

©1995 г.

УРОВНИ ЭНЕРГИЙ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ С ПРЯМОУГОЛЬНЫМИ СТЕНКАМИ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ

В.Д.Дымников, О.В.Константинов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 24 июня 1994 г. Принята к печати 6 июля 1994 г.)

Получено трансцендентное аналитическое уравнение для определения спектра уровней в прямоугольной квантовой яме, имеющей дополнительный провал в середине ее широкой части. Показано, что за счет этого провала появляется возможность увеличения энергетического зазора между двумя нижними уровнями. Это позволяет понять, почему в двухбарьерных структурах со сложным профилем достигается на эксперименте большая контрастность N -образной вольт-амперной характеристики. Существенно, чтобы эффективная масса в материале провала была меньше, чем в основной части ямы.

Введение

Цель настоящей работы — построение теории энергетического спектра уровней в прямоугольной квантовой яме, в центре которой имеется дополнительный провал, как это изображено на рис. 1. Будет показано, что благодаря провалу возникают дополнительные возможности для управления положением квантовых уровней в широкой основной части ямы. Потенциальная яма с таким сложным профилем используется в резонансно-туннельных диодах (РТД), которые описаны в работах [1,2]. Ход дна зоны проводимости в двухбарьерных гетероструктурах (ДБГС), использованных в этих работах, схематически изображен на рис. 2. Внешняя область структуры и широкая часть ямы изготовлены из твердого раствора $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, барьеры — из арсенида алюминия, а провал в центре ямы — из арсенида индия. Конечность ширины барьеров мало влияет на положение уровней квантовой ямы, поэтому уровни энергий в ДБГС оказываются практически теми же, что и в квантовой яме с безгранично широкими барьерами, изображенной на рис. 1. Таким образом, область применения предлагаемой далее теории охватывает также и ДБГС сложной формы, которые являются актуальными объектами современных исследований. У таких РТД вольт-амперная характеристика (ВАХ) обладает большей контрастностью, чем у ДБГС с простым профилем, изображенным на

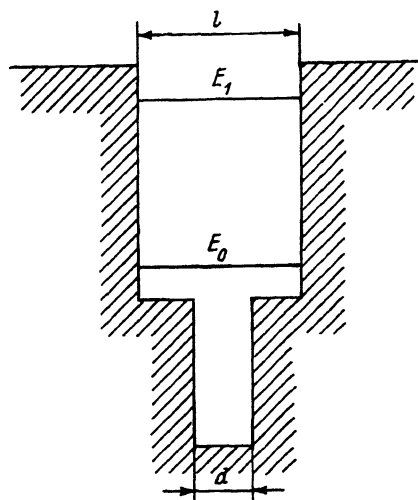


Рис. 1. Профиль дна зоны проводимости в гетероструктуре, образующей квантовую яму со сложным профилем стенок. Важным является расположение уровня основного состояния E_0 в широкой части ямы.

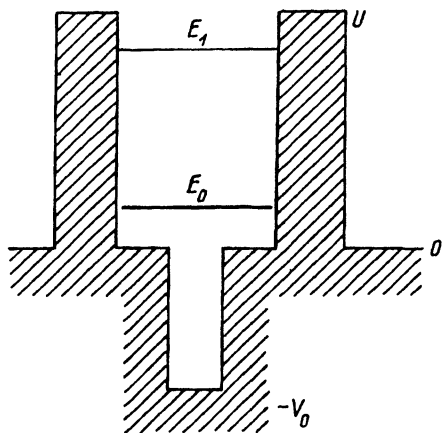


Рис. 2. Двухбарьерная гетероструктура сложного профиля. Резонансное туннелирование происходит через уровень основного состояния E_0 .

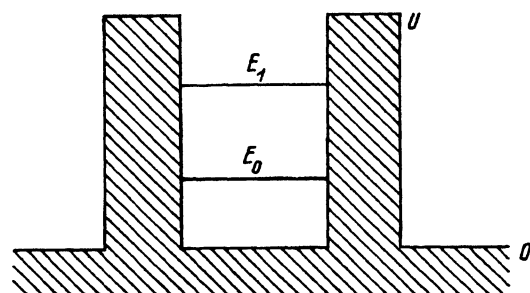


Рис. 3. Двухбарьерная гетероструктура простого профиля. Резонансное туннелирование происходит через уровень основного состояния E_0 .

рис. 3. В последнем случае отношение тока в максимуме ВАХ к току в минимуме при комнатной температуре равно 28 [3], тогда как в случае ДБГС сложной формы отношение оказывается равным 50 [2]. Возникает вопрос, с чем связано преимущество ДБГС сложного профиля. В обоих случаях материал вне ямы и в широкой части ямы один и тот же, толщины широкой части ямы также практически одинаковы, отличие состоит лишь в существовании дополнительного провала. Как отмечалось в [1], благодаря провалу уровень основного состояния опускается по сравнению со случаем простой ямы на энергию примерно от 0.2 до 0.1 эВ. В литературе отсутствует уравнение для нахождения положения уровня и приводятся лишь указанные выше численные результаты. Кроме того, не упоминается, что происходит с уровнем возбужденного состояния. Наша теория показывает, что этот уровень смещается, как ни странно, вверх, что обусловлено меньшей величиной эффективной массы электрона в области провала. Указанные изменения в энергетическом спектре ямы сложной формы и приводят в конечном счете к повышению отношения максимума тока к минимуму [4]. Существен-

но, что расстояние между основным и возбужденным уровнями увеличивается и этот интервал энергий преобразуется в соответствующий интервал напряжений смещения на диоде. Чем больше интервал напряжений, тем глубже упадет ток в минимуме ВАХ. Указанные выше изменения энергетического спектра квантовых уровней относятся к тому случаю, когда уровень основного состояния лежит выше дна в широкой части ямы. Энергетическое положение дна зоны во внешней части ДБГС («горизонт») совпадает с дном в широкой части ямы. Если используется туннелирование через основное состояние ямы, то этот уровень должен лежать выше горизонта. В нашей работе получен критерий, определяющий соотношение между параметрами ямы, при которых уровень лежит выше или ниже горизонта. В случае, если туннелирование происходит через возбужденное состояние, уровень основного состояния лежит ниже горизонта. Такая структура может быть использована для создания резонансно-туннельного транзистора. Электроны, находящиеся в основном состоянии, формируют проводящую базу этого транзистора.

1. Дисперсионные уравнения для основного и возбужденного состояний в прямоугольной яме со сложным профилем стенок

Рассмотрим решение уравнения Шредингера в областях 1, 2, 3, определяемых условиями:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{область 1,} & |x| \leq d/2; \\ \text{область 2,} & d/2 \leq |x| \leq l/2; \\ \text{область 3,} & l/2 \leq |x|. \end{array} \right\} \quad (1)$$

1.1. Для решений симметричного типа в области $x \geq 0$ можно записать выражения

$$\Psi_1 = \cos qx, \quad \Psi_2 = A \cos(kx + \varphi), \quad \Psi_3 = B e^{-\kappa(x-l/2)}, \quad (2)$$

где

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \quad \frac{\hbar^2 q^2}{2m_d} = E + V, \quad \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_1} = U - E. \quad (3)$$

Здесь E — искомая энергия уровня, отсчитанная от дна широкой части ямы. На границах раздела областей мы используем граничные условия, обеспечивающие непрерывность плотности частиц и плотности потока частиц:

$$\Psi_1 = \Psi_2 \Big|_{x=d/2}, \quad \frac{1}{m_d} \frac{d\Psi_1}{dx} \Big|_{x=d/2} = \frac{1}{m} \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=d/2}, \quad (4)$$

$$\Psi_2 = \Psi_3 \Big|_{x=l/2}, \quad \frac{1}{m} \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=l/2} = \frac{1}{m_1} \frac{d\Psi_3}{dx} \Big|_{x=l/2}, \quad (5)$$

где m_d , m , m_1 — эффективные массы электрона в областях 1, 2, 3 соответственно. Граничные условия (4) приводят к следующему уравнению:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{kd}{2} + \phi \right) = \frac{qm}{km_d} \operatorname{tg} \left(\frac{qd}{2} \right). \quad (6)$$

Граничные условия (5) дают уравнение

$$\operatorname{tg} \left(\frac{kl}{2} + \phi \right) = \frac{m}{m_1} \frac{\kappa}{k}. \quad (7)$$

В уравнения (5) и (6) входят две неизвестные — энергия E (или волновой вектор k) и фаза волновой функции ϕ . Последнюю можно исключить, если взять arctg от уравнений (6) и (7) и вычтуть получившиеся аргументы друг из друга. Это дает дисперсионное уравнение для энергии основного состояния

$$kl/2 = F_0(k), \quad (8)$$

где

$$F_0(k) = \operatorname{arctg} \left(\frac{m\kappa}{m_1 k} \right) - \operatorname{arctg} \left[\frac{mq}{m_d k} \operatorname{tg} \left(\frac{qd}{2} \right) \right] + \frac{kd}{2}. \quad (9)$$

Проще всего решать уравнение (8) графически, построив $F_0(k)$ и левую часть (8) как функции аргумента $z = kl/2$, как это показано на рис. 4 сплошными кривыми. Левая часть (8) представляется биссектрисой квадранта, идущей из начала координат. Функция $F_0(k)$ изображена сплошной кривой 1. Точка пересечения ее с биссектрисой, обозначенная темным кружком, соответствует основному состоянию E_0 в сложной яме (рис. 1). Штриховая кривая 1' изображает функцию $F_0(k)$ при $d = 0$, т.е. в отсутствие провала. Точка пересечения ее с биссектрисой обозначена светлым кружком на рис. 4, и она определяет положение основного уровня E_0 в простой яме (рис. 3). Следует отметить, что с

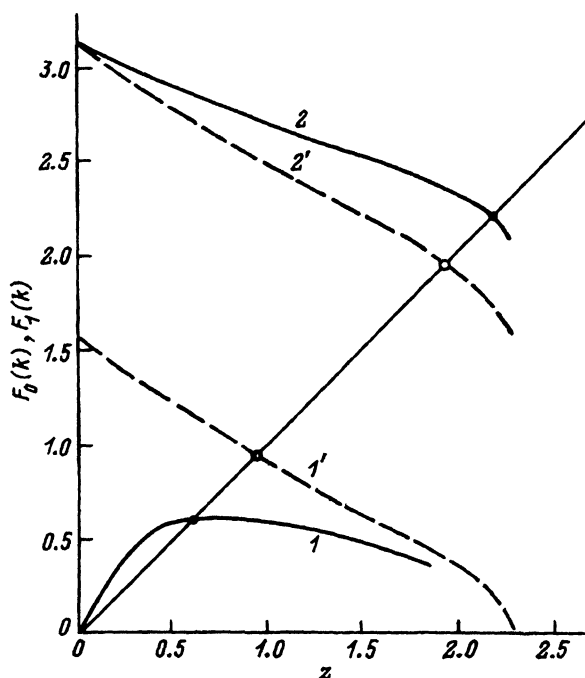


Рис. 4. Графическое решение дисперсионных уравнений (8) и (15) для определения энергий основного и возбужденного уровней в квантовой яме. 1, 2 соответствуют яме сложной формы на рис. 1 и 2, 1', 2' — яме простой формы на рис. 3. Точки пересечения этих кривых с биссектрисой дают положения уровней. Видно, что в яме сложной формы происходит раздвижка уровней.

увеличением ширины провала d и его глубины V основной четный уровень опускается, и при некоторых параметрах сложной ямы он может быть выдавлен из широкой части ямы. В этом случае уравнение (8) не будет иметь вещественных положительных решений, и графически это будет означать, что кривая I лежит под биссектрисой квадранта, пересекая ее только в начале координат. Для существования основного четного состояния в широкой области ямы необходимо, чтобы кривая I пересекла биссектрису в точке, отличной от начала координат. Последнее осуществляется тогда, когда производная функции $F_0(k)$ по переменной z в точке $z = 0$ больше единицы. Отсюда следует аналитическое условие существования основного четного уровня в широкой части потенциальной ямы:

$$d \left[1 + \frac{m_d}{m} \sqrt{\frac{E_d}{V}} \left(\operatorname{ctg} \sqrt{\frac{V}{E_d}} - \sqrt{\frac{m_1 V}{m_d U}} \right) \right] > l, \quad (10)$$

где

$$E_d = \frac{2\hbar^2}{m_d d^2} \quad (11)$$

— энергия, связанная с шириной провала. Мощность провала определяется отношением V/E_d . Если это отношение велико, то в провале будет помещаться много уровней. В интересующем нас случае ситуация обратная, т.е. это отношение должно быть достаточно мало.

1.2. Рассмотрим теперь первый возбужденный уровень в сложной яме. Он соответствует нечетному состоянию, волновая функция которого в областях 1, 2, 3 для положительных значений x записывается следующим образом:

$$\Psi_1 = \sin qx, \quad \Psi_2 = A \sin(kx + \phi), \quad \Psi_3 = B e^{-x(x-l/2)}. \quad (12)$$

Производя сшивку волновых функций на границах $x = d/2$, $x = l/2$ с помощью формул (4), (5), получаем следующие уравнения:

$$\operatorname{tg} \left(\frac{kd}{2} + \phi \right) = \frac{m_d k}{m q} \operatorname{tg} \frac{qd}{2}, \quad (13)$$

$$\operatorname{tg} \left(\frac{kl}{2} + \phi \right) = -\frac{m_1 k}{m \kappa}. \quad (14)$$

Неизвестную фазу ϕ в (13), (14) можно исключить так же, как и в случае основного состояния, т.е. беря arctg от левых и правых частей уравнений (13), (14) и вычитая потом одно выражение из другого. В итоге получаем

$$kl/2 = F_1(k), \quad (15)$$

где

$$F_1(k) = \pi - \operatorname{arctg} \frac{m_1 k}{m \kappa} - \operatorname{arctg} \left(\frac{m_d k}{m q} \operatorname{tg} \frac{qd}{2} \right) + \frac{kd}{2}. \quad (16)$$

При написании формулы (16) мы учли, что первый возбужденный уровень лежит в области энергий, удовлетворяющей неравенству

$$\pi/2 < kl/2 < \pi. \quad (17)$$

Уравнение (15), как и уравнение (8), удобно решать графически, рассматривая левую и правую части (15) как функции переменной $z = kl/2$. Графическое решение уравнения (15) приведено на рис. 4. Функции $F_1(k)$ соответствует верхняя сплошная кривая 2, и точка пересечения ее с биссектрисой обозначена темным кружком. Именно значением абсциссы в этой точке и определяется энергия E_1 первого возбужденного состояния над горизонтом в сложной яме (рис. 1). На рис. 4 штриховая кривая 2' соответствует функции $F_1(k)$ при $d = 0$. Точка пересечения ее с прямой обозначена светлым кружком, и значение аргумента в этой точке определяет энергию возбужденного состояния E_1 в простой яме (рис. 3), когда щель с шириной d отсутствует. Из рис. 4 видно, что возбужденный уровень в сложной яме располагается выше, чем в простой. Этот факт является специфическим для гетероструктур и обусловлен различием масс m_d и m . Математически сдвиг уровня вверх за счет щели шириной d объясняется положительностью функции

$$F_{1d}(k) = \frac{kd}{2} - \arctg \left(\frac{m_d k}{mq} \operatorname{tg} \frac{qd}{2} \right) \quad (18)$$

в области энергий, соответствующих неравенству (17). При малых d

$$F_{1d}(k) \simeq \frac{kd}{2} - \arctg \left(\frac{m_d kd}{m} \right) \simeq \frac{kd}{2} \left(1 - \frac{m_d}{m} \right), \quad (19)$$

и поскольку $m_d < m$, функция $F_{1d}(k)$ положительна.

Физическая причина смещения возбужденного уровня заключается в том, что гамильтониан частицы в сложной яме отличается от гамильтониана в простой яме не только потенциальной энергией, но также и кинетической энергией в области $|x| < d/2$ из-за различия эффективных масс m_d , m . Если решать задачу о смещении уровня по теории возмущений, то сдвиг уровня ΔE будет даваться выражением

$$\Delta E = |C|^2 \int_{-d/2}^{d/2} \sin kx \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_d} - \frac{\hat{p}^2}{2m} - V \right) \sin kx dx. \quad (20)$$

Здесь C — нормировочная постоянная, \hat{p} — оператор импульса, V — энергетическое расстояние от горизонта до дна потенциальной щели шириной d в сложной яме ($V > 0$). Очевидно, изменение потенциального профиля простой ямы за счет провала глубиной V должно приводить к понижению уровня, в то время как разность кинетических энергий при $m_d < m$ способствует подъему уровня. Для несимметричного состояния с узлом в точке $x = 0$ второе обстоятельство проявляется сильнее, и потому возбужденный уровень в сложной яме располагается выше возбужденного уровня в простой яме. Для симметричного состояния, рассмотренного выше, волновая функция не имеет узлов и сильнее проявляется эффект, связанный с провалом потенциального профиля. По этой причине основной уровень в простой яме располагается выше, чем в сложной.

2. Заключение

Прежде всего хотелось бы еще раз подчеркнуть, что обнаруженная в настоящей работе раздвижка уровней основного и возбужденного состояний в широкой части ямы с провалом в центре дает возможность увеличения контрастности ВАХ в резонансно-туннельных структурах. Уровни энергий E_1 , E_0 в простой яме (рис. 3) при значениях параметров, приведенных далее, равны соответственно 0.94 и 0.22 эВ. В сложной яме (рис. 2) за счет провала эти же уровни соответствуют значениям 1.22 и 0.09 эВ.

Параметры структур, использованные при расчете, следующие. Эффективная масса вне структуры и в широкой части ямы — $m = 0.046m_0$ (m_0 — масса свободного электрона). Высота барьера из AlAs, соответствующая туннелированию по Γ -долине, — $U = 1.32$ эВ, а эффективная масса в барьере — $m_1 = 0.124m_0$. Эффективная масса в провале из чистого арсенида индия — $m_d = 0.023m_0$. Глубина провала относительно дна широкой части ямы — $V = 0.24$ эВ. Ширина провала, соответствующая шести деформированным монослоям арсенида индия, была принята $d = 18.4$ Å. Ширина основной части ямы l равна ширине провала и удвоенной ширине h слоя твердого раствора $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ в яме: $l = d + 2h$. Ширина $h = 9.0$ Å соответствует трем деформированным монослоям твердого раствора, так что $l = 36.4$ Å. Отметим, что данное значение l мало отличается от ширины ямы простой формы, изображенной на рис. 3, которая исследовалась в работе [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 93-02-2254.

Авторы выражают благодарность Л.В. Чернышевой за помощь в выполнении работы.

Список литературы

- [1] T.P.E. Broekaert, W. Lee, C.G. Fonstad. Appl. Phys. Lett., **53**, 1545 (1988).
- [2] J.H. Smet, T.P.E. Broekaert, C.G. Fonstad. J. Appl. Phys., **71**, 2475 (1992).
- [3] D.H. Chow, J.N. Shulman, E. Ozbay, D.M. Bloom. Appl. Phys. Lett., **61**, 1685 (1992).
- [4] И.Н. Долманов, В.И. Толстихин, В.Г. Еленский. Зарубежн. радиоэлектрон., вып. 9, 66 (1990).

Редактор Л.В. Шаронова

Energy levels in a rectangular quantum well with shape peculiarities

V.D. Dymnikov, O.V. Konstantinov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021, St.Petersburg, Russia

The transcendental equation for the electron energy spectrum was obtained for a rectangular quantum well having an additional deepening in the central part of the well. It is shown that this deepening leads to increasing the distance between two lowest levels in the well. This fact makes it possible to better understand the experimentally found increasing of the peak-to-valley current ratio of double barrier structures with the additional deepening.