

# ПЕРЕСТРОЙКА РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ С БАЗИСОМ

В.Ф. Дегтярев

*Московский технический университет связи и информатики,  
Москва, Авиамоторная ул., 8а;  
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Поступила 13.10.2023

Исследован механизм перестройки резонансных туннельных уровней в процессе образования слоистой квантово-размерной структуры. Для частиц с энергией, равной энергии уровней, прозрачность структуры равна единице. Рассмотрена цепочка с базисом, состоящим из двух барьеров различной высоты. Установлено, что с увеличением числа звеньев происходит расщепление этих уровней на близкие подуровни и изменение волновой функции. Рассмотрен механизм перестройки уровней в цепочке, основанный на представлениях о точках смены фаз колебаний осцилляторов. Установлено, что параметры этих подуровней (энергия, полуширина и волновая функция) зависят от параметров ячейки и числа звеньев в цепочке. Рассмотрен случай, когда  $E < U$ .

*Ключевые слова: квантовая механика, квантовый барьер, волновая функция, прозрачность, наноэлектроника, резонансное туннелирование.*

DOI: 10/31145/2224-8412-2023-23-1-5-15

## **Введение**

Резонансное туннелирование в квантово-размерных структурах представляет собой новое быстро развивающееся направление исследований в наноэлектронике. Описанию свойств подобных структур посвящен ряд обзоров, например [1-3]. В этих работах достаточно подробно рассмотрена их энергетическая структура, оптические и электрические свойства. Следует ожидать, что роль квантово-размерных эффектов с увеличением размеров сверхрешетки будет возрастать, определяя их основные свойства.

В современных наноэлектронных приборах (резонансных туннельных диодах и транзисторах и др.) активная область имеет размеры порядка нескольких нанометров. Эта величина сравнима с длиной волны электрона и межатомным расстоянием типичных полупроводников, что приводит к существенному влиянию квантово-размерных эффектов на их работу. Среди этих эффектов значительную роль играют резонансные явления при туннелировании. Полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) и барьерами (КБ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для опто- и наноэлектроники [1].

Размерное квантование приводит к значительной перестройке энергетического спектра наноструктур [4,5]. При этом в квантово-размерной цепочке возникают новые резонансные уровни, приводя к существенному изменению их электрических и оптических свойств.

В данной работе изучен процесс перестройки этих уровней при увеличении числа квантово-размерных ячеек, образующих структуру.

### **Модели структур, изучаемых в работе, и методика моделирования**

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем непосредственного решения уравнения Шредингера для заданного потенциала с соответствующими граничными условиями в системе компьютерной алгебры MAPLE. Системы компьютерной алгебры помимо численного решения поставленной задачи позволяют получить и аналитическое решение, что делает расчеты более наглядными, и позволяет не только построить теоретическую модель физического процесса, но и визуализировать полученные результаты.

В работе рассмотрена цепочка со сложным базисом, состоящим из двух барьеров различной высоты. Схемы барьеров показаны на рис. 1. При этом рассмотрены два случая, когда в начале цепочки стоит высокий барьер (случай А) или низкий (случай Б) барьер. Последующие барьеры присоединяются к цепочке регулярным образом путем чередования высоких и низких барьеров (рис.1). При этом получается цепочка, состоящая из правильно чередующихся высоких и низких барьеров. Цепочка типа А начиналась с высокого барьера, и заканчивалась высоким (тип 1А), либо низким (тип 2А) барьером. Цепочка типа Б начиналась с низкого барьера, а заканчивалась высоким (тип 2Б), либо низким (тип 1Б) барьером. Параметры барьеров в цепочке принимались следующими: ширина барьеров ( $a$ ) и ям ( $b$ ) — 1 нм, что примерно соответствует межатомному расстоянию в кристаллах. Высота большого барьера ( $U_1$ ) составляла 2, высота малого барьера ( $U_2$ ) — 1. Амплитуда падающей волны принималась равной единице ( $\Psi_{in}(x) = 1 \cdot e^{ikx}$ ).

В работе исследована зависимость положения резонансных туннельных уровней (РТУ) и прозрачности структуры от характеристик цепочки. По зависимости  $T(E)$  ( $T$  — коэффициент прозрачности цепочки) определялось положение максимума пика ( $E_0$ ) и его энергетическая ширина  $\Delta E_{05}$  на половине высоты.

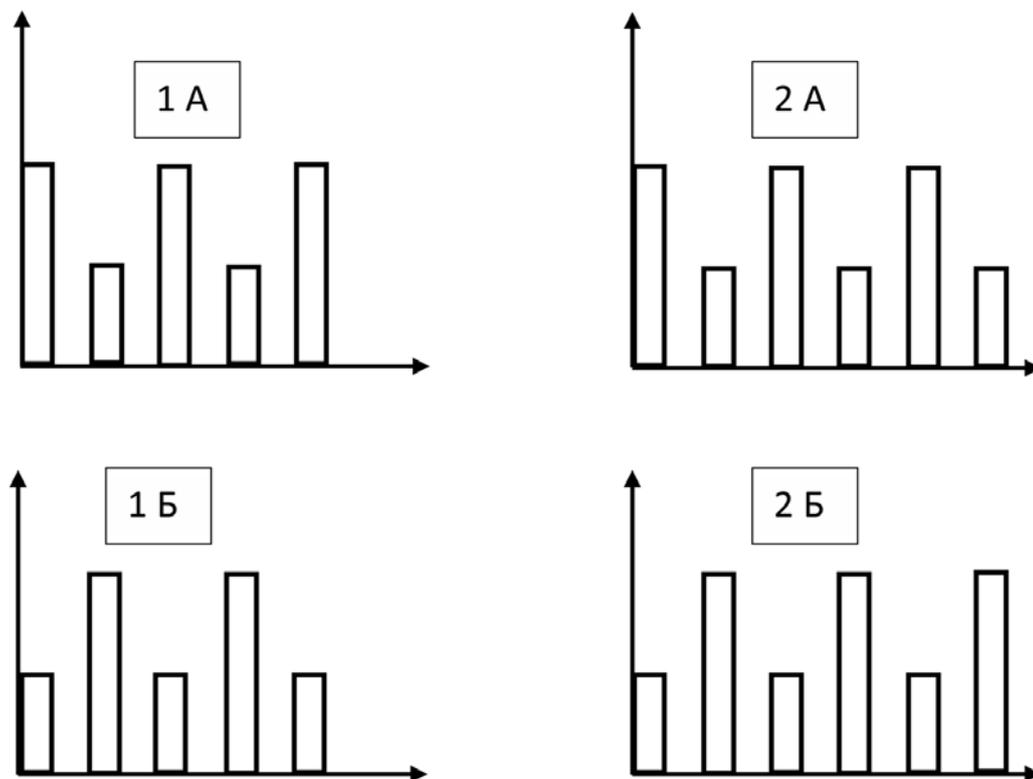


Рис. 1. Схемы квантово-размерных цепочек, исследованные в работе

### Некоторые характеристики резонансных уровней в простейшей ячейке, состоящей из двух барьеров

Рассмотрим сначала простейшую ячейку, состоящую из двух барьеров одинаковой высоты (2 эВ). В таком звене, также как и в потенциальной яме конечной глубины возникает система уровней [2,3], положение которых определяется условием  $b = n \frac{\lambda}{2}$ , где  $b$  — ширина ямы,  $\lambda$  — длина волны частицы с энергией частицы  $E$ ,  $n = 1, 2, \dots$  — число полувольт, укладывающихся на ширине ямы. Прозрачность цепочки для частиц с такой энергией равна единице. Энергия этих уровней составляет  $E_1 = 0.2289$  эВ,  $E_2 = 0.8872$  эВ и  $E_3 = 1.8181$  эВ. Энергетическое положение пиков зависит от ширины и глубины ямы. С ростом ширины ямы энергия пиков уменьшается. При постоянной ширине ямы положение резонансных пиков практически не зависит от ширины потенциального барьера, разделяющего звенья.

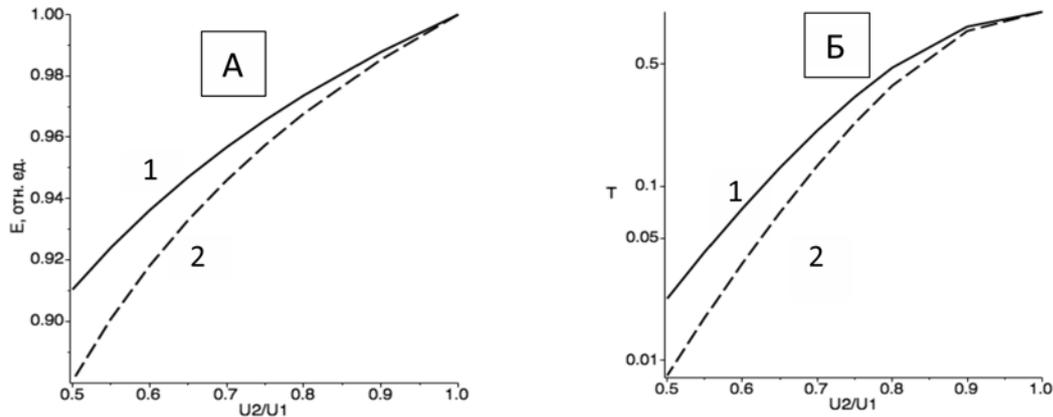


Рис. 2. Зависимость энергии РТУ (А) и прозрачности (Б) двухбарьерной структуры от высоты второго барьера ( $U_2$ ) для уровней :  
1 —  $E=0.2289$  эВ и 2-  $E=0.8872$  эВ. Высота первого барьера  $U_1=2$  эВ

Следует отметить, что прозрачность системы при уменьшении высоты второго барьера также уменьшается. Связано это с ухудшением резонансных характеристик системы. При высоте второго барьера 1 эВ прозрачность для электронов с энергией 0.2084 эВ составляет всего около 2%.

Присоединим к системам из двух барьеров третий в соответствии с рис.1. При этом наблюдается расщепление исходного уровня с энергией 0.2084 эВ на два подуровня . Схемы расщепления показаны на рис. 3 А и Б. Как видно, характер расщепления зависит от типа структуры.

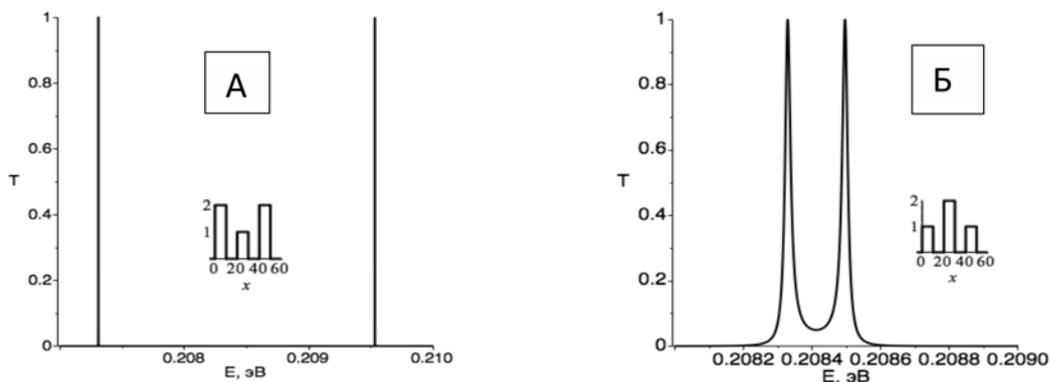


Рис. 3. Схема расщепления уровня 0.20841 эВ на подуровни в структурах типа А и типа Б (рис.1).

Структуры схематически показаны на врезках к рисункам.

Структура на рис. 3А на концах содержит высокие барьеры. Взаимодействие между соседними звеньями при этом достаточно велико, вследствие чего исходный уровень расщепляется на два подуровня с энергиями примерно 0.207 эВ и 0.209 эВ. В структуре второго типа (рис. 3Б) высокий барьер

расположен в центре. Поэтому взаимодействие между соседними ячейками слабее, соответственно меньше и расщепление исходного уровня (рис. 3Б). Величина расщепления составляет всего 0.0002 эВ. Подобный характер расщепления соответствует классическим представлениям о взаимодействии связанных осцилляторов, развитым, например в [6]. Резонансные частоты, согласно [6], находятся из решения уравнения  $(1 - \frac{\omega_1^2}{\omega^2})(1 - \frac{\omega_2^2}{\omega^2}) = k^2$ , где  $k$ -коэффициент связи;  $\omega_1, \omega_2$  — резонансные частоты изолированных осцилляторов. В случае одинаковых осцилляторов выражения для резонансных частот приобретают вид:

$$\omega_1 = \frac{\omega_0}{\sqrt{1+k}}; \quad \omega_2 = \frac{\omega_0}{\sqrt{1-k}}$$

Отсюда видно, что с ростом  $k$  величина расщепления действительно возрастает. При дальнейшем увеличении числа звеньев в цепочке происходит последовательное расщепление получившихся уровней.

### **Расщепление резонансных уровней при образовании квантово-размерной цепочки**

Проведенные компьютерные эксперименты показывают, что характер расщепления РТУ зависит от структуры цепочки барьеров. При этом в процессе образования сверхрешетки наиболее существенную перестройку претерпевают РТУ с энергией 0.207 эВ и 0.209 эВ. Такие энергии имеют структуры, показанные на рис. 3А. Кроме того в ряде цепочек на концах имеются звенья содержащие барьеры высотой 1 эВ (рис. 3Б). Наличие таких звеньев приводит к появлению уровней с энергией 0.2084 эВ. Прозрачность таких цепочек мала и экспоненциально уменьшается с ростом длины (рис. 4). В цепочках, содержащих более четырех барьеров высотой 2 эВ, эти уровни практически не наблюдаются. Поэтому в работе основное внимание уделяется перестройке цепочек, обладающих резонансными уровнями с энергией 0.207 эВ и 0.209 эВ, которые начинаются и заканчиваются высокими барьерами (звенья типа рис. 3А). Каждое такое звено в своем составе имеет два типа барьеров. Поэтому цепочка, содержащая  $N$  барьеров, будет состоять из  $\frac{N}{2}$  звеньев. С увеличением числа звеньев в цепи резонансные уровни расщепляются на подуровни, число которых равно удвоенному числу звеньев в системе (числу степеней свободы). Основными уровнями, возникающими в ячейке, являются РТУ с энергиями 0.207 эВ и 0.209 эВ. По мере увеличения числа звеньев каждый из этих уровней расщепляется на систему близких подуровней. Основная ячейка такой цепочки (рис. 3А) содержит две потенци-

альные ямы, разделенные сравнительно низким барьером. Вследствие этого электроны, локализованные в каждой яме достаточно эффективно взаимодействуют между собой. Это взаимодействие приводит к образованию либо четной (когда колебания в соседних полуволнах происходят в одной фазе), либо нечетной (когда колебания в соседних полуволнах происходят в противоположных фазах) конфигурации электронных волн. В результате вместо одного исходного уровня с энергией 0.2084 эВ образуются два подуровня. При этом уровню с энергией 0.207 эВ соответствует четная конфигурация (все колебания осцилляторов происходят в одной фазе), а уровню 0.209 эВ — нечетная конфигурация волновой функции. При увеличении длины цепочки третье звено взаимодействует с предыдущими аналогичным образом. В результате этого число пиков прозрачности соответствует числу звеньев в цепи. Отметим также, что расщепление уровней во взаимодействующих квантовых ячейках аналогично расщеплению резонансных частот в связанных резонансных контурах [7,8]. Энергия образующихся при этом уровней определяется числом точек смены фаз колебаний. Число таких точек изменяется от 0 до  $2N$ , где  $N$  — число основных ячеек. С ростом числа точек смены фаз энергия подуровня возрастает пропорционально числу этих точек. Следует отметить, что положение точек смены фаз не влияет на энергию подуровней. С увеличением длины цепочки энергетическое расстояние между подуровнями уменьшается, что связано с ослаблением взаимодействия между звеньями. На рис. 5 показано, как происходит перестройка уровней в цепочке типа А с ростом числа звеньев.

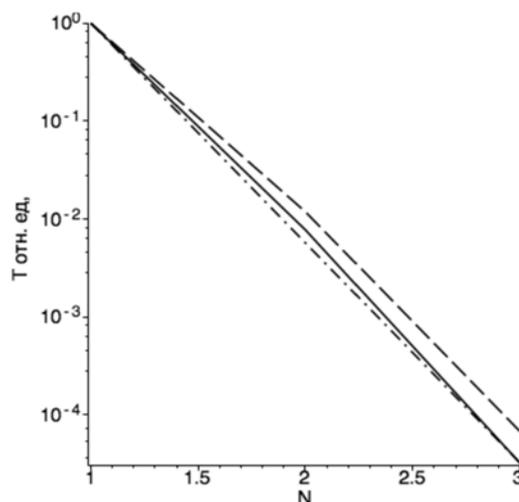


Рис. 4. Зависимость прозрачности цепочки для частиц с энергией 0.2084 эВ от числа звеньев. Сплошная кривая — структура 2Б, пунктирная -1Б, штрихпунктирная — 2А

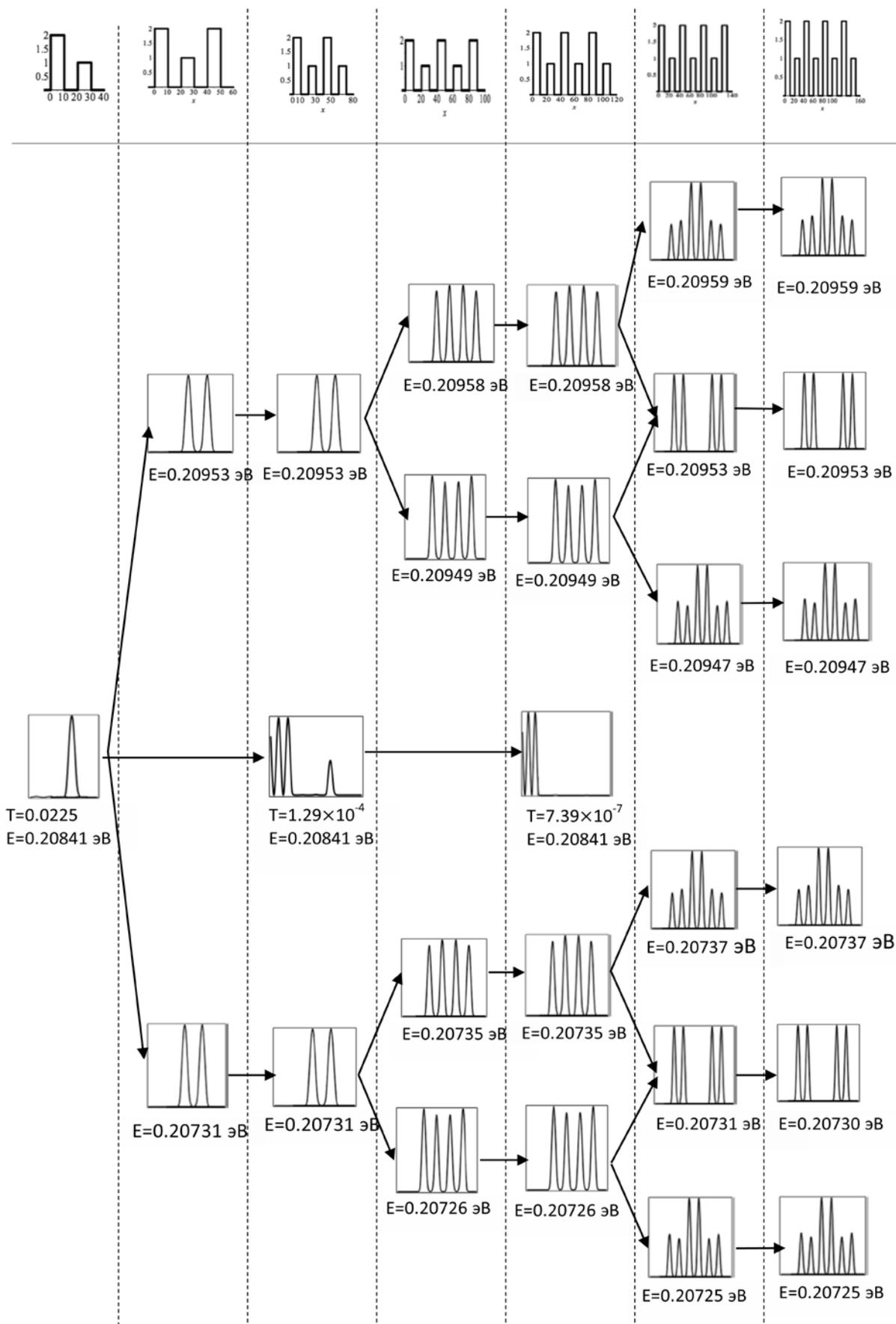


Рис. 5. Схема расщепления РТУ в цепочке типа А (рис. 1).

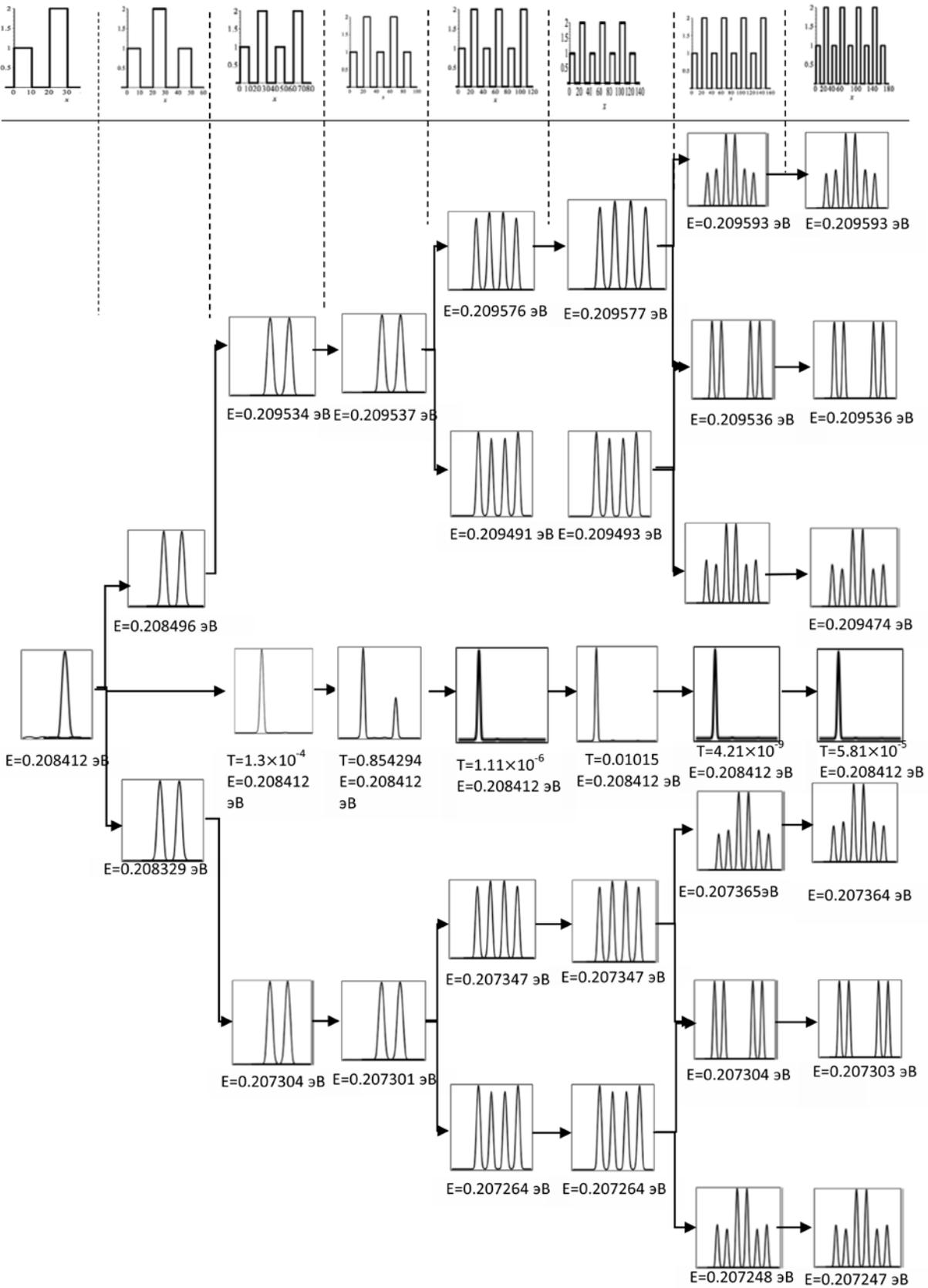


Рис. 6 Схема расщепления РТУ в структуре типа Б (см. рис. 1).

Рассмотрим некоторые особенности расщепления резонансных уровней в цепочке типа Б (рис. 1). Схема цепочки показана на рис. 1 (1Б и 2Б), а схема расщепления уровней на рис. 6. Цепочка этого типа начинается с барьера малой высоты. В дальнейшем в ней происходит чередование высоких и низких барьеров. В цепочках этого типа, также как и в цепочках типа А происходит расщепление исходных уровней на подуровни с энергией 0.207 эВ и 0.209 эВ что говорит об сходстве механизмов образования уровней в этих структурах. Цепочка типа Б всегда содержит на своих концах один или два барьера высотой 1 эВ (рис.1). Это приводит к тому, что в спектрах прозрачности цепочек такого типа наблюдаются уровни с энергией 0.20841 эВ. Причем в структурах, содержащих две ячейки, прозрачность оказывается выше, чем в системах с одной ячейкой. Это может быть вызвано определенным взаимодействием между ячейками. С ростом длины цепочки прозрачность для частиц такой энергии экспоненциально уменьшается. Эта зависимость показана на рис. 4.

### **Заключение**

В работе рассмотрены некоторые особенности взаимодействия квантовых ячеек между собой.

Показано, что при образовании квантово-размерной структуры элементарные ячейки, взаимодействуя между собой, образуют систему квантовых туннельных подуровней.

Установлено, что с уменьшением толщины барьера между ячейками коэффициент связи увеличивается и возрастает величина расщепления между подуровнями. При этом энергия подуровня с симметричной конфигурацией волновой функции уменьшается, а с антисимметричной — возрастает.

Рассмотрена модель взаимодействия квантовых ячеек между собой. Установлено, что характер взаимодействия аналогичен классическому взаимодействию резонансных контуров. На основании рассмотренной модели рассчитаны спектры прозрачности и волновые функции связанных ячеек.

Установлено, что, если раздвигать звенья цепочки с образованием промежуточной потенциальной ямы между ними, то коэффициент связи носит резонансный характер. При этом, если на ширине промежуточной ямы укладывается целое число полувольт, расщепление будет максимальным. При других значениях ширины промежуточной ямы прозрачность системы и расщепление подуровней пренебрежимо мало.

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность профессору А.П. Жилинскому за постоянный интерес к работе и полезные замечания.

**Литература:**

1. *Демиховский В.Я, Вугальтер Г.А.* Физика квантовых низкоразмерных структур// М. , Логос, 2000, 248 с.
2. *Давыдов А.С.* Квантовая механика //М., Наука, 1973, 702 с.
3. *Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А.* Курс теоретической физики, т. 2// М., Наука, 1971, 936 с.
4. *Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А.* Основы наноэлектроники// Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
5. *Аладышкин А.Ю.* Туннельные явления в нанозифике // Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
6. *Демирчян К.С, Нейман Л.Р, Коровкин Н.В., Чечурин В.Л.* Теоретические основы электротехники, т.1, // СПб.: Питер, 2003, 463 с.
7. *Стрелков С.П.* Введение в теорию колебаний.// СПб: Лань, 2005. 440 с. 8. Крауфорд Ф. Берклеевский курс физики. Т. 3. Волны. М.: Наука, 1984, 521 с.

## RESTRUCTURING RESONANCE TUNNEL LEVELS DURING THE FORMATION OF A QUANTUM- DIMENSIONED CHAIN WITH A BASIS.

V.F. Degtiarev

*Moscow Technical University of Communications and Informatics,  
Moscow, Aviamotornaya st., 8a;  
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Received 13.10.2023

The mechanism of rearrangement of resonant tunnel levels during the formation of a layered quantum-size structure has been studied. For particles with energy equal to the energy of the levels, the transparency of the structure is equal to unity. A chain with a basis consisting of two barriers of different heights is considered. It has been established that with an increase in the number of units, these levels split into close sublevels and the wave function changes. The mechanism of rearrangement of levels in the chain, based on ideas about the points of change of phases of oscillator oscillations, is considered. It has been established that the parameters of these sublevels (energy, half-width and wave function) depend on the cell parameters and the number of links in the chain. The case is considered when  $E < U$ .

*Keywords: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.*