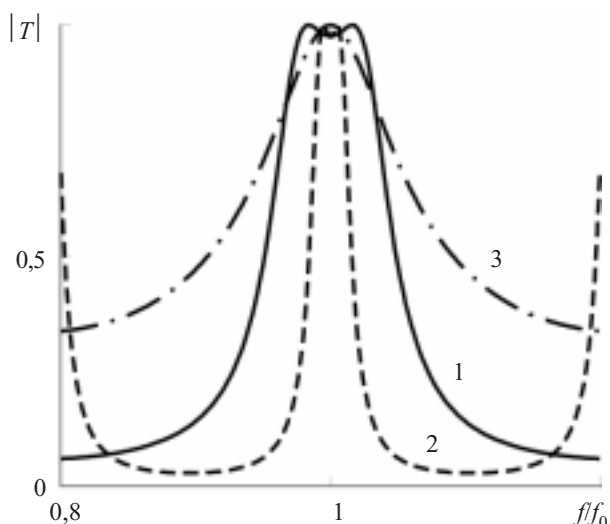


Рис. 6. Частотные зависимости коэффициента прохождения однобарьерной структуры на основе КС с пятью четвертьволновыми слоями при $a=\lambda_0/2$ (1) и $a=4\lambda_0$ (2) (λ_0 — длина волны на частоте резонансного туннелирования f_0) и КС с внутренней полуволновой резонансной полостью (3)

Однobarьерные резонансно-туннельные структуры представляют интерес для устройств обработки сигналов на различных волнах. Такие структуры обладают высокими селективными свойствами. Полоса пропускания соответствует резонансному туннелированию. Вне полосы пропускания туннельный барьер обладает чрезвычайно низкой прозрачностью, что обеспечивает значительное затухание сигнала. Туннельному барьеру соответствует кристаллоподобная структура (КС) — полупроводниковая сверхрешетка, фотонный или фононный кристалл — в режиме запрещенной зоны.

На рис. 6 приведены характеристики, иллюстрирующие избирательность однobarьерной резонансно-туннельной структуры на основе КС. Резонансные области образованы слоями с относительным импедансом $Z=10$, КС — чередующимися слоями с относительными импедансами $Z_1=5$ и $Z=10$. Избирательность однobarьерной структуры существенно превышает избирательность традиционной структуры — КС с резонансной полостью и импедансом внешней среды, равным Z : минимум коэффициента прохождения равен 0,33 для КС и соответственно 0,06 и 0,03 для однobarьерных структур 1 и 2. Зависимость 2 иллюстрирует возможность формирования характеристики с заданной полосой пропускания выбором размеров резонансных областей.

При моделировании молекул и квантовых вычислений используют двухмный потенциал (рис. 5, в), образованный, как и рассмотренные потенциалы, тремя областями. При $E > V_1$, а также при $V_1 \rightarrow \infty$ собственные значения такого потенциала определяются формулой (18).

В частном случае, когда $E > V_1 = V$ и $m_a = m_b = m$, получаем $Z=1$ и $Z_1 = \sqrt{E/(E-V)}$. Собственные значения определяются выражениями

$$\operatorname{tg} ka = 0;$$

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{E(E-V)} \operatorname{ctg} k_b b}{E - 0,5V}.$$

Если $V_1 \rightarrow \infty$ и $m_a = m_b = m$, то выражение (18) преобразуется к виду

$$\operatorname{tg}^2 ka + 2\xi \operatorname{cth} \chi b \operatorname{tg} ka + \xi^2 = 0,$$

где $\xi = k/\chi$. Собственные значения определяются выражениями $\operatorname{tg} ka = -\xi \operatorname{cth}(\chi b/2)$ и $\operatorname{tg} ka = -\xi \operatorname{th}(\chi b/2)$, что совпадает с [5], где подробно рассмотрен такой потенциал.

Потенциал на основе δ -функций — удобная, широко используемая модель. С помощью решеток δ -барьеров моделируют идеальные кристаллы, дефекты в кристаллах, таммовские поверхностные уровни [6, 7]. Модель на основе δ -барьеров применяют для ДБС [8, 9]. Как показано ниже, потенциальная δ -неоднородность в виде δ -барьера или δ -ямы своеобразно трансформирует импеданс, внося в него реактивную составляющую. Дельта-неоднородность имеет идеальные, физически нереализуемые, значения потенциала и толщины барьера или ширины ямы (соответственно ∞ и 0), но может служить моделью

реальной неоднородности с конечными значениями потенциала и ширины (например высокого тонкого барьера или глубокой узкой ямы), которую обозначим как ϵ -неоднородность.

Потенциал δ -неоднородности площадью α и шириной $\Delta \rightarrow 0$ равен $V = \alpha/\Delta$, т. е. $V \rightarrow \infty$. С учетом (1), импеданс и волновое число δ -ямы и δ -барьера, соответственно, определяются выражениями

$$Z_1 = 2\sqrt{26/\Delta m_\delta}, \quad k_a = c/\sqrt{\Delta}; \\ Z = iZ_1, \quad k_b = ik_a,$$

$$\text{где } c = \sqrt{26m_\delta}/\hbar;$$

m_δ — эффективная масса электрона в области δ -неоднородности.

Поскольку для δ -ямы $A = ic\sqrt{\Delta}$, а для δ -барьера

$B = -c\sqrt{\Delta}$, входной импеданс δ -неоднородности, согласно (2), равен $Z_0 \pm i4\alpha/\hbar$. Дельта-неоднородность вносит в импеданс реактивную составляющую: δ -барьер — индуктивную, а δ -яма — емкостную. Эта составляющая зависит лишь от площади δ -неоднородности и не зависит от эффективной массы. Поскольку емкостная составляющая компенсирует индуктивную, δ -яма компенсирует влияние δ -барьера. Полная компенсация соответствует РТЭ сквозь δ -барьер.

Нормированный входной импеданс δ -неоднородности равен

$$Z_\delta = 1 + i2\eta, \quad (19)$$

$$\text{где } \eta = \pm \alpha m/\hbar^2 k.$$

Подставив в (3) $Z=1$ и $Z_{\text{вх}}=Z_\delta$, получим коэффициент отражения от δ -неоднородности

$$R = \frac{1}{i\eta^{-1} - 1}. \quad (20)$$

При $E > 0$

$$R = \frac{1}{\pm i\hbar\alpha^{-1}\sqrt{2E/m} - 1}, \quad (21)$$

что совпадает с полученным в [8], где рассмотрен δ -барьер. Коэффициенты отражения от δ -неоднородностей, равных по площади и одинаковых по характеру, одинаковы, а различающихся по характеру — равны между собой по модулю. Таким образом, степень локализации волны δ -барьером такая же, как и δ -ямой равной площади.

Исходя из (2) и (3), коэффициент отражения от симметричной потенциальной ямы или барьера конечных размеров определяется выражением

$$R = \frac{(Z^2 - 1)C}{2Z - (Z^2 + 1)C}, \quad (22)$$

где $C=A$ — для ямы, $C=B$ — для барьера.

На рис. 7 приведены зависимости, соответствующие (21) и (22), для δ - и ϵ -неоднородностей равной площади. Максимальная относительная погрешность δ -модели барьера равна 5%, ямы — 10%. Несмотря на условие $E \ll V$, δ -модель обеспечивает хорошую аппроксимацию и при $E > V$. В диапазоне до 1 эВ при

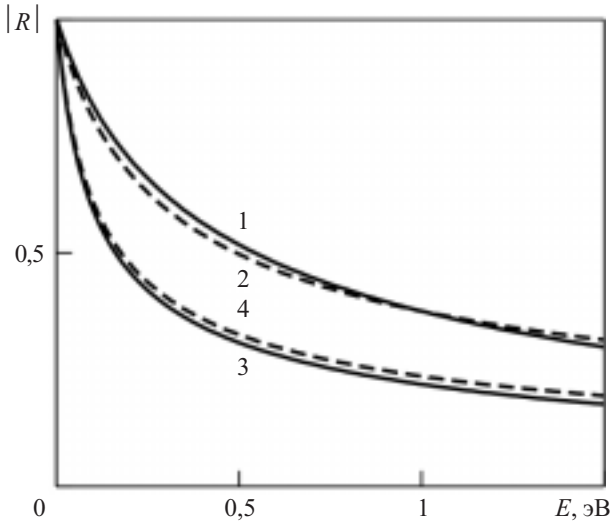


Рис. 7. Энергетические зависимости коэффициентов отражения от ϵ -неоднородностей (1, 3) и их δ -моделей (2, 4): 1 и 2 — барьер; 3 и 4 — яма.

Параметры ϵ -неоднородностей: $V=1$ эВ, $b_\epsilon=0,5$ нм, $a_\epsilon=0,3$ нм. Для ϵ - и δ -неоднородностей $m_a=m_b=m=0,1m_0$

$b_\epsilon=1$ нм максимальная погрешность δ -модели равна 8%, а при $b_\epsilon=0,5$ нм и $b=1$ нм и $m_b=m=m_0$ — соответственно 8 и 4%. Погрешность модели барьера меньше, чем модели ямы. В случае ϵ -ямы с параметрами ϵ -барьера (рис. 1) погрешность составляет 10% уже при $E=0,3$ эВ.

Согласно (21), коэффициент отражения от δ -ямы при $E < 0$ определяется выражением

$$R = \frac{1}{\hbar\alpha^{-1}\sqrt{2|E|/m-1}}.$$

Коэффициент отражения равен отношению амплитуд обратной и прямой волн на границе между внеш-

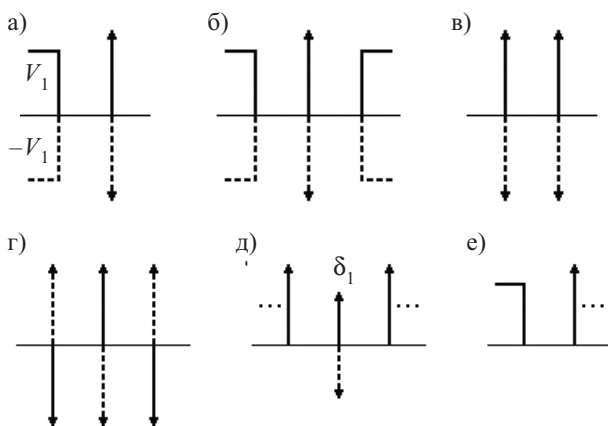


Рис. 8. Потенциальные зависимости структур с δ -неоднородностями:

а — потенциальная ступенька (вниз или вверх) и неоднородность; б — симметричная потенциальная яма (или барьер) с неоднородностью; в, г — двойные и тройные неоднородности; д — дефект кристалла, δ_1 — неоднородность, обусловленная дефектом; е — поверхность кристалла. Расстояние между ступенькой и неоднородностью, а также между неоднородностями равно а

ней средой и потенциальной ямой со стороны внешней среды. Поскольку внешняя среда реактивная, эти волны экспоненциальные. Собственному значению энергии соответствует резонанс и режим стоячих волн в потенциальной яме. По мере приближения к резонансу амплитуда обратной волны увеличивается, а прямой — уменьшается. При резонансе амплитуда прямой волны равна нулю. График зависимости $R(E)$ в этой точке имеет разрыв. При $R \rightarrow \infty$ собственное значение энергии δ -ямы равно $E_\delta = -m\alpha^2/(2\hbar^2)$, что совпадает с выражением, приведенным в [8]. Собственные значения ϵ - и δ -ямы (рис. 7) равны $E_\epsilon = -0,055$ эВ и $E_\delta = -0,059$ эВ. Погрешность δ -модели составляет 7%.

На рис. 8 представлены модели структур, имеющие характерные потенциальные зависимости с δ -неоднородностями. Модели, приведенные на рис. 8, а и б при $V_1 \rightarrow \infty$ и на рис. 8, в для идентичных δ -барьеров, часто используют в прикладных задачах. Рассмотрение ступенек конечной высоты, разных по характеру δ -неоднородностей, наполняет эти модели новым важным содержанием, в частности условиями РТЭ. Исходя из (3) и (9), несложно получить выражения для собственных значений таких потенциалов.

Коэффициент отражения от двойной δ -неоднородности, образованной одинаковыми или разными по характеру неоднородностями с разными площадями, определяется выражением

$$R = \frac{(\eta_1 - \eta_2)tgka - i(\eta_1 + \eta_2 + 2\eta_1\eta_2tgka)}{1 + (\eta_1 + \eta_2)tgka + i[\eta_1 + \eta_2 + (2\eta_1\eta_2 - 1)tgka]}, \quad (23)$$

где индексы 1 и 2 относятся к первой и второй неоднородностям.

Исходя из (9) и (20), для собственных значений имеем

$$tg2ka = \frac{\eta_1 + \eta_2}{1 - \eta_1\eta_2} \quad (24)$$

со смещением значений $2ka$ на π радиан, если $\eta_1\eta_2 < 1$ при одинаковых по характеру неоднородностях, и если $\eta_1\eta_2 > 1$ — когда неоднородности разные.

Пусть $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Для одинаковых по характеру неоднородностей $\eta_1 = \eta_2 = \eta$. В этом случае (23) и (24) преобразуются к виду

$$R = \frac{2\eta(1 + \eta tgka)}{tgka - 2\eta(1 + \eta tgka) + i(1 + 2\eta tgka)}, \quad (25)$$

$$tgka = -\eta^{-1}. \quad (26)$$

Выражение (25) следует и из (5), а выражение (26) — из (25) в случае его равенства нулю и совпадает с формулой, приведенной в [8], где рассмотрены идентичные δ -барьеры.

Для разных по характеру неоднородностей $\eta_1 = -\eta_2 = \eta$ и

$$R = \frac{2\eta(1 + i\eta)tgka}{1 - i(1 + 2\eta^2)tgka}.$$

Собственные значения, определяемые условием $tgka = 0$, совпадают со значениями резонансного прохождения над симметричными ямой или барьером.

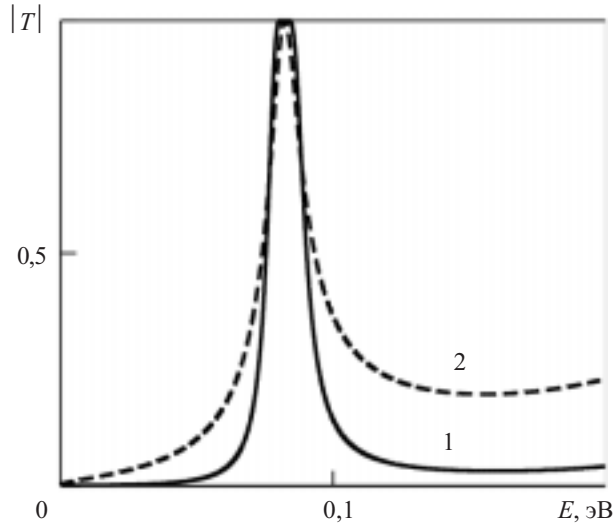


Рис. 9. Зависимости коэффициентов прохождения ϵ -неоднородностей:

1 — тройная ϵ -неоднородность (глубина ϵ -ямы 1,24 эВ, $b_\epsilon=0,4$ нм, $a=2$ нм); 2 — двойная ϵ -неоднородность (глубина ϵ -ямы 1,60 эВ, $b_\epsilon=0,2$ нм, $a=1,93$ нм).

Высота ϵ -барьера 1 эВ, $a_\epsilon=0,2$ нм, $m_a=m_b=m_0$

Из этого следует, что неоднородности, расположенные на краях ямы или барьера, позволяют повысить их избирательность.

В тройной δ -неоднородности (рис. 8, з) крайние неоднородности одинаковы по характеру, а средняя противоположна им и имеет удвоенную площадь. Так как структура симметрична, ее собственные значения соответствуют РТЭ. Обозначим через Z_+ и Z_- входные импедансы на левой границе средней неоднородности соответственно в положительном и отрицательном направлениях оси x . С учетом (2) и (3), а также комплексного сопряжения величин для отрицательного направления, имеем

$$Z_+ = \frac{Z_\delta - A}{1 - Z_\delta A} - 4i\eta, \quad Z_- = \frac{\dot{Z}_\delta + A}{1 + \dot{Z}_\delta A},$$

где η — параметр крайней неоднородности; знак « $\cdot$ » означает комплексное сопряжение.

Из равенства $Z_+ = Z_-$ получим выражения для собственных значений $\text{tg}ka = -1/(2\eta + \eta^{-1})$ и $\text{tg}ka = 0$.

Рис. 9 иллюстрирует РТЭ сквозь одиночный барьер в тройной и, для сравнения, в двойной ϵ -неоднородности. Собственные значения тройной ϵ -неоднородности равны 0,081 и 0,082 эВ, а ее δ -модели — 0,082 и 0,094 эВ.

Периодическая решетка δ -неоднородностей — наглядная модель для анализа характеристик кристаллов и КС. Моделирование периодических структур основано на теореме Блоха. Импедансный метод без этой теоремы позволяет получить известное условие для запрещенных зон, а также новые результаты, иллюстрирующие характеристики кристаллов и КС с волновых позиций.

Пусть двойная δ -неоднородность (рис. 8, в) является фрагментом неограниченной решетки δ -неоднородностей с одинаковыми входными импедансами,

равными Z . С учетом (2) и (19), входные импедансы смежных неоднородностей связаны соотношением

$$Z = \frac{Z - A}{1 - ZA} + 2i\eta.$$

Отсюда

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta, \quad (27)$$

где $\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta \text{ctg}ka$.

На **рис. 10** приведена зависимость $\psi(E)$, иллюстрирующая зонный характер пропускания неограниченной периодической структуры. При $\psi < 0$ импеданс мнимый, и решетка δ -неоднородностей становится реактивной квантово-механической средой. Эти интервалы соответствуют запрещенным зонам, обозначенным на рис. 10 штрихом на линии $\psi=0$. Разрешенные зоны обозначены сплошной линией.

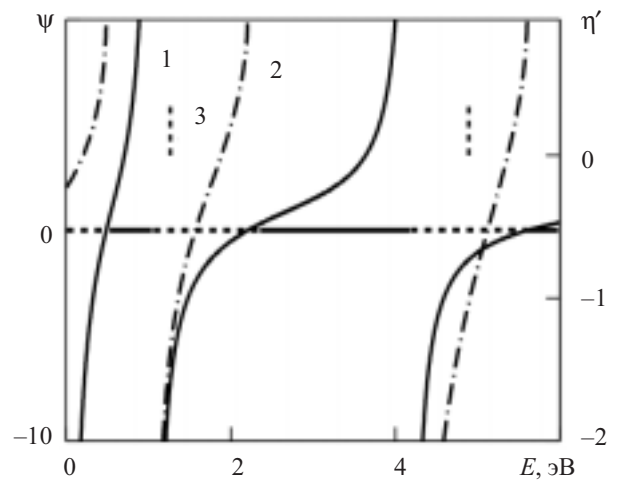


Рис. 10. Зависимости $\psi(E)$ решетки δ -барьеров (1) и уровней дефекта кристалла (2); поверхностные уровни (3) ($a=0,6$ нм, $\alpha=0,5$ эВ·нм, $V_1=20$ эВ, $m_1=m_0$, где индексом 1 обозначены параметры поверхностной потенциальной ступеньки)

Из условия $\psi < 0$ получим известное соотношение для запрещенных зон [7]

$$|\cos ka + \eta \sin ka| > 1. \quad (28)$$

В случае δ -барьеров нижние границы разрешенных зон определяются условием $\psi=0$, а верхние — условием $\text{tg}ka=0$, когда функция ψ терпит разрыв. Верхние границы совпадают с собственными значениями бесконечно глубокой потенциальной ямы. Для нижних границ имеем $\text{tg}ka=2/(\eta^{-1}-\eta)$. При $\eta \gg 1$ разрешенные зоны узкие, при $\eta \ll 1$ — широкие.

Как следует из (3) и (27), в разрешенных зонах фаза коэффициента отражения от δ -неоднородности неограниченной решетки равна $\phi = \pi n - ka$, где n — номер разрешенной зоны. Таким образом, баланс фаз (9) выполняется во всей разрешенной зоне. Разрешенные зоны — это зоны собственных значений энергии кристалла. В случае δ -барьеров разрешенные зоны формируются в результате РТЭ. Собственные значения двойной δ -неоднородности, определяемые выражением (26), обращают в ноль левую часть (28) и

расположены приблизительно в серединах разрешенных зон.

Нарушение периодичности кристалла и КС за счет внутренних и поверхностных дефектов приводит к формированию уровней в запрещенных зонах. Дефект в виде атома внедрения или замещения моделируется неоднородностью δ_1 с параметром η_1 (рис. 8, д). Исходя из равенства входных импедансов в противоположных направлениях на границе неоднородности δ_1 , получим

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\eta_1 + |Z|}{1 - \eta_1 |Z|}. \quad (29)$$

Кривые 2 на рис. 10 иллюстрируют зависимость уровней дефекта от отношения параметров дефекта и кристалла $\eta'_1 = \eta_1 / \eta$.

Дефекту в виде вакансии соответствует условие $\eta_1 = 0$. Кристалл с вакансией представляет собой резонатор с резонансной полостью шириной $2a$ и отражателями, образованными полубесконечными решетками δ -барьеров. Иначе — это потенциальная яма с входным импедансом стенок, равным Z . Из (9) или (29) следует, что собственные значения такого резонатора определяются выражением $\operatorname{tg} ka = 2\eta$, что совпадает с формулой, приведенной в [7].

Для таммовских поверхностных уровней (рис. 8, е) из условия баланса фаз или равенства нулю знаменателя коэффициента отражения при $E < V_1$ в запрещенных зонах имеем

$$\operatorname{tg} ka = \frac{2\eta}{1 + |Z_1|^2 - 2\eta |Z_1|}.$$

Если $m_1 = m$, то

$$\operatorname{tg} ka = \frac{E\eta}{0,5V_1 - \sqrt{E(V_1 - E)}\eta},$$

что также совпадает с [7]. Глубокие нижние поверхностные уровни близки к нижним границам запрещенных зон. На рис. 10 показаны два нижних поверхностных уровня.

* * *

Модель линии передачи позволяет найти аналитические выражения для резонансных параметров и характеристик различных барьерных структур наноэлектроники. Полученные выражения для ДБС удобно использовать при конструировании наноэлектронных устройств с заданными параметрами. Получение и использование аналитических зависимостей представляет большой интерес, поскольку при этом не только заметно упрощается и сокращается расчет, но и становится возможным проведение более детального анализа влияния различных факторов на резонансные параметры. Предложенная модель наглядно объясняет физику формирования спектральных характеристик КС, дает подсказки в отношении конструирования структур с требуемыми характеристиками. Аппарат теории неоднородных линий передачи позволяет анализировать квантово-механические структуры с более сложной зависимостью потенциала.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Нелин Е. А. Импедансная модель для “барьерных” задач квантовой механики // УФН.— 2007.— Т. 177, № 3.— С. 307—313.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. (Нерелятивистская теория).— М.: Физматлит, 2002.
3. Борн М., Вольф Э. Основы оптики.— М.: Наука, 1970.
4. Guo H., Diff K., Neofotistos G. et al. Time-dependent investigation on the resonant tunneling in a double-barrier quantum well // Appl. Phys. Lett.— 1988.— Vol. 53, N 1.— P. 131—133.
5. Basdevant J.-L. Lectures on quantum mechanics.— New York: Springer, 2007.
6. Лифшиц И. М., Пекар С. И. Таммовские связанные состояния электронов на поверхности кристалла и поверхностные колебания атомов решетки // УФН.— 1955.— Т. 56, вып. 4.— С. 531—568.
7. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. Часть 1.— М.: Едиториал УРСС, 2001.
8. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике.— М.: Наука, 1981.
9. Голант Е. И., Пашковский А. Б. Двухуровневые волновые функции электронов в двухбарьерных квантово-размерных структурах в электрическом поле конечной амплитуды // ФТП.— 2000.— Т. 34, вып. 3.— С. 334—339.

НОВЫЕ КНИГИ

НОВЫЕ КНИГИ

Мазор Е. А., Мачусский Е. А., Правда В. И. Радиотехника. Энциклопедия.— М.: Додэка XXI, 2009.— 944 с.

В энциклопедии помещен материал, терминологический состав которого в основном связан с материалами курсов радиотехнических дисциплин, преподаваемых в вузах. Примерно 2500 статей словаря дают толкование примерно 4000 наиболее часто употребляющихся радиотехнических терминов.

Книга может быть использована двояко, как энциклопедия по радиотехнике и как сборник 33 кратких учебников по основным радиотехническим дисциплинам.

Для студентов радиотехнических специальностей вузов, а также для студентов смежных специальностей, аспирантов, радиоинженеров, радиолюбителей.

