

# Плоские двухбарьерные резонансно-туннельные структуры: резонансные энергии и резонансные ширины квазистационарных состояний электрона

© Н.В. Ткач<sup>¶</sup>, Ю.А. Сети

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,  
58012 Черновцы, Украина

(Получена 8 декабря 2008 г. Принята к печати 22 января 2009 г.)

Предложена теория резонансных энергий и ширин квазистационарных состояний на основе функции распределения плотности вероятности нахождения электрона в двухбарьерной резонансно-туннельной структуре с использованием трансфер-матрицы и  $S$ -матрицы рассеяния в моделях прямоугольных и  $\delta$ -образных потенциалов с различными эффективными массами в слоях наносистемы.

На примере наносистемы  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  выполнен анализ эволюции спектральных параметров квазистационарных состояний электрона в зависимости от геометрических размеров резонансно-туннельной структуры, рассчитанных тремя разными методами. Показано, что поскольку по отношению к более реалистичной модели прямоугольных потенциалов  $\delta$ -барьерная модель завышает величины резонансных ширин в десятки раз, она может быть использована только для грубых оценок.

PACS: 73.21.Fg, 73.90.+f

## 1. Введение

Изучению резонансно-туннельных структур (РТС) уделяется все большее внимание не только из-за чисто академического интереса к исследованию физических процессов в открытых системах, но и в связи с тем, что на их основе уже созданы и работают каскадные лазеры терагерцевого диапазона, резонансно-туннельные диоды и другие наностройства, которые имеют уникальные перспективы для использования в наноприборах [1–4].

Задачей теории РТС является вычисление динамической проводимости  $\sigma(\omega)$  или же тока  $j(\omega)$  отклика системы на внешнее воздействие. Теория создавалась в разных моделях с использованием различных математических способов [5–14] решения полного уравнения Шредингера для системы электронов, взаимодействующих с электромагнитным полем в наноструктуре. Независимо от выбора модели РТС и методов расчета ее физических характеристик в теории содержится и используется информация о спектральных параметрах (резонансных энергиях и ширинах) квазистационарных состояний (КСС) электрона в этой системе.

Для расчета спектральных параметров электрона в РТС в большинстве работ используется метод эффективных масс [5–16] и модель прямоугольных потенциальных барьеров [15,16]. С целью упрощения весьма громоздких аналитических расчетов часто прямоугольные барьеры аппроксимируются  $\delta$ -образными [5–13], хотя априори ясно, что такая аппроксимация должна приводить к значительной потере точности определяемых спектральных параметров КСС электрона. Так как известно, что величина динамической проводимости очень чувствительна

к изменению величин резонансных энергий (РЭ) и резонансных ширин (РШ) КСС, необходимо выяснить, возникают ли существенные погрешности величин спектральных параметров, определяемые  $\delta$ -барьерной моделью, по сравнению с моделью прямоугольных потенциалов в РТС с типичными физическими и геометрическими параметрами.

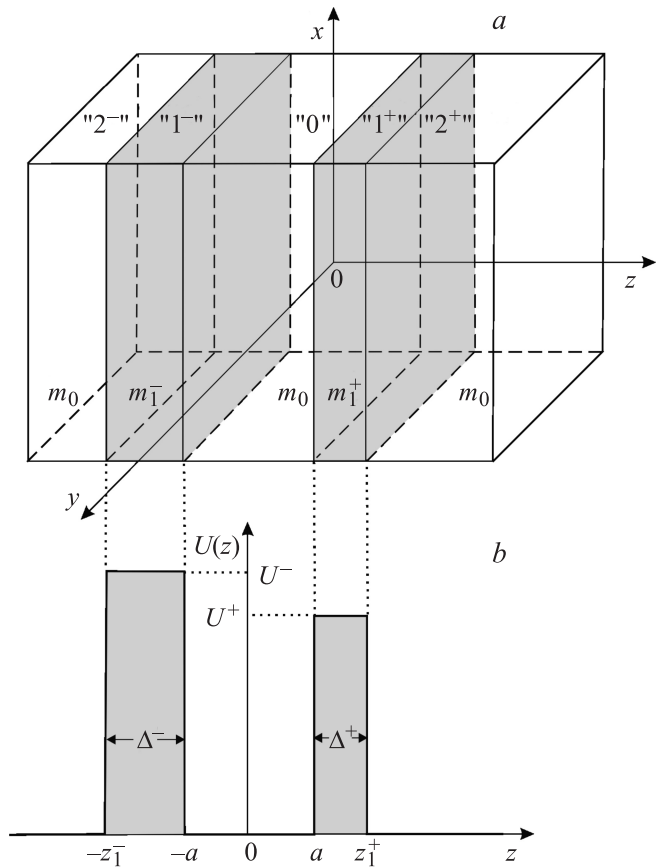
В некоторых теоретических работах [5–9] расчет или оценка РЭ и РШ КСС электрона выполнялся через коэффициент прозрачности РТС. Однако, согласно общей теории рассеяния [17], оба спектральных параметра КСС определяются комплексными полюсами  $S$ -матрицы, а также, как будет показано в предлагаемой работе, они определяются соответствующими параметрами функции распределения  $W$  (по энергии) плотности вероятности нахождения электрона в РТС.

## 2. Гамильтониан, $S$ - и $T$ -матрицы. Спектральные параметры КСС электрона в плоской открытой ДБРТС

Рассматривается плоская открытая двухбарьерная резонансно-туннельная структура (ДБРТС) с геометрическими параметрами, указанными на рис. 1. Считая, что величины постоянных решеток ( $a_0, a_1^\pm$ ) и диэлектрических проницаемостей составляющих наносистемы отличаются слабо (например, для структур на основе  $\text{InAs}$ ,  $\text{GaAs}$ ,  $\text{AlAs}$ ), для электрона будем использовать модель эффективных масс ( $m_0, m_1^\pm$ ) и прямоугольных потенциалов.

В декартовой системе координат, с началом в середине пленки-ямы с осью  $OZ$ , перпендикулярной к плоскостям всех слоев, эффективная масса и потенциальная

<sup>¶</sup> E-mail: ktf@chnu.edu.ua



**Рис. 1.** Геометрическая (а) и энергетическая (б) схемы ДБРТС.

энергия электрона имеют вид

$$m(z) = \begin{cases} m_0, & 0 \leq |\pm z| \leq a, \quad z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty; \\ m_1^\pm, & a \leq |\pm z| \leq z_1^\pm \end{cases}; \quad (1)$$

$$U(z) = \begin{cases} 0, & 0 \leq |\pm z| \leq a, \quad z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty; \\ U^\pm, & a \leq |\pm z| \leq z_1^\pm \end{cases}.$$

Поэтому решение стационарного уравнения Шредингера

$$H\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (2)$$

с гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{m(z)} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right) + U(z) \quad (3)$$

следует искать в форме

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(z)\Psi_{\mathbf{k}_\parallel}(x, y) = \frac{1}{L} \Psi(z)e^{i\mathbf{k}_\parallel(x\mathbf{n}_x + y\mathbf{n}_y)}. \quad (4)$$

Здесь  $\mathbf{k}_\parallel$  — квазиимпульс электрона в плоскости XOY, а  $L$  — длина основной области в этой плоскости.

Теперь для функции  $\Psi(z)$  получается уравнение

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U_{\mathbf{k}_\parallel}(z) \right) \Psi(z) = E\Psi(z), \quad (5)$$

в котором

$$U_{\mathbf{k}_\parallel}(z) = U(z) + \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m(z)} = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_0}, & 0 \leq |\pm z| \leq a, \quad z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty \\ \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_1^\pm} + U^\pm, & a \leq |\pm z| \leq z_1^\pm \end{cases} \quad (6)$$

играет роль эффективной потенциальной энергии, зависящей от величины  $k_\parallel$ .

Отметим, что вследствие разницы между эффективными массами электрона в барьерах ( $m_1^\pm$ ) и ямах ( $m_0$ ), при фиксированном значении  $k_\parallel$  величины эффективных потенциалов  $\tilde{U}$  в ямах и барьерах перенормируются по-разному. Поскольку, как правило,  $m_1^\pm > m_0$ , величины эффективных потенциальных барьеров  $\tilde{U}^\pm = U^\pm - \hbar^2 k_\parallel^2 (m_1^\pm - m_0) / 2(m_1^\pm + m_0)$  с увеличением  $k_\parallel$  уменьшаются, что должно вызывать уменьшение времени жизни (увеличение РШ) КСС электрона.

Чтобы исследовать спектральные параметры КСС электрона в ДБРТС, будем искать решение уравнения (5) методом трансфер-матрицы [18], выполняя аналитический расчет двумя близкими, но, как будет видно далее, несколько различными способами: а) вычисляя коэффициент прозрачности  $D$ ; б) методом  $S$ -матрицы рассеивания. В обоих подходах запись волновой функции отличается только во внешней  $\pm 2$  области ( $z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty$ ) ДБРТС, поэтому компактно волновая функция может быть представлена в такой форме:

$$\Psi_{\{S\}_D}(k_\perp z) = \begin{cases} \Psi_0(z) = A_0 e^{ik_\perp z} + B_0 e^{-ik_\perp z}, & 0 \leq |\pm z| \leq a \\ \Psi_1^\pm(z) = A_1^\pm e^{\chi^\pm z} + B_1^\pm e^{-\chi^\pm z}, & a \leq |\pm z| \leq z_1^\pm \\ \Psi_{2S}^\pm(z) = B_2^\pm (e^{\mp ik_\perp z} + S e^{\pm ik_\perp z}), & z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty \\ \Psi_{2D}^\pm(z) = A_2^\pm e^{ik_\perp z} + F_2^\pm e^{-ik_\perp z}, & z_1^\pm \leq |\pm z| \leq \infty \end{cases}, \quad (7)$$

где

$$k_\perp = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2} - k_\parallel^2}, \quad \chi^\pm = \sqrt{\frac{2m_1^\pm}{\hbar^2} (U^\pm - E) - k_\parallel^2}. \quad (8)$$

Граничные условия

$$\Psi_i(\pm z_i) = \Psi_{i+1}(\pm z_i);$$

$$\frac{1}{m_i} \frac{d\Psi_i(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_i} = \frac{1}{m_{i+1}} \frac{d\Psi_{i+1}(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_i} \quad (i = 0, \pm 1) \quad (9)$$

и условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'_\perp}^*(z) \Psi_{k_\perp}(z) dz = \delta(k_\perp - k'_\perp) \quad (10)$$

однозначно определяют все неизвестные коэффициенты  $A_i^\pm$ ,  $B_i^\pm$ ,  $F_2^\pm$  и  $S$ -матрицу рассеяния.

В нашем случае трансфер-матрица  $T$  [18] определяется произведением

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} = (T_-^{01} T_-^{12})^{-1} T_+^{01} T_+^{12}, \quad (11)$$

где

$$T_\pm^{01} = \begin{pmatrix} t_{\pm 11}^{01} & t_{\pm 12}^{01} \\ t_{\pm 21}^{01} & t_{\pm 22}^{01} \end{pmatrix}, \quad T_\pm^{12} = \begin{pmatrix} t_{\pm 11}^{12} & t_{\pm 12}^{12} \\ t_{\pm 21}^{12} & t_{\pm 22}^{12} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Аналитический расчет матричных элементов  $T_\pm^{ij}$ -матрица дает такой результат:

$$t_{\pm 11}^{01} = (t_{\pm 12}^{01})^* = t_{\pm 22}^{01} = (t_{\pm 21}^{01})^* = \frac{1}{2} \left( 1 \mp i \frac{m_0 \chi^\pm}{m_1^\pm k_\perp} \right) e^{\pm i k_\perp a}, \quad (13)$$

$$t_{\pm 11}^{12}(\chi^\pm) = t_{\pm 21}^{12}(-\chi^\pm) = (t_{\pm 12}^{12}(\chi^\pm))^* = (t_{\pm 22}^{12}(-\chi^\pm))^* \\ = \frac{1}{2} \left( 1 + i \frac{m_1^\pm k_\perp}{m_0 \chi^\pm} \right) e^{-\chi^\pm (z_1^\pm - a)}. \quad (14)$$

Теперь все матричные элементы  $T$ -матрицы (11) определены однозначно.

Согласно определению коэффициента прозрачности [19] ДБРТС, получается выражение

$$D = |A_2^+|^2 |F_2^-|^{-2} = |t_{21}|^{-2}. \quad (15)$$

При нахождении  $S$ -матрицы, определяющей волновую функцию (7), получается простое квадратное уравнение, которое имеет два решения

$$S^{(1,2)}(k_\perp) = \frac{t_{11} e^{-2ik_\perp z_1^-} - t_{22} e^{-2ik_\perp z_1^+}}{2t_{21}} \\ \times \left( 1 \pm \sqrt{1 + 4 \frac{t_{12} t_{21} e^{-2ik_\perp (z_1^+ + z_1^-)}}{(t_{11} e^{-2ik_\perp z_1^-} - t_{22} e^{-2ik_\perp z_1^+})^2}} \right), \quad (16)$$

соответствующие двум волновым функциям  $\Psi_{2S}^{\pm(1)}$  и  $\Psi_{2S}^{\pm(2)}$ :

$$\Psi_{2S}^{\pm(1,2)}(z) = B_2^{\pm(1,2)} (e^{\mp i k_\perp z} + S^{(1,2)} e^{\pm i k_\perp z}). \quad (17)$$

Согласно принципам квантовой механики [19], линейная комбинация

$$\Psi_{2S}^\pm(z) = B^\pm (e^{\mp i k_\perp z} + S e^{\pm i k_\perp z}) \quad (18)$$

с известными коэффициентами  $B^\pm$  и  $S$ -матрицей рассеяния,

$$B^\pm = B_2^{\pm(1)} + B_2^{\pm(2)}, \quad S = \frac{B_2^{\pm(1)} S^{(1)} + B_2^{\pm(2)} S^{(2)}}{B^\pm}, \quad (19)$$

однозначно определяет полную волновую функцию (7) КСС электрона в ДБРТС.

Выполнив, согласно общей теории [17], аналитическое продолжение  $S$ -матрицы в комплексную плоскость квазиимпульсов ( $k_\perp = k'_\perp - i k''_\perp$ ) или энергий ( $E = E' - i E''$ ), получаем уравнения

$$\operatorname{Re}(S(E))^{-1} = 0, \quad \operatorname{Im}(S(E))^{-1} = 0 \quad (20)$$

для определения РЭ и РШ КСС электрона соответственно.

Найденная через  $S$ -матрицу волновая функция (18) позволяет выполнить точный аналитический расчет функции распределения плотности вероятности нахождения электрона в ДБРТС:

$$W(k_\perp) = \frac{1}{z_1^+ + z_1^-} \int_{-z_1}^{z_1^+} |\Psi_{k_\perp}^S(z)|^2 dz \\ = \frac{1}{\pi(z_1^+ + z_1^-)} \left[ \frac{\frac{dZ^{(1)}(k_\perp)}{dk_\perp} - Z^{(1)}(k_\perp) \frac{\cos(k_\perp(z_1^+ - z_1^-))}{k_\perp}}{1 + (Z^{(1)}(k_\perp))^2} + \frac{\frac{dZ^{(2)}(k_\perp)}{dk_\perp} - Z^{(2)}(k_\perp) \frac{\cos(k_\perp(z_1^+ - z_1^-))}{k_\perp}}{1 + (Z^{(2)}(k_\perp))^2} \right], \quad (21)$$

где с учетом свойств  $T$ -матрицы обе функции  $Z^{(1)}(k_\perp)$  и  $Z^{(2)}(k_\perp)$

$$Z^{(1,2)}(k_\perp) = \frac{\operatorname{Re}(t_{12})(\operatorname{Im}(t_{21}) + \operatorname{Im}(t_{11} e^{-ik_\perp(z_1^+ + z_1^-)})}{|t_{12}|^2 + \operatorname{Im}(t_{21}) \operatorname{Im}(t_{11} e^{-ik_\perp(z_1^+ + z_1^-)})} \\ \mp \operatorname{Re}(t_{12}) \sqrt{|t_{12}|^2 - (\operatorname{Im}(t_{11} e^{-ik_\perp(z_1^+ + z_1^-)})^2)} \quad (22)$$

являются действительными функциями аргумента  $k_\perp$  (или энергии  $E$ ).

### 3. Аналитический расчет спектральных параметров электрона в ДБРТС с $\delta$ -образными потенциальными барьерами

Поскольку в модели прямоугольных потенциалов для электрона в ДБРТС получаются точные, но достаточно сложные аналитические выражения для  $S$ -матрицы (16) или коэффициента прозрачности  $D$  (15), то в большинстве теоретических работ [5–13], с целью упрощения

аналитических выражений, используются  $\delta$ -образные потенциальные барьеры. В  $\delta$ -барьерной модели потенциальная энергия электрона в ДБРС имеет вид

$$U(z) = U^+ \Delta^+ \delta(z - a) + U^- \Delta^- \delta(z + a), \quad (23)$$

вследствие чего уравнение для волновой функции  $\Psi_{k_\perp}(z)$  получается таким:

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + k_\perp^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2} (U^+ \Delta^+ \delta(z - a) + U^- \Delta^- \delta(z + a)) \right) \times \Psi_{k_\perp}(z) = 0, \quad (24)$$

где  $k_\perp$  определено ранее формулой (8).

Из уравнения (24) видно, что в этом подходе автоматически теряется информация о разности эффективных масс электрона в ямах и барьерах, а поэтому в его решении фигурирует только масса  $m_0$ :

$$\Psi(z) = \begin{cases} \Psi_0(z) = A_0 e^{ik_\perp z} + B_0 e^{-ik_\perp z}, & -a \leq z \leq a \\ \Psi_\pm(z) = \pm C_\pm \sin(k_\perp z \pm \varphi), & a \leq |\pm z| \leq \infty. \end{cases} \quad (25)$$

Уравнение относительно фазы рассеивания  $\varphi$ , а поскольку  $S_\delta = e^{2i\varphi}$ , то и относительно  $S_\delta$ -матрицы, получается из условий интегрирования величины  $\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2}$  по области, которая охватывает оба барьера. Прямое интегрирование дает результат

$$I(\pm a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\pm a - \varepsilon}^{\pm a + \varepsilon} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} dz = \pm k_\perp C_\pm \cos(\pm k_\perp a \pm \varphi) \mp ik_\perp (A_0 e^{\pm ik_\perp a} - B_0 e^{\mp ik_\perp a}). \quad (26)$$

С другой стороны, интегрирование с использованием уравнения Шредингера (24) дает

$$I(\pm a) = \frac{\Omega^\pm}{a} \Psi(\pm a), \quad \left( \Omega^\pm = \frac{2m_0 \Delta^\pm a U^\pm}{\hbar^2} \right). \quad (27)$$

Обозначая  $K_\perp = k_\perp a$ ,  $\gamma = A_0/B_0$  и комбинируя уравнения (26) и (27), получим точные аналитические выражения для обеих  $S_\delta^{(1,2)}$ -матриц:

$$S_\delta^{(1,2)} = e^{-2iK_\perp} \frac{1 + iZ_\delta^{(1,2)}}{1 - iZ_\delta^{(1,2)}}, \quad (28)$$

где

$$Z_\delta^{(1,2)} = \sin(2K_\perp) \left\{ \cos(2K_\perp) + \frac{\Omega^+ + \Omega^-}{2K_\perp} \sin(2K_\perp) \pm \sqrt{1 + \left( \frac{\Omega^+ - \Omega^-}{2K_\perp} \sin(2K_\perp) \right)^2} \right\}^{-1}. \quad (29)$$

Из сравнения формул (16) и (28) видно, что аналитическое выражение для  $S^{(1,2)}$ -матрицы точное, но

громоздкое, а для  $S_\delta^{(1,2)}$ -матрицы оно простое и удобное для анализа.

В случае симметричных барьеров  $U^+ \Delta^+ = U^- \Delta^- = U\Delta$ ,  $\Omega^+ = \Omega^- = \Omega$

$$S_\delta^{(1,2)} = e^{-2iK} \frac{\pm \Omega (\text{ctg } K_\perp)^{\pm 1} + 2i}{\pm \Omega (\text{ctg } K_\perp)^{\pm 1} - 2i}. \quad (30)$$

Осуществив аналитическое продолжение в комплексную плоскость ( $K_\perp = K_1 - iK_2$ ), из полюсов  $S_\delta^{(1,2)}$ -матриц получается система двух трансцендентных уравнений

$$\frac{\Omega K_2}{K_1^2 + K_2^2} + \frac{\text{sh } K_2 \text{ ch } K_2}{(\text{sh } K_2)^2 + \left( \frac{(\sin K_1)^2}{(\cos K_1)^2} \right)} = 1, \quad \frac{\Omega K_1}{K_1^2 + K_2^2} \pm \frac{\sin K_1 \cos K_1}{(\text{sh } K_2)^2 + \left( \frac{(\sin K_1)^2}{(\cos K_1)^2} \right)} = 0, \quad (31)$$

решения которой ( $K_{1N}$  и  $K_{2N}$ ) определяют резонансные энергии  $E_N$  и ширины  $\Gamma_N$ ,

$$E_N = \frac{\hbar^2 (K_{1N}^2 - K_{2N}^2)}{2m_0 a^2}, \quad \Gamma_N = \frac{2\hbar^2 K_{1N} K_{2N}}{m_0 a^2}, \quad (32)$$

квазистационарных состояний электрона соответственно.

Для сравнения полученных результатов с результатами других работ [5–7], выполненных в  $\delta$ -барьерной модели, приведем РЭ и РШ КСС электрона в несимметричной ДБРС [6]:

$$E_N^{D\delta} = \frac{\hbar^2 K_N^2}{2m_0 a^2},$$

$$\Gamma_N^{D\delta} = \left( \frac{\pi N \hbar^2}{m_0 a^2} \right)^3 \frac{K_N a^2}{2\pi N} \left( \frac{1}{(U^+ \Delta^+)^2} + \frac{1}{(U^- \Delta^-)^2} \right) \quad (N = 1, 2, \dots). \quad (33)$$

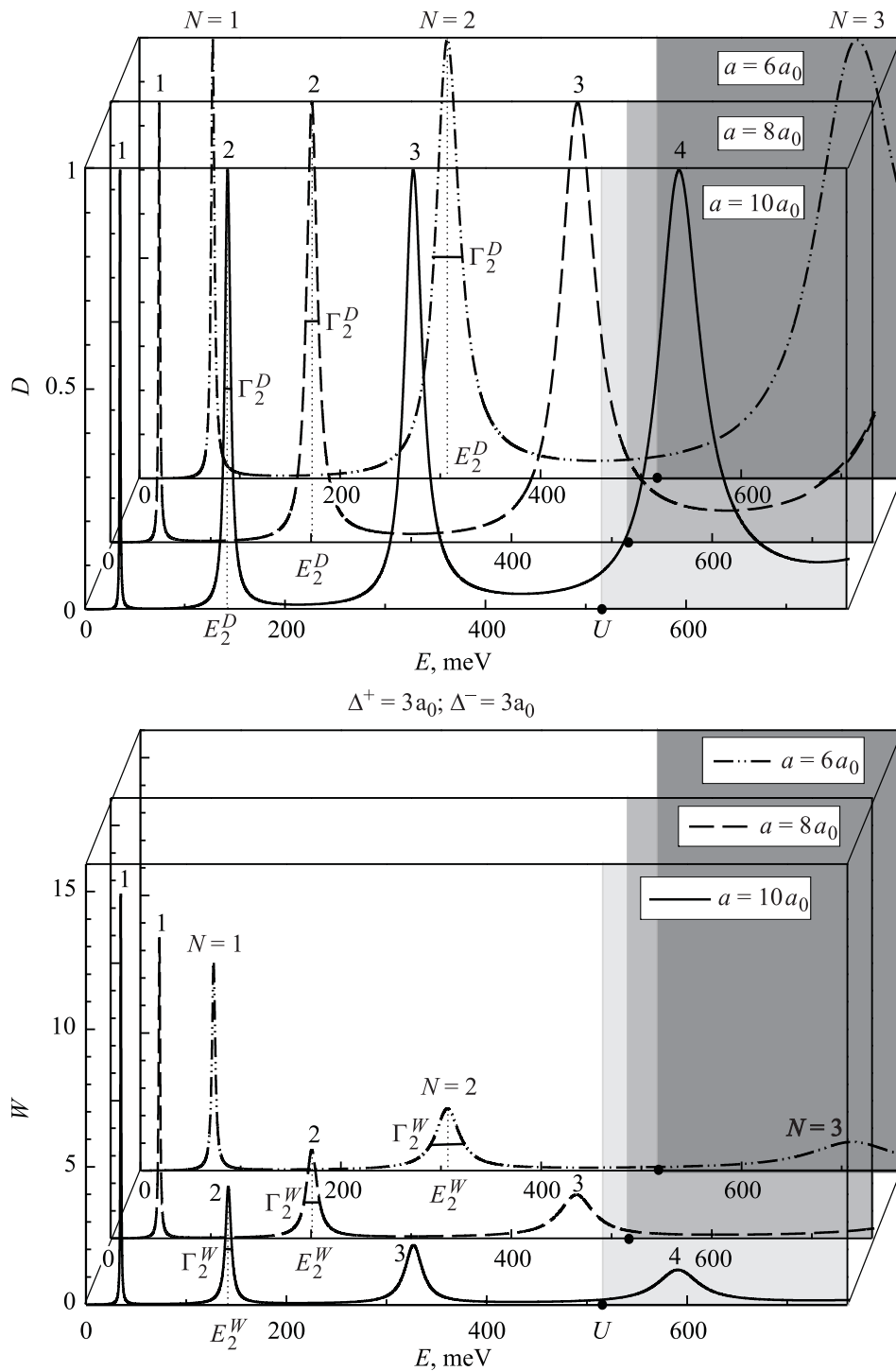
Величина  $K_N$  является решением дисперсионного уравнения с  $\delta$ -образными барьерами ДБРС разных мощностей ( $\Omega^+$ ,  $\Omega^-$ ):

$$\text{tg}(2K_N) + K_N \left( \frac{1}{\Omega^+} + \frac{1}{\Omega^-} \right) = 0. \quad (34)$$

Дальнейший анализ свойств квазистационарного спектра электронов в ДБРС выполняется на основе численных расчетов.

#### 4. Анализ эволюции КСС электрона в ДБРС

Анализ и расчет КСС электрона в ДБРС выполнялся на примере наносистемы  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ , так как она интенсивно исследуется экспериментально [1,3,20], а ее физические параметры:  $m_0 = 0.046m_e$ ,  $m_1^\pm = 0.089m_e$ ,  $a_0 = 0.587$  нм,



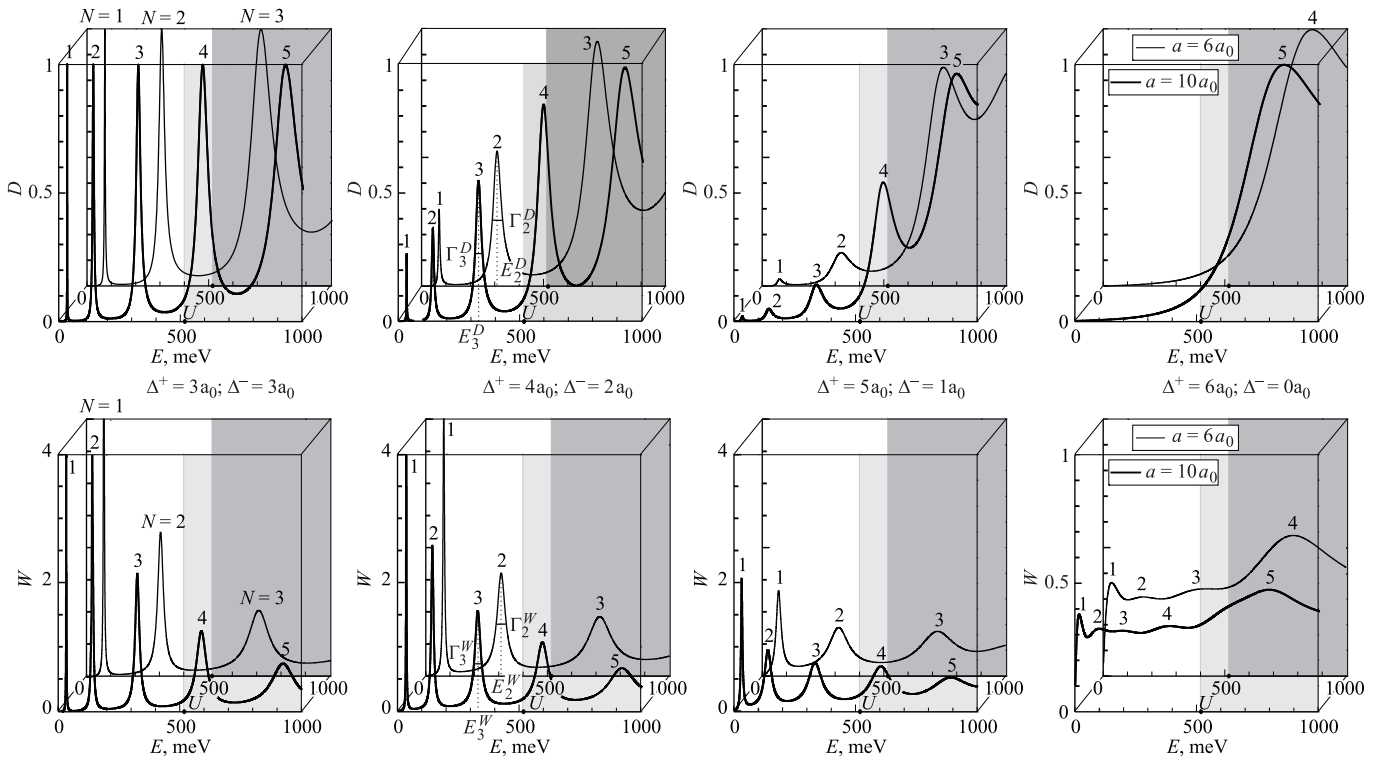
**Рис. 2.** Эволюция функций  $W(E)$  и  $D(E)$ , характеризующих КСС электрона в симметричной ДБРТС, в зависимости от ширины слоя ямы  $a$ .

$a_1^\pm = 0.587$  нм,  $U^\pm = 516$  мэВ удовлетворяют условиям теоретической модели.

Прежде чем анализировать спектральные параметры (РЭ и РШ) КСС электрона в моделях ДБРТС с  $\delta$ -подобными и прямоугольными барьерами, сначала определим эти параметры тремя разными методами: а) через ко-

эффициент прозрачности  $D$ ; б) через функцию распределения вероятности  $W$ ; в) через комплексные полюса  $S$ -матрицы.

Типичные зависимости  $D$  и  $W$  от энергии при различных геометрических параметрах симметричной ДБРТС приведены на рис. 2. Из рисунка видно, что  $D$  и  $W$ , как



**Рис. 3.** Эволюция функций  $W(E)$  и  $D(E)$ , характеризующих КСС электрона, в зависимости от соотношения между толщинами ( $\Delta^+/\Delta^-$ ) барьеров при неизменной суммарной толщине  $\Delta = \Delta^- + \Delta^+ = 6a_0$ .

функции энергии, при фиксированных геометрических параметрах имеют характер кривых с пиками квазиленцевого типа, которым соответствуют КСС электрона в системе. Положение максимумов  $N$ -х пиков в шкале энергий определяют РЭ  $E_N^D$  и  $E_N^W$ , а интервал энергии, определенный между двумя точками с ординатами, равными половине суммы максимума и соседнего высокоэнергетического минимума  $N$ -го пика, определяет РШ  $\Gamma_N^D$  и  $\Gamma_N^W$ .

На рис. 2 РЭ и РШ показаны на примере второго пика ( $N = 2$ ). Из рис. 2 видно, что, хотя максимальные значения всех пиков на кривых  $D$  достигают значений, равных 1, а максимальные значения пиков на кривых  $W$  с увеличением номера  $N$  КСС уменьшаются, тем не менее определяемые этими функциями РЭ и РШ практически совпадают ( $E_N^W = E_N^D$ ,  $\Gamma_N^W = \Gamma_N^D$ ). Более детально поведение этих спектральных параметров будет проанализировано далее.

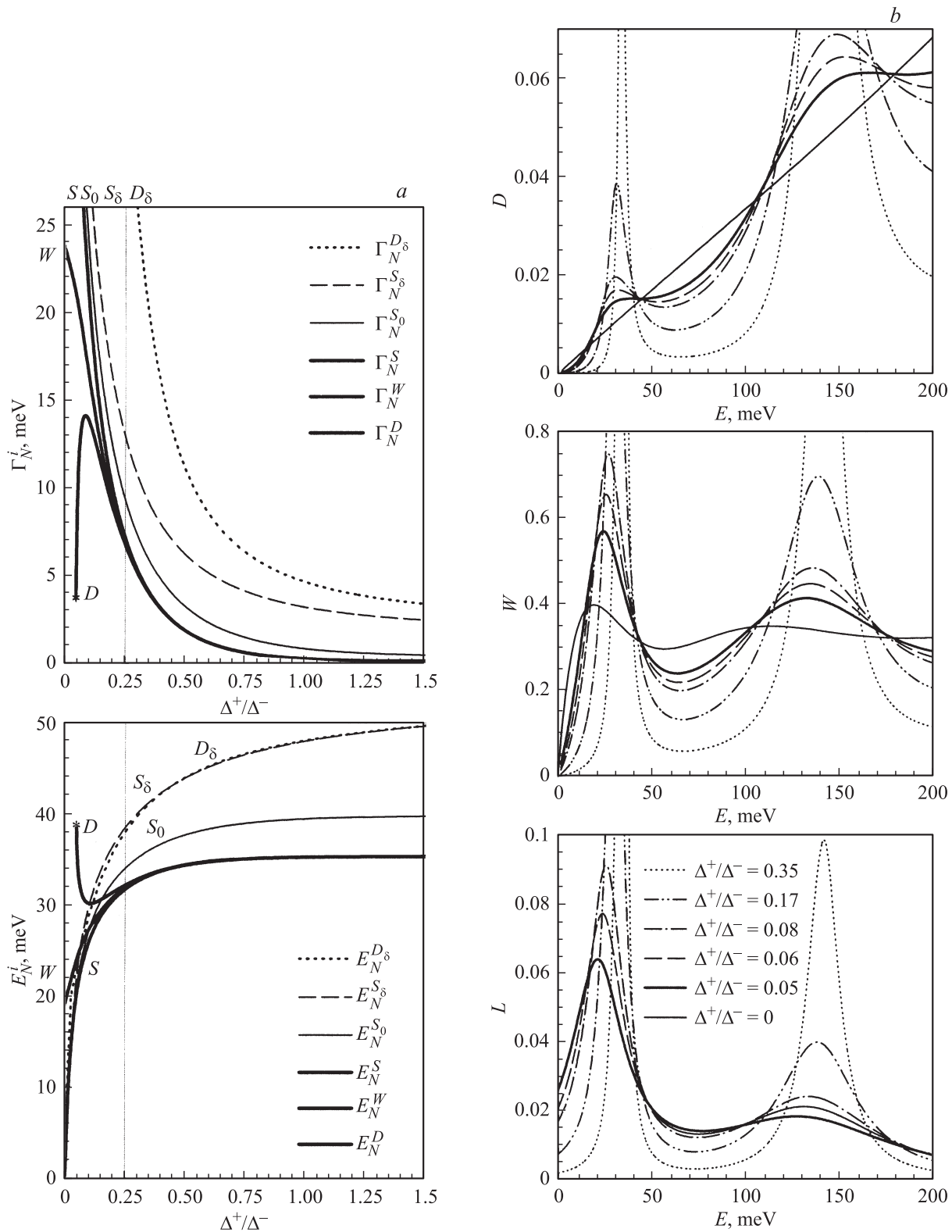
На рис. 3 показана эволюция функций  $D$  и  $W$  в зависимости от соотношения между толщинами барьеров ДБРТС при условии, что их суммарная толщина остается постоянной. Величины геометрических параметров ДБРТС приведены на рис. 3. Из рисунка видно, что с изменением соотношения величин  $\Delta^+$  и  $\Delta^-$  пики КСС на кривых  $D$  и  $W$  эволюционируют существенно по-разному.

С уменьшением толщины одного из барьеров ( $\Delta^-$ ) и соответствующем увеличении толщины другого барьера ( $\Delta^+$ ) высоты всех подбарьерных пиков КСС на кривой  $W$

только опускаются и существуют вплоть до полного исчезновения одного из барьеров ( $\Delta^- = 0$ ). При этом, как видно из рисунка, РЭ и РШ изменяются слабо, а подбарьерные КСС постепенно превращаются в квазисвободные виртуальные состояния (при  $\Delta^- = 0$ ). Высоты надбарьерных пиков сначала также опускаются, а при малых значениях  $\Delta^-$  совершают сложную эволюцию, которую мы здесь не исследуем.

С аналогичным изменением толщин барьеров РТС эволюции пиков КСС на кривой  $D$  совершенно иная. Главная особенность эволюции  $D$  состоит в том, что в ДБРТС с несимметричными барьерами ( $\Delta^+ \neq \Delta^-$ ) во всех подбарьерных КСС максимум коэффициента прозрачности не достигает значения, равного 1, а с уменьшением толщины  $\Delta^-$  и соответствующим увеличением  $\Delta^+$  величины максимумов уменьшаются так, что подбарьерные пики вырождаются в непрерывную кривую, первый пик которой (в этом случае  $N = 5$  при  $a = 10a_0$ ) достигает значения, равного 1, только в надбарьерной области спектра. Следует отметить, что эволюция прибарьерного КСС ( $N = 4$ ), находящегося в области непрерывного спектра, подобна эволюции всех подбарьерных КСС ( $N = 1, 2, 3$ ), тогда как все надбарьерные КСС (начиная с  $N = 5$ ) осуществляют сложную эволюцию, при которой  $D$  также может достигать значения, равного 1.

Из рис. 3 видно, что величины РЭ и РШ подбарьерных КСС, определяемые через функции  $D$  и  $W$ , хорошо



**Рис. 4.** Эволюция: *a* — спектральных параметров; *b* — функций ( $D$ ,  $W$ ,  $L$ ), характеризующих КСС электрона в ДБРТС.

согласуются между собой для ДБРТС с симметричными и не сильно отличающимися барьерами. Если же ДБРТС является сильно несимметричной, то информация о спектральных параметрах подбарьерных КСС в функции

$W(E)$  сохраняется, а в функции  $D(E)$  исчезает. Математическая причина такого различного поведения обеих функций при малых  $\Delta^-$  очевидна. Она обусловлена тем, что в отличие от функции  $W$ , которая выражается через

Спектральные характеристики электрона в ДБРТС ( $\eta = (E_N^i - E_N^W)/E_N^W$ )

$N$	$\Delta^+/\Delta^- = 0.5$				$\Delta^+/\Delta^- = 1$				$\Delta^+/\Delta^- = 1.5$			
	1		2		1		2		1		2	
$\Gamma_N^W$ , мЭВ	1.9	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$	11.2	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$	0.3	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$	2.3	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$	0.15	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$	1.3	$\Gamma_N^i/\Gamma_N^W$
$\Gamma_N^{S_0}$	3.2	1.7	22.4	2	0.84	2.8	7.6	3.3	0.5	3.3	4.9	3.8
$\Gamma_N^{S_\delta}$	6.2	3.3	40.4	3.6	2.9	90.7	23.2	10.1	2.5	16.7	18.1	13.9
$\Gamma_N^{D_\delta}$	10.9	5.7	89.6	8	4.6	15.3	37.0	16.1	3.4	22.7	27.1	20.8
$E_N^W$ , мЭВ	34.4	$\eta$ , %	141.8	$\eta$ , %	35.2	$\eta$ , %	142.5	$\eta$ , %	35.3	$\eta$ , %	142.5	$\eta$ , %
$E_N^{S_0}$	37.6	9.3	152.6	7.6	39.4	11.9	155.9	9.4	39.6	12.2	156.7	9.9
$E_N^{S_\delta}$	43.9	27.6	182.8	28.9	47.9	36.1	194.9	36.8	49.6	40.5	200.6	40.8
$E_N^{D_\delta}$	43.9	27.6	183.4	29.3	48.0	36.4	195.6	37.3	49.6	40.5	200.8	40.9

все элементы  $T$ -матрицы, коэффициент прозрачности  $D$  выражается только через одну ее компоненту и поэтому не содержит достаточно полной информации о КСС системы. Пока толщины барьеров ДБРТС соразмерны, информация, содержащаяся в матричном элементе  $t_{21}$ , достаточно хорошо отражает свойства КСС электрона. Как только барьеры ДБРТС становятся несоизмеримыми, важную роль в определении КСС начинают играть все матричные элементы  $T$ -матрицы (11), которые определяют функцию  $W$ , но не фигурирующие в коэффициенте прозрачности  $D$ . Поэтому следует полагать, что именно функция распределения  $W(E)$  несет наиболее полную информацию о КСС электрона в ДБРТС.

На рис. 4, а приведены результаты расчета разными методами зависимости РЭ и РШ первого ( $N = 1$ ) КСС электрона в ДБРТС от величины отношения  $\Delta^+/\Delta^-$ . Величины геометрических параметров типичны для экспериментально [1–3,20] и теоретически [5–7,10–12,15–16] исследуемых ДБРТС:  $a = 10a_0$ ,  $\Delta^- = 4a_0$ . Расчеты РЭ и РШ выполнялись: а) в модели прямоугольных потенциалов через функции  $W(E)$  ( $E_N^W$ ,  $\Gamma_N^W$ ),  $D(E)$  ( $E_N^D$ ,  $\Gamma_N^D$ ) и через комплексные полюса  $S$ -матрицы ( $E_N^S$ ,  $\Gamma_N^S$ ) при  $m_0 \neq m_1$ , а также через полюса  $S$ -матрицы при  $m_1 = m_0$  ( $E_N^{S_0}$ ,  $\Gamma_N^{S_0}$ ); б) в  $\delta$ -барьерной модели методом  $S$ -матрицы ( $E_N^{S_\delta}$ ,  $\Gamma_N^{S_\delta}$ ) и через коэффициент прозрачности ( $E_N^{D_\delta}$ ,  $\Gamma_N^{D_\delta}$ ).

Из рис. 4, а видно, что в более реалистичной модели с прямоугольными потенциалами и разными эффективными массами ( $m_0 \neq m_1$ ) электрона в зависимости от соотношения между толщинами барьеров ( $\Delta^+/\Delta^-$ ) ДБРТС три метода ( $W$ ,  $D$ ,  $S$ ) расчета РЭ и РШ КСС дают либо практически одинаковые значения (при  $\Delta^+/\Delta^- \geq 0.25$ ), либо совершенно различные значения (при  $\Delta^+/\Delta^- < 0.25$ ). Те же величины РЭ и РШ во всей области изменения соотношения между толщинами обоих барьеров в более грубых моделях, игнорирующих разницу эффективных масс, оказываются значительно завышенными с такой иерархией:  $E_N^S < E_N^{S_0} < E_N^{S_\delta} < E_N^{D_\delta}$ ,  $\Gamma_N^S < \Gamma_N^{S_0} < \Gamma_N^{S_\delta} < \Gamma_N^{D_\delta}$ .

Представление о точности величин РЭ и РШ, определяемых приближенными моделями, по сравнению с точными ( $E_N^W$ ,  $\Gamma_N^W$ ) дает таблица. Из нее видно, что при соразмерной толщине барьеров ДБРТС  $\delta$ -барьерная модель позволяет определять РЭ с точностью до десятков процентов, а значения РШ КСС оказываются завышенными в несколько, а то и в десятки раз. Таким образом, ясно, что  $\delta$ -барьерная модель ДБРТС с соразмерными барьерами может применяться только для грубых качественных оценок спектральных параметров КСС.

Что касается ДБРТС с очень тонкими или несоизмеримыми между собой барьерами (здесь  $\Delta^+/\Delta^- < 0.25$ ), то касательно эволюции КСС и их спектральных параметров в таких наносистемах возникает еще два вопроса:

1) Почему с уменьшением толщины одного из барьеров, вплоть до полного его исчезновения, все три метода расчета ( $W$ ,  $D$ ,  $S$ ) показывают даже качественно различную зависимость РЭ и РШ от соотношения  $\Delta^+/\Delta^-$ ?

2) Существует ли естественный критерий, согласно которому можно разграничить квазисвязанные и квазисвободные КСС? Как с уменьшением суммарной мощности барьеров происходит превращение квазисвязанных состояний в квазисвободные, а затем и в свободные ( $\Delta^+ = 0$ ) и как это отражается на спектральных параметрах электрона в РТС?

Последний вопрос коррелирует с хорошо известным из теории рассеяния [17] о том, существует ли «строгая» разница между «действительными» квазистационарными состояниями и состояниями, существенно зависящими от вида потенциала.

Чтобы выяснить картину эволюции КСС с уменьшением величины  $\Delta^+/\Delta^-$ , вплоть до нуля, на рис. 4, б приведены результаты расчета функции  $D(E)$ ,  $W(E)$ , а также функции распределения лоренцевого типа

$$L(E) = \sum_{N=1} \frac{\Gamma_N^S/2}{(E - E_N^S)^2 + (\Gamma_N^S/2)^2}$$

с параметрами  $\Gamma_N^S$ ,  $E_N^S$ , определяемыми полюсами  $S$ -матрицы. Из рисунка видно следующее.



При постепенном уменьшении величины  $\Delta^+/\Delta^-$  от 1 до 0 формы кривых  $L$ ,  $W$  и  $D$  изменяются по-разному. Так, при  $\Delta^+/\Delta^- = 0.35$  формы всех подбарьерных пиков на кривых  $W$ ,  $D$  и  $L$  практически лоренцевы и соответствующие спектральные параметры почти не различаются между собой ( $\Gamma_N^S = \Gamma_N^W = \Gamma_N^D$ ,  $E_N^S = E_N^W = E_N^D$ ). С уменьшением величины  $\Delta^+/\Delta^-$  формы пиков на кривых  $W$  и  $D$  все больше отличаются от лоренцевых ( $L$ ). При этом на кривой  $W(E)$  пики, а следовательно, и характеризующие их спектральные параметры  $E_N^W$  и  $\Gamma_N^W$  существуют вплоть до  $\Delta^+/\Delta^- = 0$ . Что же касается эволюции функции  $D(E)$ , то с уменьшением величины  $\Delta^+/\Delta^-$  все подбарьерные пики постепенно уменьшаются и затем исчезают. При этом кривая  $D$  принимает форму плавного увеличивающихся ступенек и при  $\Delta^+/\Delta^- = 0$  она вырождается в плавную линию, которая является коротковолновым крылом первого надбарьерного пика (рис. 3 и 4, *b*). В связи со сложной зависимостью функции  $D(E)$  от отношения  $\Delta^+/\Delta^-$  определяемые ею РЭ ( $E_N^D$ ) имеют минимумы, а РШ ( $\Gamma_N^D$ ) — максимумы (рис. 4, *a*).

Известно [17], что в РТС с мощными барьерами величина  $\tau_N = \hbar/\Gamma_N$  интерпретируется как время жизни КСС электрона, которое пропорционально времени пролета РТС. Поэтому возникает вопрос о том, какой из приведенных трех методов определения  $\Gamma_N$  и  $E_N$  наиболее адекватно описывает физическую картину при любых толщинах барьеров и их соотношениях ( $0 \leq \Delta^+/\Delta^- < \infty$ ), в частности при слабых барьерах или же при малых значениях  $\Delta^+/\Delta^-$ , когда функции  $L$ ,  $W$ ,  $D$  дают совершенно разные значения РЭ и РШ (рис. 4, *a*). Ответ получается из анализа предельного случая превращения ДБРТС в однобарьерную РТС при исчезновении одного из барьеров.

Из физических соображений ясно, что КСС однобарьерной системы должны быть виртуальными, т.е. они должны характеризоваться отличными от нуля и бесконечности спектральными характеристиками. Из анализа функций  $W$ ,  $D$  и  $S$  и из рис. 4, *a* видно, что при  $\Delta^+/\Delta^- \rightarrow 0$  лишь  $\Gamma_N^W \neq 0, \infty$ ,  $E_N^W \neq 0, \infty$ , тогда как  $\Gamma_N^S \rightarrow \infty$ , а  $\Gamma_N^D$ , как характеристика КСС, вообще не существует. Поэтому если учесть, что величина  $\tau_N$  характеризует время пролета электроном расстояния  $2a$ , а оно должно быть конечным даже при отсутствии одного из барьеров, то, поскольку этому естественно физическому требованию удовлетворяет лишь  $\tau_N^W \neq 0, \infty$ , по-видимому, наиболее адекватной функцией, характеризующей КСС в ДБРТС, следует считать именно функцию  $W(E)$  распределения плотности вероятности нахождения электрона внутри ДБРТС или же на расстоянии ширины ямы  $2a$  в однобарьерной РТС.

Остается проанализировать вопрос о превращении квазисвязанных состояний в квазисвободные с уменьшением мощности барьеров или же при малых отношениях  $\Delta^+/\Delta^-$ . С этой целью еще раз обратимся к рис. 4, *a*, из которого видно, что на кривых  $\Gamma_N^W$ ,  $\Gamma_N^S$ ;

$E_N^W$ ,  $E_N^S$ , как функция аргумента  $\Delta^+/\Delta^-$ , нет выделенных точек (максимумов, минимумов или обрывов). Что же касается кривых  $\Gamma_N^D$ ,  $E_N^D$ , то в области малых значений  $\Delta^+/\Delta^-$  на них есть выделенные точки экстремумов, очень близко расположенные к точкам обрыва этих кривых. Поэтому представляется довольно естественным считать критическое значение  $\Delta_k^+/\Delta_k^-$ , при котором обрываются значения  $\Gamma_N^D$ ,  $E_N^D$ , границей между квазисвязанными ( $\Delta^+/\Delta^- > \Delta_k^+/\Delta_k^-$ ) и квазисвободными ( $\Delta^+/\Delta^- < \Delta_k^+/\Delta_k^-$ ) состояниями. Хотя такое определение ширины границы достаточно условно, но оно базируется не на „желании интерпретировать экспериментальные данные в пользу одной из нескольких альтернативных теоретических возможностей“ [17], а на объективных математических свойствах коэффициентов прозрачности, как физической величины, характеризующей КСС в РТС.

## 5. Заключение

Методом функции  $W(E)$  распределения плотности вероятности нахождения электрона внутри ДБРТС с использованием  $S$ -матрицы рассеяния предложена теория спектральных параметров КСС электрона в ДБРТС в модели прямоугольных потенциалов и различных эффективных масс.

На примере ДБРТС  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  показано, что  $\delta$ -барьерная модель может применяться лишь для грубых количественных оценок спектральных параметров КСС, так как по отношению к более точной модели прямоугольных потенциалов значения РЭ оказываются завышенными на несколько десятков процентов, а РШ завышены в 10–20 раз.

Установлено, что в ДБРТС с мощными и соразмерными барьерами спектральные параметры КСС, определенные тремя методами ( $W$ ,  $D$ ,  $S$ ), совпадают между собой. В ДБРТС со слабыми потенциальными барьерами или малыми отношениями  $\Delta^+/\Delta^-$  величины РЭ и РШ КСС наиболее адекватно определяются функцией распределения  $W$ , а естественная граница между квазисвязанными и квазисвободными состояниями определяется критическим значением отношения  $\Delta_k^+/\Delta_k^-$  барьеров, при котором заканчивается область определения спектральных параметров  $\Gamma_N^D$  и  $E_N^D$ .

## Список литературы

- [1] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho. *Science*, **264**, 553 (1994).
- [2] I.V. Kudryashov, V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov, E.Yu. Kotel'nikov, A.K. Kryganovskii, A.N. Titkov. *J. Cryst. Growth*, **201/202**, 1158 (1999).
- [3] C. Gmachl, F. Capasso, D.L. Sivco, A.Y. Cho. *Rep. Progr. Phys.*, **64**, 1533 (2001).
- [4] Ж.И. Алфёров, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов, П.С. Копьев, В.И. Панов, Э.А. Полторацкий, Н.Н. Сибельдин, Р.А. Сурис. *Микросистемная техника*, **8**, 3 (2003).

- [5] И.В. Беляев, Е.И. Голант, А.Б. Пашковский. ФТП, **31**, 137 (1997).
- [6] Е.И. Голант, А.Б. Пашковский. ФТП, **31**, 1077 (1997).
- [7] Е.И. Голант, А.Б. Пашковский. ФТП, **34**, 334 (2000).
- [8] Е.И. Голант, А.Б. Пашковский. ФТП, **36**, 330 (2002).
- [9] А.Б. Пашковский. Письма ЖЭТФ, **82**, 228 (2005).
- [10] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **121**, 925 (2002).
- [11] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **123**, 1096 (2003).
- [12] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **124**, 379 (2003).
- [13] В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев. ФТП, **42**, 586 (2008).
- [14] В.И. Галиев, А.Н. Круглов, А.Ф. Полупанов, Е.М. Голдис, Т.Л. Тансли. ФТП, **36**, 576 (2002).
- [15] Н.В. Ткач, В.А. Головацкий. ФТТ, **43**, 350 (2001).
- [16] Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Г.Г. Зегря. Письма ЖТФ, **33**, 70 (2007).
- [17] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М., Наука, 1971).
- [18] G.H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors* (Cambridge University Press, 1998).
- [19] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989).
- [20] A.K.M. Newaz, W. Song, E.E. Mendez, Y. Lin, J. Nitta. Phys. Rev. B, **71**, 195 303 (2005).

Редактор Л.В. Беляков

## Plane two-barrier resonance-tunnel structures: resonance energies and resonance widths in quasi-stationary electron states

*M. Tkach, Ju. Seti*

Chernivtsi National University,  
58012 Chernivtsi, Ukraine

**Abstract** The theory of resonance energies and widths of quasistationary states is presented using the density distribution functions of probability of electron location in two-barrier resonance-tunnel structure within transfer-matrix and scattering  $S$ -matrix for the models of rectangular and  $\delta$ -like potentials with different effective masses in nanosystem parts.

For  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  nanosystem it is performed the analysis of spectral parameters evolution for electron quasistationary states depending on geometrical sizes of resonance-tunnel structure and calculated within three different methods. It is shown that  $\delta$ -barrier model gives the resonance widths ten times bigger comparing to the more realistic model of rectangular potentials, thus it can be used only for the rough evaluations.