01;02;06

Дублетные резонансы электрона в симметричных трехбарьерных разонансно-туннельных структурах

© Н.В. Ткач, Ю.А. Сети

Черновицкий национальный университет имени Ю. Федьковича,
58012 Черновцы, Украина
e-mail: ktf@chnu.edu.ua

(Поступило в Редакцию 27 апреля 2009 г.)

Теоретически исследованы эволюция и коллапс электронных резонансов и их спектральных параметров в симметричной трехбарьерной резонансно-туннельной структуре (ТБРТС). Проанализированы значения резонансной энергии и ширины квазистационарных состояний электрона, рассчитанные методами коэффициента прозрачности, функции распределения вероятности нахождения электрона в ТБРТС и сечения рассеяния.

PACS: 73.21.Fg, 73.63.Hs, 73.90.+f

Как известно [1–6] физические характеристики различных наноустройств (квантовых фильтров, генераторов, лазеров и т. п.) очень чувствительны к спектральным параметрам (значениям резонансной энергии и ширины) квазистационарных состояний (КСС) электронов в резонансно-туннельных структурах (РТС), составляющих их элементную базу. Подбором геометрических размеров РТС можно изменять значения резонансной энергии и ширины КСС, а значит, управлять физическими характеристиками наноустройств. Так, например, достигается минимизация пускового тока при возбуждении лазерного излучения максимальной мощности в нужном диапазоне частот. В связи с этим теоретическому исследованию КСС в РТС уделяется все большее внимание [3–8].

Теоретические исследования КСС в низкоразмерных наноструктурах в подавляющем большинстве случаев выполнялись либо методом комплексных полюсов S-матрицы рассеяния, либо через коэффициент (D) прозрачности РТС. Однако известно [8–10], что метод S-матрицы неприемлем для систем с потенциальными барьерами малой мощности (толщины), а коэффициент прозрачности резко уменьшается в мультибарьерных структурах после коллапса КСС.

Недавно Горбацевич с коллегами [10] детально исследовали эволюцию и коллапс резонансных энергий пар КСС электрона в δ-барьерной модели плоской симметричной трехбарьерной резонансно-туннельной структуре (ТБРТС) с изменением отношения толщины внутреннего барьера к внешним. В работе было показано, что в отличие от коэффициента прозрачности комплексные полюса S-матрицы непосредственно не описывают спектральных параметров КСС электрона в процессе коллапса, который происходит при определенном соотношении толщин барьеров ТБРТС вследствие квантового фазового перехода второго рода по параметру асимметрии.

Целью предлагаемой работы является теоретическое исследование эволюции и коллапса пар КСС электрона и их спектральных параметров (резонансных энергий и ширины) в ТБРТС методом коэффициента прозрачности D, а также методом функции W распределения вероятности нахождения электрона в ТБРТС и через сечение рассеяния σ. Так как величина сечения рассеяния хорошо измеряется экспериментально, независимо от мощности потенциальных барьеров РТС, то определение резонансных энергий и ширины КСС через нее может оказываться важным, когда величина коэффициента прозрачности мала (при достаточно мощных барьерах).

Рассмотрим плоскую симметричную трехбарьерную резонансно-туннельную наносистему. Будем изучать КСС электрона с эффективной массой m в ТБРТС. Избегая громоздких аналитических выражений, как и в большинстве теоретических работ [3–6,10], прямоугольные потенциальные барьеры заменим соответствующими δ-образными барьерами той же площади.

В такой модели потенциальная энергия электрона в ТБРТС имеет вид

$$U(z) = U\left[\Delta\delta(z) + \Delta_1\big(\delta(z-a) + \delta(z+a)\big)\right], \qquad (1)$$

где U — величина потенциальных энергий берьеров вдоль оси $0Z$, перпендикулярной плоскостям РТС, a — ширина каждой потенциальной ямы, Δ_1, Δ — ширина внешних и внутреннего потенциальных барьеров соответственно.

Уравнение Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + k^2 - \frac{2mU}{\hbar^2}\big(\Delta\delta(z) + \Delta_1\big(\delta(z-a) + \delta(z+a)\big)\big)\right]\Psi(z) = 0 \quad \left(k = \sqrt{2mE}/\hbar\right) \qquad (2)$$

решается точно и в зависимости от способа аналитического расчета (через S-матрицу рассеяния или коэффициент (D) прозрачности ТБРТС) волновая функция $\Psi(z)$

может быть представлена в виде

$$\Psi_{\left\{ {S \atop D} \right\}}(kz) = \\ = \begin{cases} \Psi_1^{\pm}(kz) = A_1^{\pm} e^{ikz} + B_1^{\pm} e^{-ikz}, & 0 \le |\pm z| \le a, \\ \Psi^{\pm}_{2\left\{ {S \atop D} \right\}}(kz) = \begin{cases} C_2^{\pm}(e^{-ikz} - Se^{ikz}), \\ A_2^{\pm} e^{ikz} + B_2^{\pm} e^{-ikz}, \end{cases} & a \le |\pm z| \le \infty. \end{cases} \quad (3)$$

Неизвестные коэффициенты $A^{\pm}_{1,2}$, $B^{\pm}_{1,2}$, $C^{\pm}_2$ и S-матрица рассеяния находятся методом трансфер-матрицы (T) из граничных условий

$$\left. \begin{aligned} &\Psi_i(\pm a) = \Psi_{i+1}(\pm a) \\ &\frac{d\Psi_{i+1}(z)}{dz}\Big|_{z=\pm a} - \frac{d\Psi_i(z)}{dz}\Big|_{z=\pm a} = \frac{2mU}{\hbar^2}\Psi(\pm a) \\ &(i = \pm 1, \pm 2), \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

и условия нормировки волновой функции

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*_{k'}(z)\Psi_k(z)dz = \delta(k - k'). \quad (5)$$

Для рассматриваемой ТБРТС трансфер-матрица имеет вид

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} + it_{11} & it_{12} \\ -it_{12} & T_{11} - it_{11} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где

$$T_{11} = \cos 2ka + \frac{\Omega_0 + 2\Omega_1}{k}\sin 2ka + \frac{4\Omega_0\Omega_1}{k^2}\sin^2 ka,$$

$$t_{11} = k^{-3}\Big\{\left[2\Omega_1(\Omega_0 + \Omega_1)k - k^3\right]\sin 2ka \\ + k^2(\Omega_0 + 2\Omega_1)\cos 2ka + 4\Omega_0\Omega_1^2\sin^2 ka\Big\},$$

$$t_{12} = k^{-3}\Big\{k^2\Omega_0 + 2k^2\Omega_1\left[k\cos 2ka + (\Omega_0 + \Omega_1)\sin 2ka\right] \\ + 4\Omega_0\Omega_1^2\sin^2 ka\Big\}$$

— действительная функция от аргумента k.

Теперь, согласно квантовомеханическому определению [11] для коэффициента прозрачности ТБРТС, получается выражение

$$D = |A_2^+|^2|A_2^-|^{-2} = (T_{11}^2 + t_{11}^2)^{-2}, \quad (7)$$

а для S-матрицы из условий (4) получается квадратное уравнение, которое имеет два решения

$$S_{1,2}(k) = e^{-2ika}\frac{1 + iZ_{1,2}(k)}{1 - iZ_{1,2}(k)}. \quad (8)$$

Фигурирующие здесь функции

$$Z_{1,2}(k) = \frac{T_{11}t_{12} \pm t_{11}\sqrt{T_{11}^2 + t_{11}^2 - t_{12}^2}}{T_{11}^2 + t_{11}^2 + t_{11}t_{12} \mp T_{11}\sqrt{T_{11}^2 + t_{11}^2 - t_{12}^2}} \quad (9)$$

удобны тем, что являются действительными функциями аргумента k, через которые непосредственно выражаются и функции (W) распределения вероятности нахождения электрона в ТБРТС, и сечение рассеяния σ.

Известно [9,10], что комплексные полюса S-матриц определяют резонансные энергии и ширину КСС электрона в РТС с достаточно мощными потенциальными барьерами. В обобщенном случае $S_1(k)$ и $S_2(k)$ однозначно определяют две взаимно ортогональные волновые функции электрона $\Psi_{S_1}(k)$ и $\Psi_{S_2}(k)$ в открытой ТБРТС, через которые легко получить точное аналитическое выражение для функции (W) распределения вероятности нахождения электрона в ТБРТС

$$W(k) = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a}\left(|\Psi_{S_1}(kz)|^2 + |\Psi_{S_2}(kz)|^2\right)dz \\ = \frac{1}{2\pi a}\left[\frac{\frac{dZ_1(ka)}{dk} - \frac{Z_1(ka)}{k}}{1 + Z_1^2(ka)} + \frac{\frac{dZ_2(ka)}{dk} - \frac{Z_2(ka)}{k}}{1 + Z_2^2(ka)}\right] \quad (10)$$

и сечение рассеяния

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 = 4\pi\left(\frac{\sin ka}{k}\right)^2 \\ \times \left[\frac{(1 - Z_1(ka)\operatorname{ctg} ka)^2}{1 + Z_1^2(ka)} + \frac{(1 - Z_2(ka)\operatorname{ctg} ka)^2}{1 + Z_2^2(ka)}\right]. \quad (11)$$

Эволюцию электронных КСС и их спектральных характеристик (резонансных энергий и ширин) в зависимости от геометрических параметров будем изучать на примере ТБРТС $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ с физическими параметрами: $m = 0.046m_e$, $a_0 = 5.868$ Å, $U = 516$ meV. Выбор наносистемы обусловлен тем, что она интенсивно исследуется теоретически и экспериментально [1,2].

На рис. 1 приведены результаты расчетов функций $D(E)$, $W(E)$ и $\sigma(E)$, выполненные на примере симметричной ТБРТС $(a = 25a_0,\ \Delta_1 = 5a_0)$ при разных значениях толщины Δ внутреннего барьера. На рисунке, для примера, показана эволюция всех трех функций в интервале энергий, который содержит только первую пару пиков $(n = 1)$, так как эволюция более высокоэнергетических пиков аналогична. Каждый пик на функциях $D(E)$, $W(E)$ и $\sigma(E)$ соответствует резонансному КСС или же просто электронному резонансу.

При малых значениях толщины Δ каждая n-я пара КСС электрона в ТБРТС характеризуется двумя парами спектральных параметров: нижними $(E^D_{nl}, E^W_{nl}, E^\sigma_{nl})$ и верхними $(E^D_{no}, E^W_{no}, E^\sigma_{no})$ резонансными энергиями, нижними $(\Gamma^D_{nl}, \Gamma^W_{nl}, \Gamma^\sigma_{nl})$ и верхними $(\Gamma^D_{no}, \Gamma^W_{no}, \Gamma^\sigma_{no})$ резонансными значениями ширины. Индексы (D, W, σ) указывают функции, через которые определяются спек-

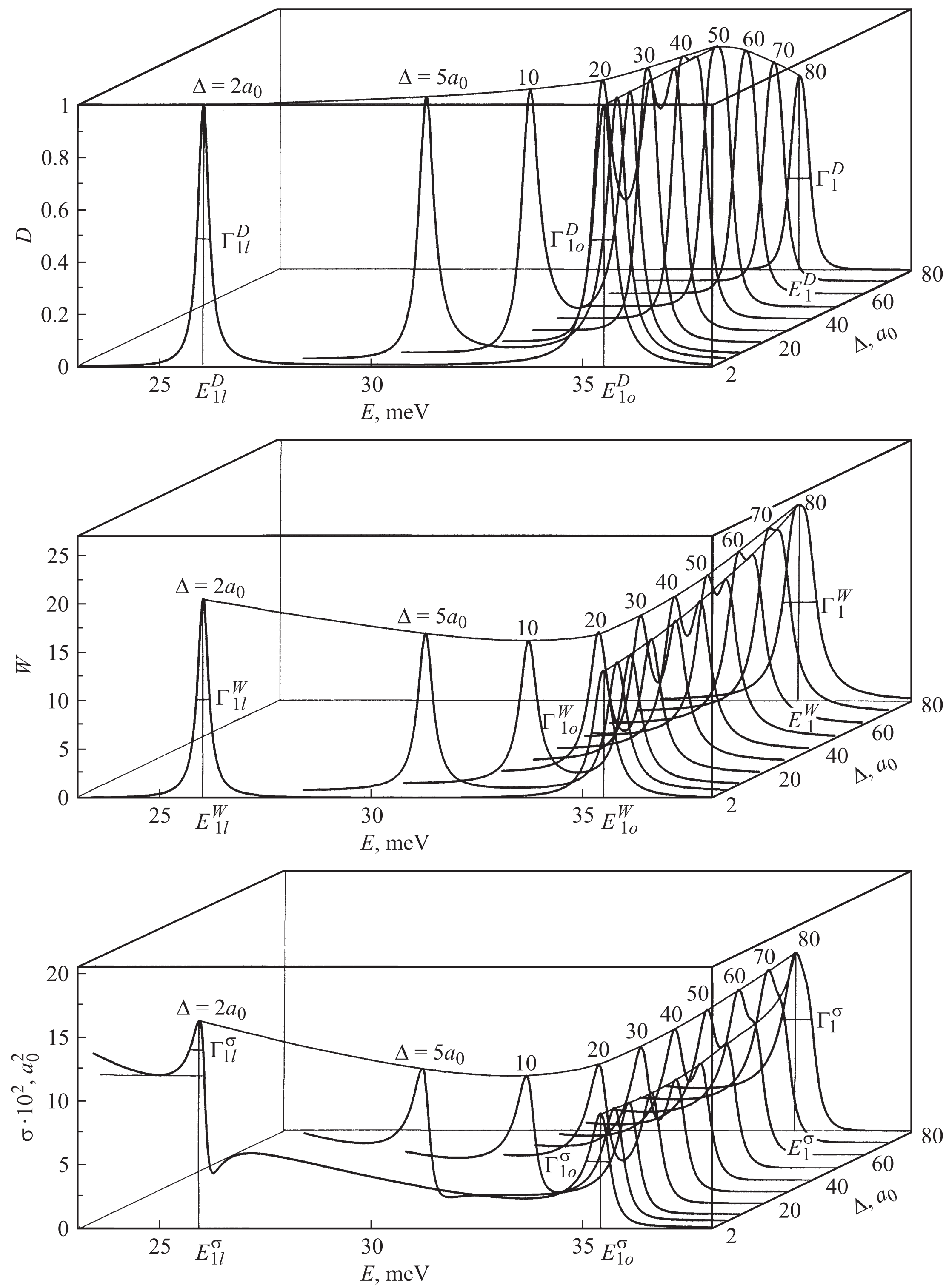

Рис. 1. Эволюция функций $D(E)$, $W(E)$, $\sigma(E)$ в зависимости от толщины внутреннего барьера Δ ТБРТС при $a = 25a_0$, $\Delta_1 = 5a_0$.

тральные параметры КСС. Резонансные энергии $E_{nl}^{D,W,\sigma}$ и $E_{no}^{D,W,\sigma}$ определяются положениями в шкале энергий точек касания касательной линии к обеим пикам n-й пары. При малой толщине Δ эти точки практически совпадают с положениями максимумов обоих пиков n-й пары КСС в шкале энергий (рис. 1). Интервал энергий между $E_{nl}^{D,W,\sigma}$ и левой точкой пересечения горизонтальной прямой нижнего пика на половине его высоты определяет резонансную полуширину $\Gamma_{nl}^{D,W,\sigma}/2$ нижнего КСС n-й пары резонансов. Интервал энергий между $E_{no}^{E,W,\sigma}$ и правой точкой пересечения горизонтальной прямой верхнего пика на половине его высоты

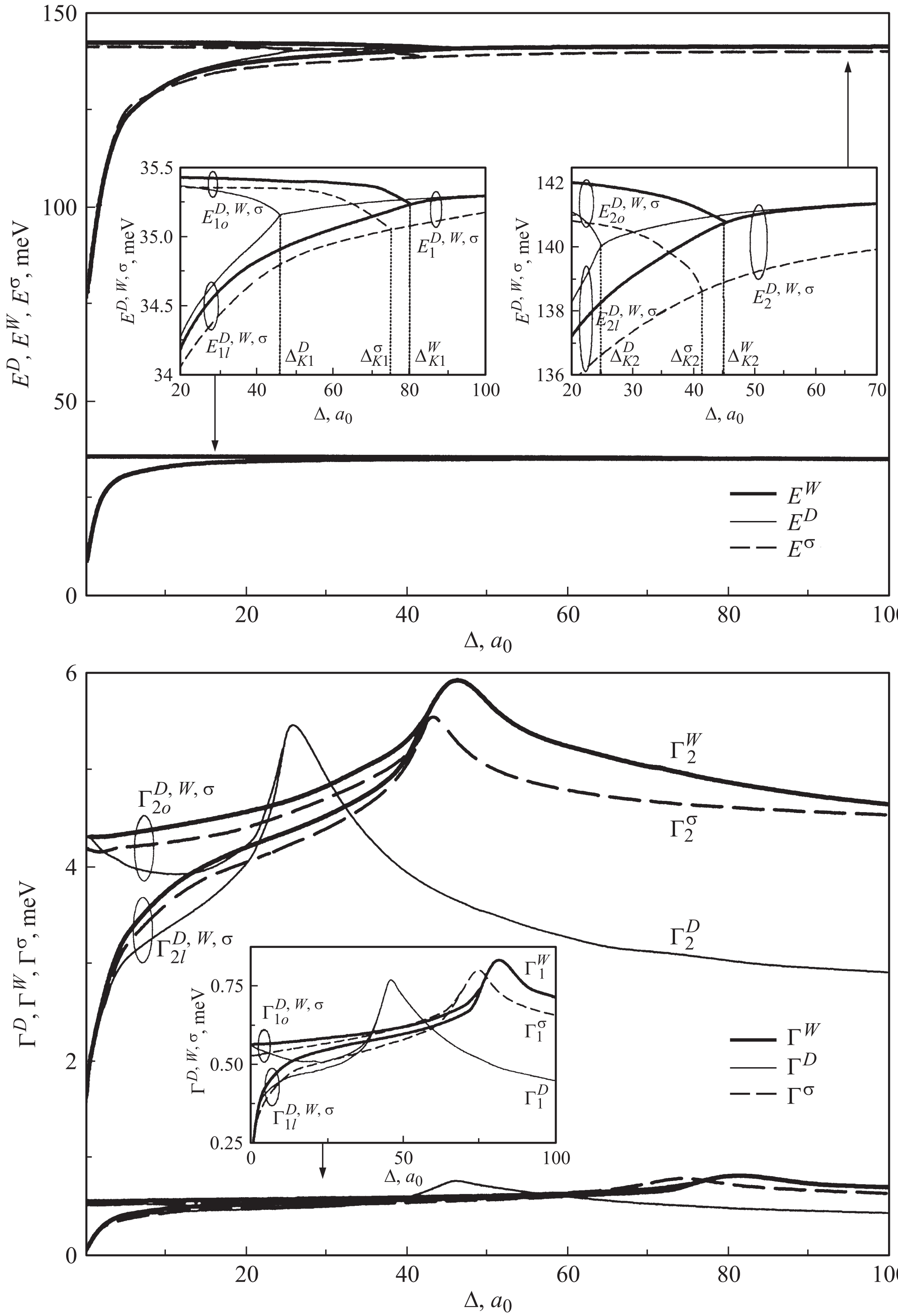

Рис. 2. Эволюция и коллапс спектральных параметров электрона в зависимости от толщины внутреннего барьера Δ ТБРТС.

определяет резонансную полуширину $\Gamma_{no}^{D,W,\sigma}/2$ верхнего КСС n-й пары резонансов. Высота пика на каждой кривой отсчитывается от горизонтальной прямой, проходящей через точку ее касания с низкоэнергетическими минимумами функции (рис. 1). В случае функций D и W высота пиков практически отсчитывается от оси энергий.

Как видно из рис. 1, с увеличением толщины барьера Δ пики пары КСС сближаются и при определенных критических значениях толщины $\Delta_{Kn}^{D,W,\sigma}$ происходит их коллапс, т.е. оба КСС сливаются в одно дублетное резонансное состояние (ДРС), которое характеризуется одной резонансной энергией $E_n^{D,W,\sigma}$ и резонансной шириной $\Gamma_n^{D,W,\sigma}$ при всех $\Delta > \Delta_{Kn}^{D,W,\sigma}$.

На примере ТБРТС с фиксированными размерами ям $(a = 25a_0)$ и внешних барьеров $(\Delta_1 = 5a_0)$ на рис. 2 показаны эволюции и коллапс двух ДРС $(n = 1, 2)$ с изменением толщины внутреннего барьера Δ. Из рисунка видно, что при изменении Δ от нуля до окрестности Δ^D_{Kn} значения соответствующих спектральных параметров, определяемые всеми тремя функциями, довольно близки между собой. Иерархия критических значений толщины, при которых происходит коллапс спектральных параметров, определяемые разными функциями такова: $\Delta^D_{Kn} < \Delta^\sigma_{Kn} < \Delta^W_{Kn}$. При $\Delta \geq \Delta^\sigma_{Kn}$ величины спектральных параметров E^σ_n, E^W_n и Γ^σ_n, Γ^W_n довольно близки между собой, но превышают соответственно E^D_n и особенно Γ^D_n.

Следует отметить следующее: из двух экспериментально возможных способов измерения спектральных параметров ДРС (через коэффициент D и сечение σ) в ТБРТС с толщиной внутреннего барьера меньшей критической применимы оба способа. Однако в ТБРТС с толщиной внутреннего барьера, превышающей критическую, по-видимому, предпочтительным будет метод сечения рассеяния σ, так как с увеличением толщины Δ это значение возрастает, а коэффициент D резко уменьшается.

Список литературы

[1] *Gmachl G., Capasso F., Sivco D.L., Cho A.Y.* // Rep. Prog. Phys. 2001. Vol. 64. P. 1533.

[2] *Newaz A.K.M., Song W., Mendez E.E., Lin Y., Nitta J.* // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 71. P. 195 303.

[3] *Елесин В.Ф., Катеев И.Ю.* // ФТП. 2005. Т. 39. Вып. 9. С. 1106.

[4] *Елесин В.Ф., Катеев И.Ю.* // ФТП. 2008. Т. 42. Вып. 5. С. 586.

[5] *Пашковский А.Б.* // Письма ЖЭТФ. 2005. Т. 82. Вып. 4. С. 228.

[6] *Гельвич Э.А., Голант Е.И., Пашковский А.Б.* // Письма ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 5. С. 13.

[7] *Ткач Н.В., Сети Ю.А., Зегря Г.Г.* // Письма ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 1. С. 70.

[8] *Ткач Н.В., Сети Ю.А.* // ФТП. 2009. Т. 43. Вып. 3. С. 357.

[9] *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544 с.

[10] *Горбацевич А.А., Журавлев М.Н., Капаев В.В.* // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. Вып. 2. С. 338.

[11] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2002. 802 с.