

УДК 530:145

© 1992

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ДВУХ КВАНТОВЫХ ЯМ

В. Я. Демиховский, С. С. Савинский

Сообщается о результатах численного моделирования процесса резонансного туннелирования в системе, состоящей из двух квантовых ям, разделенных барьером. В расчетах использованы параметры, характерные для гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Резонансное туннелирование электронов в гетероструктурах типа $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ весьма активно изучается в последние годы, что связано прежде всего с большими перспективами использования этого явления в различных устройствах (лазерах, фотодетекторах, диодах и транзисторах) [1, 2]. В настоящей работе рассматривается система, состоящая из двух пленок, в которых энергия поперечного движения квантована. Пленки разделены потенциальным барьером. Контакты, через которые на пленки подается разность потенциалов, находятся вне области барьера. Электрон через контакт попадает на энергетический квазиуровень пленки и затем, двигаясь вдоль пленки под действием слабого электрического поля, достигает области, где расположен барьер и возможно туннелирование в соседнюю пленку. Энергетическая структура такой системы показана на рис. 1. В 1963 г. Тавгером и одним из авторов [3] было показано, что вольт-амперная характеристика такого диода состоит из ряда пиков, положение которых определяется условием $eV = E^* - E^{**}$, где e — заряд электрона, V — разность потенциалов, E^* и E^{**} — квазиуровни в изолированных пленках. Целью настоящей работы является изучение механизма резонансного одноэлектронного туннелирования и определение основных характеристик этого процесса в конкретной гетероструктуре.

Численно решались стационарное и нестационарное одномерное уравнение Шредингера в потенциале, изображенном на рис. 1. В гамильтониане системы было учтено различие эффективных масс m в области ям (слои GaAs) и барьера ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) [4]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + U(x), \quad (1)$$

а граничные условия, следующие из (1), на границе пленки и барьера имели вид

$$\Psi_p = \Psi_b, \quad \frac{1}{m_p} \frac{d\Psi_p}{dx} = \frac{1}{m_b} \frac{d\Psi_b}{dx}$$

(здесь \hbar — постоянная Планка). Разностное выражение гамильтониана (1), используемое при решении стационарного и нестационарного уравнений Шредингера, имело вид [5]

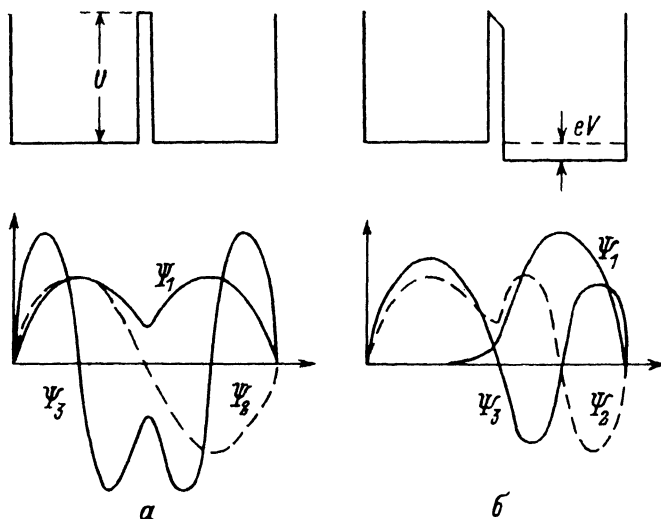


Рис. 1. Двойная потенциальная яма и волновые функции стационарных состояний в ней.

a — разность потенциалов равна нулю, *б* — разность потенциалов соответствует максимальному сближению уровней E_2 и E_3 .

$$H\Psi_j = -\frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left[\frac{\Psi_{j+1}}{m_{j+1} + m_j} + \frac{\Psi_{j-1}}{m_{j-1} + m_j} - \frac{\Psi_j}{m_{j+1} + m_j} - \frac{\Psi_j}{m_{j-1} + m_j} \right] + U_j\Psi_j, \quad (2)$$

где Δx — шаг по пространственной координате; j — пространственный индекс; в слое GaAs $m = 0.067m_0$, а в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $m = 0.092m_0$; высота барьера U в слое $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ равна 0.3 эВ, что соответствует $x = 0.3$; m_0 — масса свободного электрона.

Предварительно были рассчитаны энергетический спектр и стационарные функции при различных значениях разности потенциалов (рис. 1, 2). При $V = 0$, как известно, уровни расположены парами, так что расстояние между ними определяется прозрачностью барьера. Положение пары приблизительно соответствует энергетическому уровню изолированной ямы. С ростом разности потенциалов все энергетические уровни понижаются (положение дна левой ямы считается неизменным), причем имеет место немонотонная зависимость положения энергетических уровней в области положительных энергий от напряжения. В тот момент, когда уровень E_{n+1} приблизится к уровню E_n , происходит их «расталкивание», после чего E_n начинает быстро опускаться, а движение E_{n+1} замедляется (рис. 2).

Стационарные волновые функции изменяются при этом следующим образом: при понижении энергетического уровня число осцилляций волновой функции в левой яме уменьшается, а в правой — увеличивается. В частности, в момент, когда 2-й и 3-й уровни сближаются, функция основного состояния Ψ_1 локализована в основном в правой яме, а функции Ψ_2 и Ψ_3 в левой яме не имеют нулей, а правой яме осциллируют идентично и с точностью до знака практически совпадают (рис. 1, б). Численный расчет показывает, что аналогичный вид имеют функции Ψ_{n+1} и Ψ_n всякий раз, когда соответствующие энергетические уровни максимально приближены друг к другу.

Теперь рассмотрим эволюцию начального состояния, отличного от нуля в левой яме $\Psi(x, 0) = \sqrt{2/a} \sin(\pi x/a)$, описывающего при $t=0$ электрон, локализованный в левой яме. При том значении потенциала V , когда произойдет

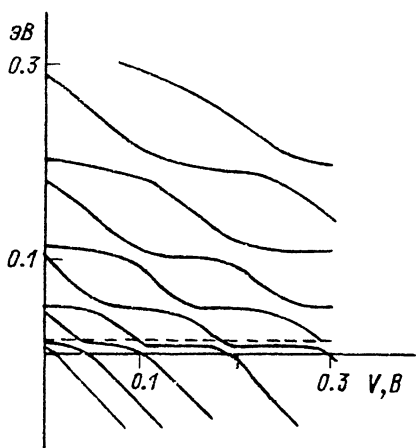


Рис. 2. Энергетические уровни структуры, изображенной на рис. 1, при различных значениях потенциала V .

Ширина потенциальных ям $a = 20$ нм, ширина барьера 1.6 нм, высота барьера $U = 0.3$ эВ. Начало отсчета энергии совпадает с дном левой ямы. Штрихом показана энергия основного состояния в изолированной бесконечно глубокой яме той же ширины.

Сближение двух уровней и функции Ψ_{n+1} и Ψ_n в левой яме будут близки по форме к $\Psi(x, 0)$, а в правой яме будут практически совпадать, решение нестационарного уравнения Шредингера можно приближенно записать как

$$\Psi(x, t) \approx (\Psi_n \exp(-iE_n t/\hbar) + \Psi_{n+1} \exp(-iE_{n+1} t/\hbar)) / \sqrt{2}.$$

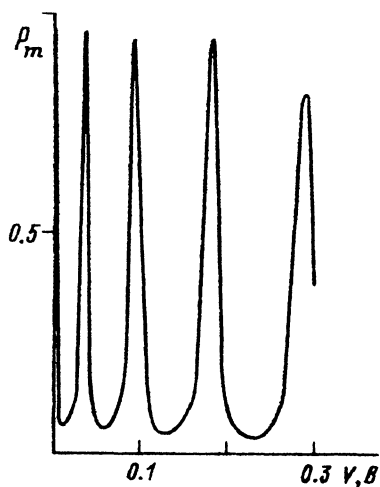


Рис. 4. Зависимость максимальной вероятности P_m обнаружить электрон в правой яме от разности потенциалов V .

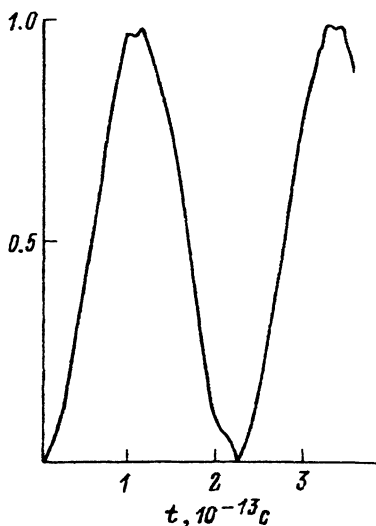


Рис. 3. Зависимость вероятности обнаружить электрон в правой яме от времени.

Вероятность обнаружить электрон в одной из ям при этом будет осциллировать с частотой, равной $(E_{n+1} - E_n)/\hbar$. В то же время при произвольном V вклад в разложение $\Psi(x, t)$ дают слагаемые с различными n и электрон при $t > 0$ может не перейти в правую яму.

Зависимость вероятности обнаружить электрон в правой яме от времени $P(t)$, определенная численно, представлена на рис. 3. Расчет проведен для ям шириной 20 нм, разделенных барьером 1.6 нм и нулевой разности потенциалов. Из этого рисунка видно, что ярко выражены основной период осцилляций $P(t)$, связанный с расщеплением с меньшими периодами и амплитудами, соответствующие переходам между состояниями с $n > 2$. Максимальная вероятность обнаружить электрон в правой яме P_m несколько меньше единицы.

На рис. 4 представлена зависимость P_m от разности потенциалов, которая имеет явно резонансный характер. Сравнение рис. 4 с рис. 2 показывает, что положение каждого пика соответствует напряжению, при котором расстояние между двумя соседними уровнями минимально. Ширина пиков примерно равна минимальной разности энергий и возрастает с номером пика, а высота пиков при этом уменьшается.

Таким образом, проведенное моделирование подтверждает резонансный характер туннелирования в системе двух ям и дает его основные параметры. Результаты данной работы необходимо учитывать при расчетах вольт-амперных характеристик реальных структур.

Список литературы

- [1] Esaki L. // IEEE J. Quantum Electron. 1986. V. QE-22. P. 1611—1623.
- [2] Holohyak J. N., Kolbas Jr. R. M., Dupuis R. D., Dapkus P. D. // IEEE J. Quantum Electron. 1980. V. QE-16. P. 170—185.
- [3] Тавреп Б. А., Демиховский В. Я. // УФН. 1968. Т. 96. С. 61—86.
- [4] BenDaniel D. J., Duke C. B. // Phys. Rev. 1966. V. 152. P. 683—692.
- [5] Juang C., Kuhn K. J., Darling R. B. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 12047—12053.

Удмуртский государственный университет
Ижевск

Поступило в Редакцию
13 февраля 1992 г.