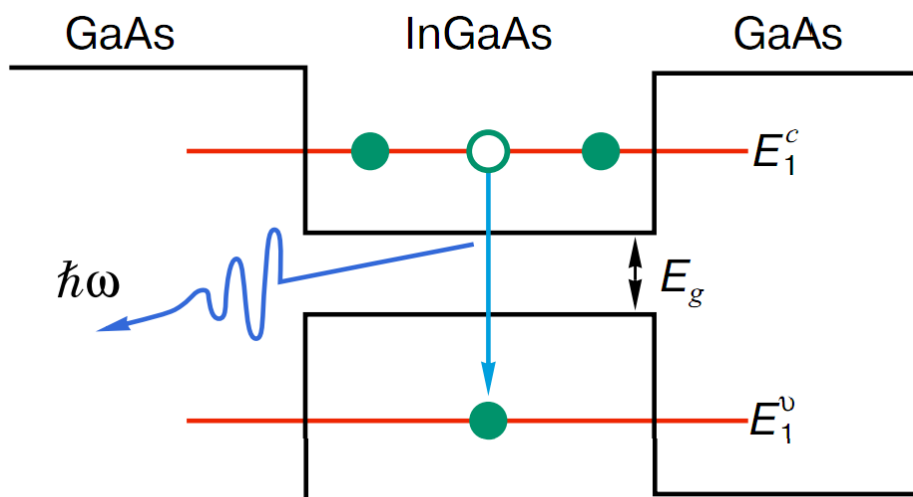


Энергетический спектр носителей заряда в структурах наноэлектроники



**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Липецкий государственный педагогический университет»**

В.В. Филиппов, А.А. Заворотный, С.В. Мицук

Энергетический спектр носителей заряда в структурах нанoeлектроники

Учебное пособие для студентов
высших учебных заведений

Липецк–2012

УДК 530.1
ББК 22.314
Ф 534

Печатается по решению кафедры физики
и редакционно-издательского совета
Липецкого государственного
педагогического университета

Филиппов, В.В. Энергетический спектр носителей заряда в структурах наноэлектроники: учебное пособие для студентов высших учебных заведений / В.В. Филиппов, А.А. Заворотный, С.В. Мицук. – Липецк: ЛГПУ, 2012. – 72 с.

ISBN 978-5-88526-559-1

Настоящее учебное пособие содержит 3 главы, посвященных описанию теоретических методов расчета электронных свойств низкоразмерных структур и моделированию квантово-энергетических параметров полупроводниковых наноструктур в рамках представлений квантовой механики.

Пособие предназначено студентам высших учебных заведений при усвоении дисциплин: «Наноэлектроника», «Микроэлектроника», «Физика низкоразмерных структур», «Физика конденсированного состояния», «Компьютерное моделирование и проектирование наноструктур», а также может быть использовано при изучении курсов по выбору.

Рецензенты: Поляков Н.Н., доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Липецкого государственного педагогического университета;

Мальш В.Н., доктор технических наук, профессор кафедры электроники телекоммуникаций и компьютерных технологий Липецкого государственного педагогического университета.

Учебное пособие для студентов вузов.

Филиппов Владимир Владимирович, Заворотный Анатолий Анатольевич,
Мицук Сергей Васильевич

ISBN 978-5-88526-559-1

- © Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Липецкий государственный педагогический университет», 2012
- © В.В. Филиппов, 2012
- © С.В. Мицук, 2012
- © А.А. Заворотный, 2012

Владимир Владимирович Филиппов
Анатолий Анатольевич Заворотный
Сергей Васильевич Мицук

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА
В СТРУКТУРАХ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Учебное издание

Редактор В.И. Буланова

Формат 60×84 1/16. Бумага офсетная.

Подписано в печать 6.02.2012г.

Усл. печ. л. 4,5. Тираж 500 экз.

Заказ № ____

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Липецкий государственный педагогический университет»
398020, г. Липецк, ул. Ленина, 42

Отпечатано в редакционно-издательском центре ЛГПУ

Содержание

Введение.....	4
Глава 1. Основы физики низкоразмерных систем.....	6
§ 1.1. Уравнение Шредингера и методы его решения.....	6
§ 1.2. Квантовые пленки, нити, точки и их энергетический спектр.....	16
§ 1.3. Плотность состояний свободных носителей заряда в наноструктурах.....	20
§ 1.4. Туннельный эффект в низкоразмерных структурах.....	24
Глава 2. Энергетический спектр носителей заряда в наноструктурах.....	30
§ 2.1. Энергетический спектр в бесконечно глубокой яме.....	30
§ 2.2. Энергетический спектр носителей заряда в конечномерной яме.....	32
§ 2.3. Энергетический спектр сверхрешеток.....	34
Глава 3. Энергетический спектр носителей заряда в ямах сложной формы.....	37
§ 3.1. Энергетический спектр свободных носителей заряда в наноструктурах во внешнем электрическом поле.....	37
3.1.1. Энергетический спектр свободных носителей заряда в бесконечно глубокой яме.....	37
3.1.2. Энергетический спектр свободных носителей заряда в электрическом поле в яме конечной глубины.....	42
§ 3.2. Энергетический спектр носителей заряда в туннельно-резонансных структурах.....	46
3.2.1. Моделирование энергетического спектра носителей заряда в резонансно-туннельных диодах.....	46
3.2.2. Энергетический спектр носителей заряда в туннельно-связанных квантовых ямах.....	54
Вопросы и задания для самостоятельной работы.....	65
Заключение.....	68
Список литературы.....	69

Введение

В течение последних десятилетий полупроводниковая технология достигла впечатляющих результатов в области миниатюризации приборов электроники. В настоящее время, возможно, изготавливать искусственные структуры, у которых химический состав, размеры и форма контролируются с нанометровой точностью, сравнимой с межатомными расстояниями. Эти создаваемые человеком системы слишком малы, чтобы вести себя подобно массивным полупроводникам, являющимся компонентами структур, и слишком велики, чтобы вести себя подобно атомам или молекулам. Когда размер системы становится сравнимым с характерным масштабом, имеет место квантовый размерный эффект. Свойства системы становятся зависящими от ее размера и формы. Способность новых технологий создавать твердотельные системы, в которых эти условия реализуются, открывает новые возможности для исследования конденсированных сред, имеющих эффективные размерности электронной подсистемы два, один и ноль.

Необходимо отметить, что следует различать понятия «наноразмерные структуры» и «низкоразмерные структуры». В первом случае главным признаком является линейный размер структуры, который хотя бы в одном направлении должен соответствовать нанометровому диапазону. *Низкоразмерными структурами (low-dimensional structures)* называют структуры, у которых, по крайней мере, один размер равен нулю. Такое определение носит, конечно, условный характер, поскольку реальный физический мир состоит из трехмерных объектов. Например, толщина плоскости, сконструированной из атомов, равна не нулю, а диаметру одного атома, что составляет около 10^{-10} м. Нужно понимать, что двумерные, одномерные и нульмерные структуры не являются таковыми в строгом геометрическом смысле, а называются так лишь потому, что их размер в одном, двух или трех направлениях меньше определенного «критического» значения, ниже которого физические свойства структуры в этом направлении (направлениях) становятся существенно отличными от свойств объемно-

го (трехмерного) материала, из которого данная структура изготовлена. В твердотельных структурах так обычно происходит, когда один из линейных размеров уменьшается до величины порядка нанометра. В научной и технической литературе наноразмерные структуры часто называют *наноструктурами (nanostructures)*. Квантово-механические явления в них являются доминирующими, что определяет их специфические электронные, оптические, магнитные и другие свойства.

В предлагаемом учебном пособии последовательно рассмотрены основные методы нахождения квантоворазмерных характеристик и особенности энергетического спектра в низкоразмерных системах. Рассмотрена физическая природа и основные закономерности проявления наиболее значимых квантовых явлений в рассматриваемых структурах.

Глава 1. Основы физики низкоразмерных систем

§ 1.1. Уравнение Шредингера и методы его решения

Основным законом в квантовой механике является уравнение для волновой функции $\psi = \psi(t, \vec{r})$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi. \quad (1.1)$$

В 1926 г. австрийский физик Эрвин Шредингер, развивая идеи Луи де Бройля о волновых свойствах потоков частиц вещества, первым записал это уравнение, за что и получил Нобелевскую премию в 1933 г. Уравнение Шредингера имеет в квантовой механике такое же фундаментальное значение, какое имеет второй закон Ньютона в классической механике.

С учетом структуры оператора Гамильтона

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \quad (1.2)$$

уравнение Шредингера можно преобразовать к виду

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi. \quad (1.3)$$

Это есть дифференциальное уравнение в частных производных. Для того чтобы среди множества различных решений уравнения Шредингера найти единственное $\psi = \psi(t, \vec{r})$, необходимо выделить его при помощи какого-либо дополнительного условия. В качестве такого условия обычно выбирают начальное условие

$$\psi(0, \vec{r}) = \psi_0(\vec{r}),$$

где $\psi_0(\vec{r})$ - известная функция. Это условие задает зависимость ψ от \vec{r} при $t = 0$. Кроме этого, волновая функция в любой момент времени должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_V \psi^* \psi dV = 1. \quad (1.4)$$

Зная функцию $\psi_0(\vec{r})$, определяющую состояние частицы в начальный момент времени $t = 0$, из уравнения Шредингера можно найти функцию $\psi = \psi(t, \vec{r})$,

описывающую состояние частицы в любой другой, более поздний момент времени $t > 0$.

Рассмотрим, как можно получить уравнение Шредингера из предположения, что волна де Бройля

$$\psi(t, x) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (1.5)$$

является решением этого уравнения. Волна де Бройля (1.5) описывает поток свободно летящих частиц, каждая из которых имеет энергию E и импульс p . Аргументами волновой функции ψ в данном случае служат время t и координата x . При этом энергию E и импульс p частицы следует рассматривать как параметры. Естественно предположить, что волна де Бройля есть частное решение некоторого уравнения, которое выражает общий закон, определяющий движение частиц в рамках квантовой механики. В таком случае это уравнение не должно содержать в себе параметров, характеризующих какой-то один вид движения частицы. Исходя из этого предположения, найдем дифференциальное уравнение, частным решением которого является волна де Бройля (1.5) или

$$\psi(t, x) = Ae^{-i(\omega t - kx)}. \quad (1.6)$$

При этом будем иметь в виду, что энергия свободной частицы E и импульс p связаны соотношением

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (1.7)$$

Найдем первую производную от функции (1.6) по t и вторую по x :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi, \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2\psi.$$

При помощи формул де Бройля

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (1.8)$$

эти равенства можно записать так:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \psi.$$

Из этих равенств нетрудно исключить параметры E и p . Правые части этих равенств совпадают в силу соотношения (1.7). Следовательно, должны быть равны их левые части. Таким образом, приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (1.9)$$

В общем случае волновая функция свободной частицы может зависеть от всех координат: x , y и z . Очевидно, что в этом случае она должна удовлетворять уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi, \quad (1.10)$$

которое с учетом обозначения оператора \hat{T} кинетической энергии

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

можно записать так:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{T} \psi. \quad (1.11)$$

Это уравнение для свободной частицы нетрудно обобщить на случай, когда частица движется в консервативном силовом поле. В этом случае ее полная энергия будет равна сумме кинетической и потенциальной энергий. Полной энергии частицы в квантовой механике соответствует оператор \hat{H} , определяемый формулой

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}.$$

Таким образом, более общее уравнение для волновой функции получим, если заменим в уравнении (1.11) оператор кинетической энергии \hat{T} на оператор полной энергии \hat{H} . В результате придем к уравнению Шредингера (1.1). Строго говоря, приведенные преобразования не являются выводом уравнения Шредингера, но они помогают понять его происхождение и физическое содержание [2].

Точное решение стационарного уравнения Шредингера $\hat{H}\psi(q) = E\psi(q)$ возможно только для простейших систем (атом водорода, молекулярный ион водорода, гармонический осциллятор и т.д.). Большинство задач квантовой химии

и механики решается с помощью приближенных методов. Наиболее важными подходами к получению приближенных решений являются *вариационный метод* и *теория возмущений*. Есть также немаловажные методы приближенного решения уравнения Шредингера – *метод разделения переменных* и *численный метод*.

Рассмотрим подробнее каждый из методов.

Вариационный метод основывается на следующей теореме [11].

Теорема. *Если самое низкое собственное значение гамильтониана системы \hat{H} равно E_1 , а ψ_1 - точная волновая функция этого состояния, то для любой произвольной нормированной функции ψ выполняется соотношение*

$$\bar{E} = \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau \geq \int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 d\tau. \quad (1.12)$$

Приближенную функцию, подставляемую в (1.12), называют обычно *пробной волновой функцией*. Чем лучше пробная волновая функция аппроксимирует точную, тем ближе значение энергии, полученное с помощью этой пробной функции, к истинному значению. Для придания гибкости пробной функции в нее удобно ввести неизвестные варьируемые параметры c_1, c_2, \dots, c_n . Величины c_1, c_2, \dots, c_n находят из условий

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial c_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1.13)$$

Следует помнить, что в общем случае вариационная теорема и, как следствие, вариационный принцип позволяют корректно определить только низшее энергетическое состояние. Кроме того, волновая функция, оптимальная для энергии, не обязательно оптимальна для расчета других свойств квантово-механической системы.

Другим важнейшим приближенным методом решения уравнения Шредингера является **теория возмущений** [11]. В ее основе лежит идея нахождения волновых функций и энергетических уравнений исследуемой сложной системы с гамильтонианом \hat{H} исходя из соответствующих данных, известных для более

простой системы (систем) с оператором Гамильтона $\hat{H}^{(0)}$. В этом случае необходимо представить оператор \hat{H} в виде

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}', \quad (1.14)$$

где λ - параметр; $\lambda \hat{H}'$ - так называемое возмущение оператора $\hat{H}^{(0)}$, которое должно быть по отношению к нему достаточно малым. Оператор $\hat{H}^{(0)}$ выбирается таким образом, чтобы для него были известны ряды его собственных значений $E_n^{(0)}$ и собственные функции $\psi_n^{(0)}$, т.е. решена задача

$$\hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}. \quad (1.15)$$

Уравнение Шредингера для искомой системы с оператором (1.14) запишется в виде

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}' \right) \psi_n = E_n \psi_n. \quad (1.16)$$

Будем считать, что в ряду E_n ($n = 1, 2, \dots$) нет одинаковых значений, т.е. все E_n невырождены. Так как ψ_n и E_n являются функциями λ , то можно предположить справедливость их разложения в ряды вида

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots, \quad (1.17)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots, \quad (1.18)$$

где $E^{(m)}$ и $\psi^{(m)}$ - поправки m -го порядка соответственно к энергии и волновой функции. Подставляя (1.17) и (1.18) в (1.16), получим

$$\begin{aligned} & \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} + \lambda \left(\hat{H}' \psi_n^{(0)} + \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(1)} \right) + \lambda^2 \left(\hat{H}' \psi_n^{(1)} + \hat{H}^{(0)} \psi_n^{(2)} \right) + \dots = \\ & = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} + \lambda \left(E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} \right) + \lambda^2 \left(E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} \right) + \dots \end{aligned} \quad (1.19)$$

Чтобы уравнение (1.19) удовлетворялось при различных λ , коэффициенты при λ в одной степени по обе стороны уравнения должны быть равны:

$$\hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}; \quad (1.20)$$

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_n^{(1)} = E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} - \hat{H}' \psi_n^{(0)}; \quad (1.21)$$

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_n^{(2)} = E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} - \hat{H}' \psi_n^{(1)}. \quad (1.22)$$

Систему уравнений (1.20) – (1.22) называют системой рекуррентных формул теории возмущений Рэлея – Шредингера, так как аналогичные уравнения возникают при использовании введенного еще Рэлеем метода расчета колебаний струны.

Уравнение (1.20) не что иное, как уравнение (1.15), решения которого известны. Для решения уравнений (1.21) и (1.22) используют следующий алгоритм:

1) функции $\psi_n^{(1)}$ и $\psi_n^{(2)}$ представляют в виде разложения в ряд по невозмущенным ортонормированным функциям

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m=1} c_m \psi_m^{(0)}, \quad (1.23)$$

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{m=1} c_m \psi_m^{(0)}; \quad (1.24)$$

2) подставляют в систему, умножая слева обе части полученных уравнений на $\psi_n^{(0)}$ и интегрируя полученное выражение, находят энергии возмущения первого и второго порядка и значения функций $\psi_n^{(1)}$ и $\psi_n^{(2)}$.

С учетом полученных поправок первого и второго порядков E_n и ψ_n примут вид:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \hat{H}'_{nn} + \lambda^2 \sum \frac{(\hat{H}'_{mn})^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots, \quad (1.25)$$

$$\begin{aligned} \psi_n = & \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{m(\neq n)} \frac{\hat{H}'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + \\ & + \lambda^2 \sum_{k(\neq n)} \left[\sum_{m(\neq n)} \frac{\hat{H}'_{km} \hat{H}'_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{\hat{H}'_{km} \hat{H}'_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right] \psi_k^{(0)}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

На практике, как правило, выбирают параметр $\lambda = 1$.

Использование теории возмущений особенно эффективно при решении качественных задач, когда требуется определитель, например, как скажется геометрическая деформация или замена одного структурного фрагмента молекулы другим на энергетических уровнях и волновых функциях молекулы. Кроме того, при помощи теории возмущений принципиально возможно изучать процес-

сы, зависящие от времени, в отличие от вариационного подхода, применимого только для стационарных состояний.

Перейдем к рассмотрению **численного метода** [4]. Большинство численных методов имеют одну общую черту – они используют один прием для замены волновой функции $\Psi(\vec{r}, t)$ на вектор-столбец $\psi(t)$, а дифференциального оператора H_{op} на матрицу $[H]$, вследствие чего уравнение Шредингера превращается из дифференциального уравнения в частных производных $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H_{op} \Psi(\vec{r}, t)$ в матричное уравнение (или уравнение в конечных разностях) $i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi(t)\} = [H]\{\psi(t)\}$.

В целом производимые операции можно называть переходом от дифференциального уравнения к разностному уравнению. Для этой цели используется стандартная процедура, называемая методом конечных разностей:

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \rightarrow \frac{1}{a^2} [\Psi(x_{n+1}) - 2\Psi(x_n) + \Psi(x_{n-1})], \quad \text{где } x_n = na$$

и

$$U(x)\Psi(x) \rightarrow U(x_n)\Psi(x_n).$$

Это позволяет записать уравнение в форме (при обозначениях $t_0 \equiv \hbar^2/2ma^2$ и $U_n \equiv U(x_n)$)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\Psi_n}{dt} &= [H_{op}\Psi]_{x=x_n} = (U_0 + 2t_0)\Psi_n - t_0\Psi_{n-1} = \\ &= \sum_m [(U_0 + 2t_0)\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}] \Psi_m, \end{aligned} \quad (1.27)$$

где $\delta_{n,m}$ есть символ Кронекера, равный единице при $n = m$ и равный нулю при $n \neq m$. Уравнение (1.27) может быть записано в матричном виде:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \{\psi(t)\} = [H]\{\psi(t)\}. \quad (1.28)$$

Элементы матрицы, описывающей гамильтониан, определяются выражением

$$H_{n,m} = [U + 2t_0]\delta_{n,m} - t_0\delta_{n,m+1} - t_0\delta_{n,m-1}, \quad (1.29)$$

где $t_0 \equiv \hbar^2/2ma^2$ и $U_n \equiv U(x_n)$. Такая запись означает, что матрица, осуществляющая представление оператора \hat{H} , имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & N-1 & N \\ 1 & 2t_0 + U_1 & -t_0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ N-1 & 0 & 0 & \dots & 2t_0 + U_{N-1} & -t_0 \\ N & 0 & 0 & \dots & -t_0 & 2t_0 + U_N \end{pmatrix}. \quad (1.30)$$

Для заданного потенциала $U(x)$ данная матрица может быть записана явно, как только выберется соответствующая постоянная решетки a .

После того как получили представление уравнения Шредингера в матричной форме (уравнение (1.28)), найдем собственные значения E_α и собственные вектора $\{\alpha\}$ матрицы $[H]$:

$$[H]\{\alpha\} = E_\alpha\{\alpha\}. \quad (1.31)$$

Используя это уравнение, легко убедиться в том, что волновая функция $\{\psi(t)\} = \exp(-iE_\alpha t/\hbar) \cdot \{\alpha\}$ удовлетворяет уравнению (1.28). Поскольку уравнение (1.28) является линейным, любая суперпозиция таких решений

$$\{\psi(t)\} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} e^{-iE_{\alpha} t/\hbar} \{\alpha\} \quad (1.32)$$

также будет решением. Выражение (1.32) является достаточно «общим» в том смысле, что любое решение уравнения (1.28) может быть записано в таком виде. Для заданного начального состояния мы можем найти коэффициенты C_{α} , так что волновая функция в последующие моменты времени t в этом случае дается выражением (1.32).

Динамику системы можно описать в терминах собственных значений и соответствующих собственных векторов, связанных с этими уровнями матрицы $[H]$. На основании вышеуказанного, первым шагом при рассмотрении любой

системы является запись матрицы $[H]$ и поиск ее собственных значений и собственных векторов [4].

Рассмотрим метод **разделения переменных** на примере атома водорода [10].

Стационарные состояния частицы, движущейся в центрально-симметричном поле, описываются уравнением Шредингера, записанным в виде

$$\nabla^2 \psi + (2m/\hbar^2)[E - E_n(r)]\psi = 0. \quad (1.33)$$

Потенциальная энергия $E_n(r)$ в этом случае есть функция расстояния частицы до центра сил. Если от декартовых координат перейти к сферическим, то уравнение (1.33) разделяется. Как известно, оператор Лапласа ∇^2 в сферических координатах имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2}{r^2}, \quad (1.34)$$

где

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (1.35)$$

Подставляя (1.34) в уравнение Шредингера и полагая

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi), \quad (1.36)$$

получаем

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 [E - E_n(r)] = -\frac{1}{Y} \nabla_{\theta, \varphi}^2 Y. \quad (1.37)$$

Так как левая и правая части этого равенства зависят от различных независимых переменных, то эти части по отдельности должны быть равными одной и той же постоянной, которую мы обозначим λ .

Таким образом, для радикальной функции R и сферической функции $Y(\theta, \varphi)$ получаем уравнения

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [E - E_n(r)] - \frac{\lambda}{r^2} \right\} R = 0, \quad (1.38)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \lambda Y = 0. \quad (1.39)$$

В уравнение (1.38) входит потенциальная энергия $E_n(r)$. Поэтому вид радикальных функций и собственные значения энергии определяются конкретным видом поля, в котором движется частица. Уравнение (1.39) для всех сферически-симметричных полей одинаково и допускает дальнейшее разделение переменных. Полагая

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta) \cdot \Phi(\varphi) \quad (1.40)$$

и обозначая постоянную разделения μ^2 , для функций P и Φ находим следующие уравнения:

$$d^2 \Phi / d\varphi^2 + \mu^2 \Phi = 0, \quad (1.41)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left(\lambda - \frac{\mu^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0. \quad (1.42)$$

Общее решение уравнения (1.41) имеет вид

$$\Phi(\varphi) = Ae^{i\mu\varphi} + Be^{-i\mu\varphi}.$$

Из требования однозначности решения вытекает, что μ должно быть любым положительным или отрицательным целым числом. Поэтому все собственные функции уравнения (1.41) могут быть представлены формулой

$$\Phi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (1.43)$$

Перейдя в уравнении (1.42) к независимой переменной $\xi = \cos \theta$, можно это уравнение записать в виде

$$\frac{d}{d\xi} \left[(1 - \xi^2) \frac{dP}{d\xi} \right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] P = 0. \quad (1.44)$$

Функция $P(\cos \theta)$ должна быть непрерывной и конечной при всех углах θ . Чтобы удовлетворять этому условию, параметр λ должен быть равен $\lambda = l(l+1)$, где l – неотрицательное целое число.

Решение уравнения (1.44) при этом может быть представлено как

$$P_l^m = \frac{1}{2^l l!} (1 - \xi^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d\xi^{l+m}} (\xi^2 - 1)^l, \quad (1.45)$$

где P_l^m – присоединенные функции Лежандра.

Отметим, что при заданном l число m может принимать лишь $2l+1$ различных значений:

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad (1.46)$$

Используя условие нормировки для функции ψ и дополнительные справочные материалы, получаем окончательное решение

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} e^{im\varphi} \cdot P_l^m(\cos\theta). \quad (1.47)$$

Данный метод позволяет получить точные решения уравнений квантовой механики для атома водорода конечной массы.

Таким образом, мы рассмотрели самые распространенные методы решения уравнения Шредингера в случае, когда необходимо решить сложную задачу.

Знание возможностей применения уравнения Шредингера и его решение постоянно используется при описании носителей заряда в наноструктурах, к описанию основных характеристик которых и перейдем.

§ 1.2. Квантовые пленки, нити, точки и их энергетический спектр

Квантово-размерные структуры обладают целой совокупностью уникальных свойств, весьма далеких от того, что можно наблюдать в системе обычных, трехмерных электронов и дырок. Наиболее ярким проявлением этого является квантовый эффект Холла в двумерных системах, открытый в 1980 г. и всего пять лет спустя принесший своему первооткрывателю Нобелевскую премию. Такие структуры могут служить основой для создания новых типов полупроводниковых приборов, в первую очередь для опто- и наноэлектроники.

То обстоятельство, что квантово-размерные структуры находятся в центре внимания именно сейчас, вызвано интенсивным развитием в последние годы технологии изготовления полупроводниковых структур – молекулярно-лучевой

эпитаксии, газофазной эпитаксии, нанолитографии, открытием явления самоорганизации наноструктур. Это дает возможность создания такого рода структур любого профиля с точностью до одного атомного слоя [14].

Определим условия, необходимые для наблюдения квантовых размерных эффектов:

1) расстояние между энергетическими уровнями $E_{n+1} - E_n$ должно значительно превосходить тепловую энергию носителей:

$$E_{n+1} - E_n \gg kT,$$

поскольку в противном случае практически одинаковая заселенность соседних уровней и частые переходы носителей между ними делают квантовые эффекты ненаблюдаемыми;

2) говорить о наличии в системе отдельных дискретных уровней можно лишь в том случае, когда расстояние между отдельными уровнями превышает неопределенность ΔE , т.е.

$$E_{n+1} - E_n \gg \frac{\hbar}{\tau} = \frac{e}{m\mu},$$

где μ – подвижность носителей заряда, τ – время релаксации;

3) необходимы малые размеры структур, достаточно низкие температуры, высокие подвижности носителей и не слишком высокая их концентрация, т.к. расстояние между уровнями размерного квантования пропорционально $1/a^2$;

4) необходимо высокое качество поверхностей, ограничивающих движение носителей в квантовых ямах, нитях и точках, т.е. чтобы размеры шероховатостей, неизбежно существующих на любой поверхности, были меньше дебройлевской длины волны носителей. Если этого не будет, то при каждом отражении от границы частица «забывает» о своем состоянии до отражения, т.е. на границе происходит эффективное рассеивание;

5) границы не должны содержать высокой плотности заряженных центров, приводящих к дополнительному рассеянию.

После определения условий, необходимых для наблюдения квантово-размерных эффектов стоит определиться с тем, что мы будем понимать под

словосочетаниями «квантовая пленка», «квантовая нить» и «квантовая точка» [9].

Квантовой пленкой или иначе структурой с двумерным электронным газом называется наноструктура, в которой движение носителей заряда ограничено лишь в одном направлении, в плоскости, т.е. пленки представляют собой ямы. Примерами квантовых пленок могут служить проводящие каналы в униполярных транзисторах (МОП-структуры на кремнии) и узкозонные слои в гетероструктурах из соединений A^3B^5 для инжекционных лазеров.

Квантовой нитью или структурой с одномерным электронным газом называется такая структура, где движение носителей заряда ограничено не в одном (как в случае с квантовыми пленками), а в двух направлениях, как в микроскопической проволоке или нити. В этом случае носители могут свободно двигаться лишь в одном направлении, вдоль нити (например, вдоль оси x).

И, наконец, под *квантовыми точками* или структурами с нульмерным электронным газом будем понимать структуры, в которых движение носителей заряда ограничено по всем трем направлениям. Эти квантовые структуры напоминают искусственные атомы. Примерами квантовых точек являются нанокристаллики одного материала на поверхности растущего эпитаксиального слоя другого материала.

Энергетический спектр электронов E – одна из важнейших характеристик объекта, определяющая его электронные свойства и реакцию на внешние воздействия.

Перейдем к обсуждению энергетического спектра вышеназванных структур [9, 14]. Для всех этих структур спектр будем дискретным.

Для начала рассмотрим спектр квантовых пленок. Обратимся к рис. 1. Если пленка занимает область $0 < z < a$, то в этом случае волновые функции и энергетические уровни квантовых состояний даются простыми формулами:

$$\psi_n(z) = \sqrt{2/a} \sin \frac{\pi n}{a} z, \quad (1.48)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad (1.49)$$

где m – эффективная масса электрона. Эта масса показывает характер взаимодействия электрона с кристаллической решеткой.

Формулы (1.48) и (1.49) применимы только для бесконечно глубокой квантовой ямы. Это приближение связано с тем, что значения E_n , даваемые формулой (1.49), очень малы по сравнению с ее действительной глубиной Φ . Это условие, которое для нижних уровней можно записать в виде $a > \pi\hbar/(2m\Phi)^{1/2}$ при $m = 0,1m_0$, соответствует толщинам пленки более 1 нм, что соответствует нескольким межатомным расстояниям. Во всех реальных структурах это условие соблюдается.

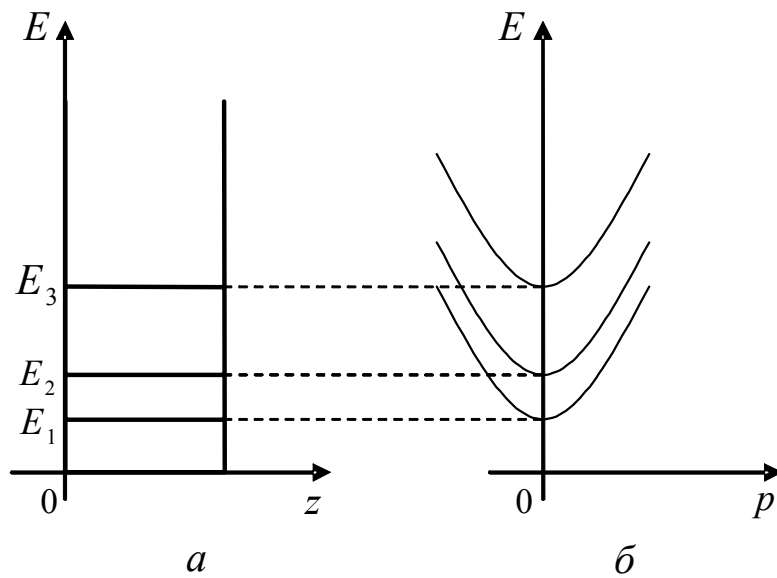


Рис.1. (а) Энергетические уровни E_n для движения электронов вдоль направления z , (б) энергетические подзоны $E(p)$

Формула (1.49) справедлива только для тонких пленок. При этом эта формула дает оценку только для дискретных компонент энергии. Полная же энергия носителей заряда в квантово-размерной пленке носит смешанный дискретно-непрерывный спектр:

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}, \quad (1.50)$$

где p_x и p_y – компоненты импульса в плоскости слоя, m – эффективная масса.

За счет непрерывной компоненты энергетического спектра электроны, принадлежащие одному и тому же уровню E_n , могут иметь любую энергию от

E_n до бесконечности (рис. 1). Такую совокупность состояний для данного фиксированного n называют *подзоной размерного квантования*.

В случае квантовой нити носители свободно перемещаются лишь в одном направлении, вдоль нити (например, вдоль оси x), а в поперечном сечении (плоскости yz) энергия квантуется, принимает дискретные значения E_{mn} . Полный энергетический спектр носителя при этом тоже является дискретно-непрерывным, но лишь с одной степенью свободы:

$$E = E_{mn} + \frac{p_x^2}{2m}. \quad (1.51)$$

Спектр квантовых нитей, так же как и пленок, представляет собой совокупность подзон размерного квантования, но уже не двумерных, а одномерных.

Энергетический спектр квантовых точек уже не содержит непрерывной компоненты, т.е. не состоит из подзон, а является чисто дискретным:

$$E = E_{lmn}. \quad (1.52)$$

Из всего сказанного делаем вывод, что *в твердотельных структурах*, где хотя бы вдоль одного направления движение носителей ограничено очень малой областью, *энергетический спектр носителей заряда заметно меняется и становится частично или полностью дискретным*. Подобное изменение спектра за счет размерного квантования приводит к существенному изменению всех электронных свойств системы по сравнению с массивным образцом того же материала.

Знание спектра квантово-размерных структур позволяет рассчитать все равновесные электронные свойства системы.

§ 1.3. Плотность состояний свободных носителей заряда в наноструктурах

Важной характеристикой любой электронной системы наряду с ее энергетическим спектром является *плотность состояний* $g(E)$ [5, 9, 14]. *Плотность состояний* $g(E)$ – это число квантовых состояний электронов на единицу объе-

ма, площади или длины (в зависимости от размерности объекта), отнесенного к единичному интервалу энергий. Согласно этому определению, плотность состояний

$$g(E) = \frac{dn(E)}{dE}, \quad (1.53)$$

где $dn(E)$ – число возможных состояний в интервале энергий от E до $E + dE$. Знание плотности состояний $g(E)$ и вероятности их заполнения электронами $f(E)$ позволяет установить распределение электронов рассматриваемой системы по квантовым состояниям и описывать электрические, оптические и некоторые другие свойства системы. Электроны обладают полуцелым спином. Поэтому вероятность заполнения ими квантовых состояний определяется статистикой Ферми-Дирака и подчиняется принципу Паули.

Более общая формула плотности состояний, чем формула (1.53), учитывающая объем структуры и ее размерность, представляет собой вид

$$g^d(E) = \frac{1}{V_d} \cdot \frac{\partial N}{\partial E}, \quad (1.54)$$

где V_d – объем структуры, d – размерность структуры ($d = 0, 1, 2, 3$), N – число энергетических уровней. Если $d = 0$, то структура принимает вид квантовой точки, если $d = 1$, то – квантовая нить, если $d = 2$, то – квантовая яма и если $d = 3$, то структурой будет являться безграничный газ, т.е. газ, не ограниченный ни в одном направлении.

Для безграничного газа энергетический спектр на графике представляет собой параболу, поэтому плотность состояний $g(E)$ в этом случае возрастает с увеличением энергии от края разрешенной зоны как \sqrt{E} (рис. 2).

Найдем $g(E)$ для двумерной электронной системы с энергетическим спектром (1.50). Для этого предварительно введем вспомогательную функцию $G(E)$ – полное число состояний в интервале энергий от 0 до E .

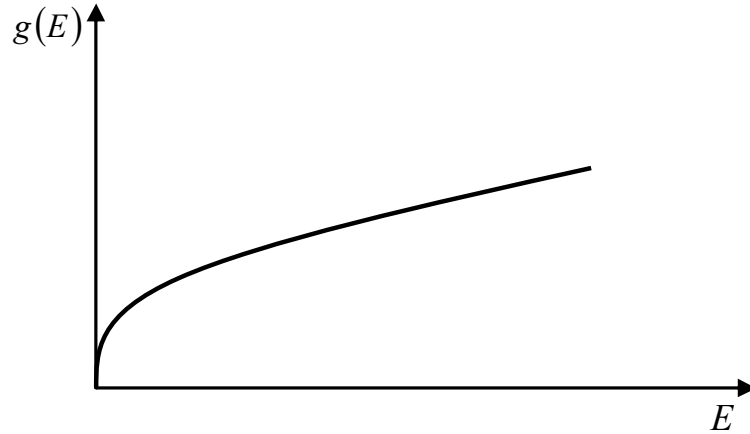


Рис. 2. Плотность заполненных электронных состояний как функция энергии

Очевидно, что минимальная энергия, которую могут иметь электроны, равна E_1 и потому $G(E) = 0$ при $E < E_1$.

$$G(E) = \frac{mL_x L_y}{\pi \hbar^2} (E - E_1), \quad (1.55)$$

где L_x и L_y – размеры образца в плоскости двумерного электронного газа, $E_1 < E < E_2$.

Интересующая величина $g(E)$, определяющая число состояний в единичном интервале вблизи заданной энергии, определяется производной от G по энергии. Кроме того, $g(E)$ определяют как число состояний не в образце в целом, а в расчете на единицу площади двумерного электронного газа. Поэтому окончательно

$$g(E) = \frac{1}{L_x L_y} \frac{dG}{dE} = \frac{m}{\pi \hbar^2} \quad (E_1 < E < E_2). \quad (1.56)$$

При энергиях, больших E_2 , возможно существование электронов не только в первой, но и в вышележащих подзонах. Каждая подзона будет давать дополнительный вклад в $g(E)$, такой же, как (1.56). Поэтому плотность состояний будет испытывать скачки, равные $m/\pi \hbar^2$, каждый раз, когда энергия электронов сравнивается с дном очередной подзоны E_n . Это позволяет обобщить (1.56) на случай произвольной энергии E :

$$g(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n), \quad (1.57)$$

где $\Theta(x)$ – единичная функция Хевисайда, равная единице при $x > 0$ и нулю при $x < 0$. На рисунке 3 приведен график этой ступенчатой функции.

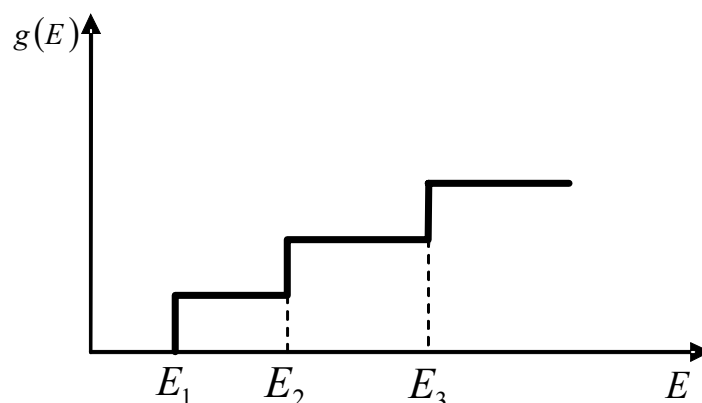


Рис. 3. Плотность заполненных электронных состояний для двумерной электронной системы

Аналогично находится плотность состояний для квантовых нитей с энергетическим спектром (1.51):

$$g(E) = \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar^2} \sum_{m,n} \frac{\Theta(E - E_{mn})}{\sqrt{E - E_{mn}}}. \quad (1.58)$$

Эта функция на графике выглядит следующим образом (рис. 4)

Функция имеет особенности (обращается в бесконечность) при энергиях, соответствующих квантовым уровням.

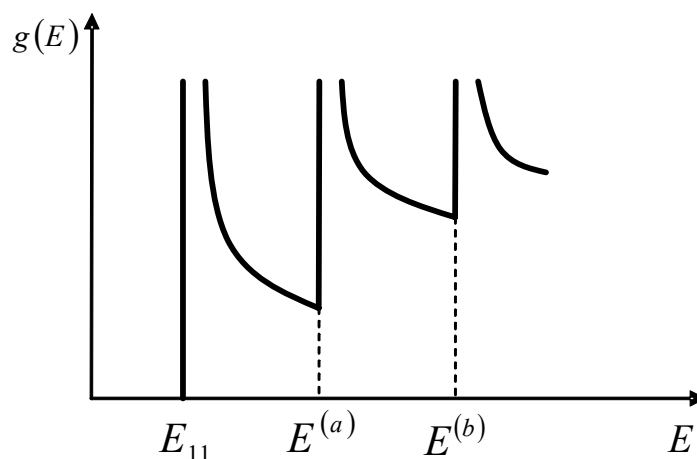


Рис. 4. Плотность заполненных электронных состояний для квантовых нитей

В случае квантовых точек, где энергетический спектр носит чисто дискретный характер (1.52) $g(E)$ описывается с помощью дельта-функции Дирака $\delta(x)$, которая равна нулю при $x \neq 0$, а при $x = 0$ обращается в бесконечность

так, что интеграл $\int \delta(x)dx = 1$ при любом интервале интегрирования, содержащем точку $x = 0$. Плотность состояний

$$g(E) = \sum_{l, m, n} \delta(E - E_{lmn}) \quad (1.59)$$

представляет собой совокупность бесконечно узких и высоких пиков, схематично показанных на рисунке 5.

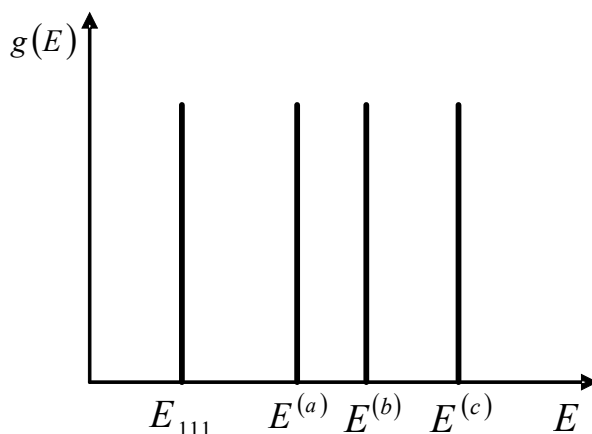


Рис. 5. Плотность электронных состояний $g(E)$ в случае квантовых точек

Следует отметить, что плотность состояний в формулах (1.57), (1.58) и (1.59) имеет различную размерность. Плотность состояний $g(E)$ определяет объемную концентрацию и имеет размерность $(\text{Дж} \cdot \text{м}^3)^{-1}$. Двумерные структуры являются однородными по площади, но не по объему, поэтому реальный смысл имеет плотность состояний в расчете на единицу площади (1.55) с размерностью $(\text{Дж} \cdot \text{м}^2)^{-1}$. Аналогично плотность состояний в квантовых нитях (1.56) вычисляется в расчете на единицу длины и имеет размерность $(\text{Дж} \cdot \text{м})^{-1}$. Наконец, в квантовых точках все определяется абсолютным числом электронов в точке, и плотность состояний (1.58) имеет размерность просто обратной энергии.

1.4. Туннельный эффект в низкоразмерных структурах

Как показано в обзорных работах [5, 14] электронный транспорт в наноприборах носит квантовый характер, поэтому рассмотрим данное физическое явление более подробно.

Простейшей моделью задачи, соответствующей случаю рассеяния на потенциальном рельефе с большим масштабом неоднородности, является рассеяние частицы на потенциальной ступеньке (прямоугольном потенциальном барьере бесконечной ширины) [5, 10]:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0, \end{cases} \quad (1.60)$$

где $U_0 = \text{const}$ (рис. 6, а).

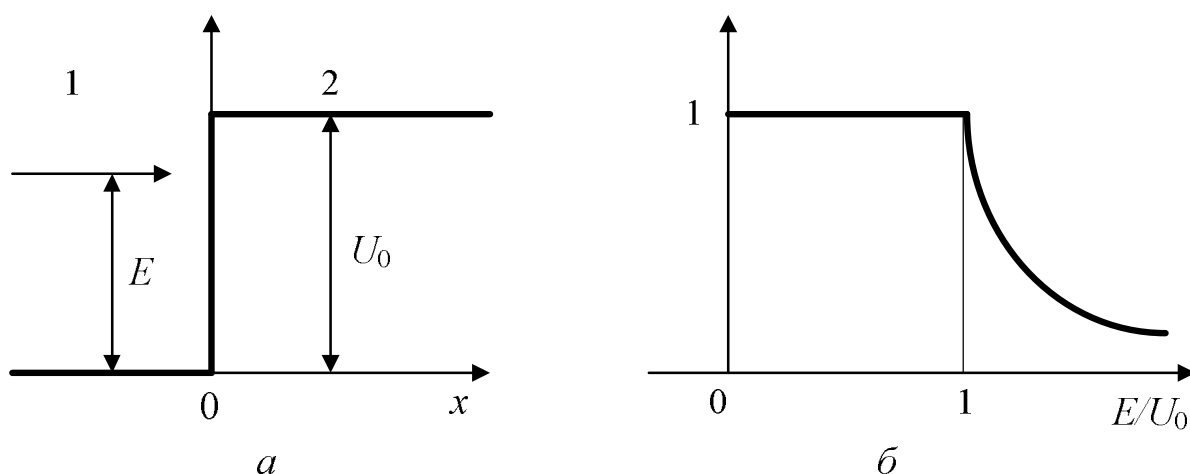


Рис. 6. Энергетическая диаграмма (а) и зависимость коэффициента отражения R от E / U_0 (б) для прямоугольной ступеньки

Будем полагать, что источник частиц находится далеко слева (при $x \rightarrow -\infty$), а испускаемые им частицы движутся слева направо.

Поскольку задача стационарная (высота барьера не зависит от времени), отыскание состояний движения частицы сводится к решению стационарного одномерного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + (U(x) - E)\psi = 0, \quad (1.61)$$

здесь m – масса частицы; E – полная энергия частицы.

В области $x < 0$ (на рис. 6, а область 1), где $U(x) = 0$, (1.61) принимает вид уравнения для свободной частицы, а его общее решение

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(iK_1 x) + B_1 \exp(-iK_1 x), \quad (1.62)$$

$$K_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} . \quad (1.63)$$

Если учесть, что в случае стационарных состояний волновая функция гармонически зависит от времени, то ψ_1 представляет собой суперпозицию падающей и отраженной волн де Бройля. Таким образом, A_1 является амплитудой волны, распространяющейся от источника к потенциальной ступеньке (падающие на ступеньку частицы), а B_1 – амплитудой рассеянной волны, распространяющейся назад к источнику (отраженные от ступеньки частицы).

В области $x > 0$ (область 2) уравнение (1.61) принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_2'' + (U_0 - E)\psi_2 = 0 . \quad (1.64)$$

Характер решения уравнения (1.64) определяется соотношением между энергией падающей частицы E , задаваемой источником, и высотой потенциальной ступеньки U_0 .

В случае $E > U_0$ общее решение для волновой функции в области 2 имеет вид

$$\psi_2 = A_2 \exp(iK_2x) + B_2 \exp(-iK_2x), \quad (1.65)$$

где

$$K_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar > 0. \quad (1.66)$$

Учитывая однородность среды в области 2 (по постановке задачи здесь других источников рассеяния нет), амплитуду B_2 «встречной» волны в области 2 следует положить равной нулю. При этом A_2 является амплитудой волны, прошедшей за ступеньку (частицы, пролетающие над барьером). Таким образом, для $E > U_0$

$$\psi_2 = A_2 \exp(iK_2x). \quad (1.67)$$

В случае, когда энергия падающей частицы $E < U_0$, характер решения уравнения (1.64) радикально меняется. В соответствии с (1.66) K_2 становится мнимым и общее решение (1.65) будет не комбинацией двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях, а совокупностью двух монотонных функций

$$\psi_2(x) = C_1 \exp(\beta x) + C_2 \exp(-\beta x), \quad (1.68)$$

где $\beta = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$.

Учитывая требование конечности волновой функции, необходимо положить $C_1 = 0$ ($x > 0$). Таким образом, при $E < U_0$

$$\psi_2(x) = C_2 \exp(-\beta x). \quad (1.69)$$

В реальной физической ситуации мы всегда имеем дело с барьером конечной ширины. Найдем коэффициенты отражения и прохождения при движении частицы через прямоугольный потенциальный барьер ширины L и высоты U_1 в предположении, что энергия частицы $U_2 < E < U_1$ (рис. 7, а).

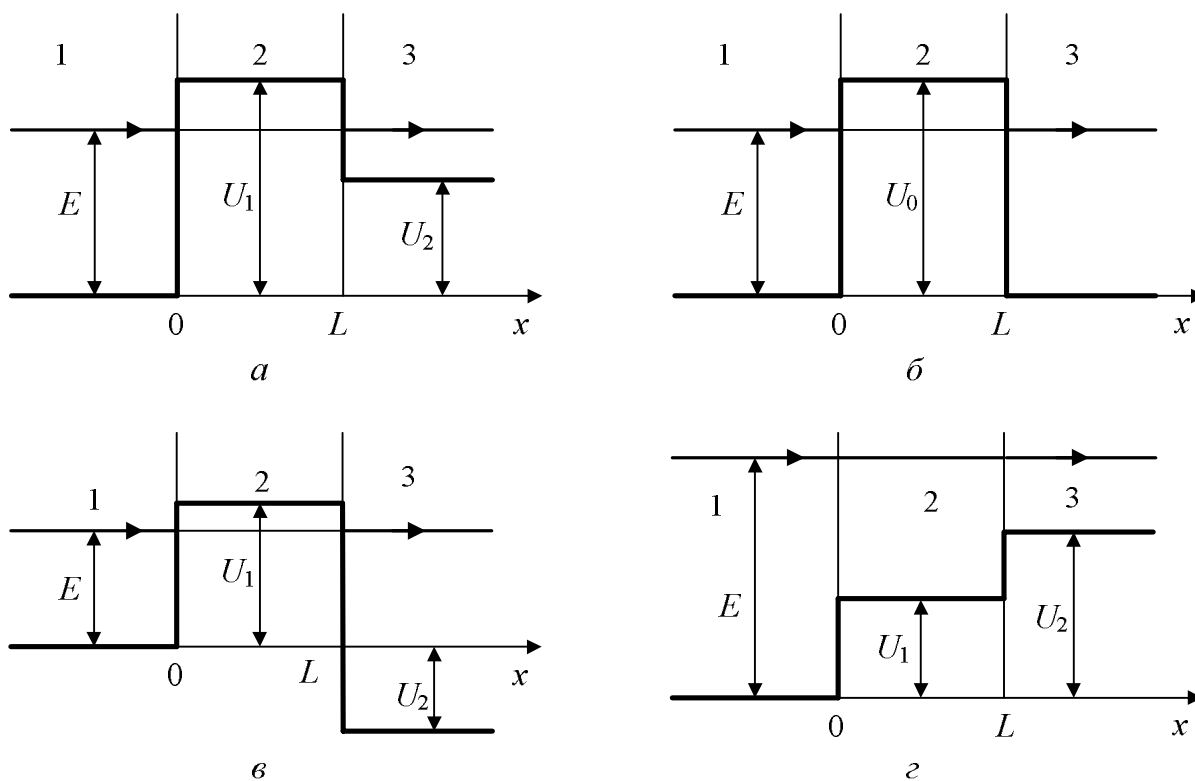


Рис. 7. Энергетическая диаграмма прямоугольного потенциального барьера

На основании формул (1.62), (1.63), (1.66), (1.67), (1.68) можем сразу записать решения уравнения Шредингера для трех областей (1, 2 и 3):

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \exp(iK_1 x) + B_1 \exp(-iK_1 x), \\ \psi_2 &= A_2 \exp(\beta x) + B_2 \exp(-\beta x), \\ \psi_3 &= A_3 \exp(iK_3(x - L)), \end{aligned} \quad (1.70)$$

где $K_1 = \sqrt{2mE} / \hbar$, $\beta = \sqrt{2m(U_1 - E)} / \hbar$, $K_3 = \sqrt{2m(E - U_2)} / \hbar$.

При записи уравнений (1.70) учтено, что в области 3 нет источников частиц и рассеивающих центров, т.е. будет распространяться только прошедшая волна.

Для расчета коэффициентов прохождения D и отражения R , определяемых отношением плотностей потоков прошедших и отраженных частиц к плотности потока падающих частиц, воспользуемся понятием вектора плотности потока вероятности j (квантовым аналогом классического вектора плотности потока частиц). Выражение для j в одномерном случае принимает вид

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (\psi\psi'^* - \psi^*\psi'). \quad (1.71)$$

С учетом (1.71) коэффициент прохождения (коэффициент прозрачности)

$$D = \lim_{\hbar \rightarrow \infty} (|j_2^{(+)}| / |j_1^{(+)}|), \quad (1.72)$$

а коэффициент отражения

$$R = \lim_{\hbar \rightarrow \infty} (|j_1^{(-)}| / |j_1^{(+)}|). \quad (1.73)$$

Подставив (1.70) в (1.72) и (1.73), получим

$$\begin{aligned} D &= K_3 |A_3|^2 / (K_1 |A_1|^2), \\ R &= |B_1|^2 / |A_1|^2. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Амплитуды B_1 и A_3 найдем из системы линейных алгебраических уравнений, полученной с использованием условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границе двух областей.

Так, при $x = 0$ имеем

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ iK_1 (A_1 - B_1) &= \beta (A_2 - B_2) \end{aligned} \quad (1.75)$$

при $x = L$

$$\begin{aligned} A_2 \exp(\beta L) + B_2 \exp(-\beta L) &= A_3, \\ \beta (A_2 \exp(\beta L) - B_2 \exp(-\beta L)) &= iK_3 A_3. \end{aligned} \quad (1.76)$$

Решив систему уравнений (1.75), (1.76), для несимметричного барьера (рис. 7, а) получим

$$D = 4K_3K_1\beta^2/Z; \quad (1.77)$$

$$R = 1 - 4K_3K_1\beta^2/Z; \quad (1.78)$$

где

$$Z = (K_1^2 + \beta^2)(K_3^2 + \beta^2)sh^2(\beta L) + (K_1 + K_3)^2\beta^2. \quad (1.79)$$

Для случая симметричного барьера (рис. 7, б), когда $K_1 = K_3$, получаем

$$D = \left[1 + \frac{sh^2(\beta L)}{4\alpha(1-\alpha)} \right]^{-1}; \quad (1.80)$$

$$R = \left[1 + \frac{4\alpha(1-\alpha)}{sh^2(\beta L)} \right]^{-1}. \quad (1.81)$$

В формулах (1.79)-(1.81) sh – гиперболический синус ($sh(t) = 0.5[\exp(t) - \exp(-t)]$).

Анализ выражений (1.77) и (1.80) показывает, что в случае барьера конечной ширины и высоты появляется конечная вероятность частице пройти под барьером, что абсолютно невозможно в классическом случае, так как при $E < U_0$ формально значение кинетической энергии T становится отрицательным: $T = E - U_0 < 0$.

Проникновение частицы с энергией $E < U_0$ через потенциальный барьер – чисто квантово-механический эффект, что следует из формулы (1.77) (если положить в ней $\hbar = 0$, получаем $D = 0$). Это явление носит название *туннельного эффекта*.

Отметим, что коэффициенты прохождения (1.77) и отражения (1.78) оказываются симметричными по индексам 1 и 3. Это означает, что *проницаемость барьера одинакова для потоков, падающих справа и слева*. Из уравнения (1.77) также следует, что прошедший поток монотонно стремится к нулю, если либо K_1 , либо K_3 стремится к нулю. Проведенный анализ и формулы (1.77), (1.78) могут быть распространены и на случай барьера, показанного на рис. 7, в, путем замены потенциала U_2 на $-U_2$.

Глава 2. Энергетический спектр носителей заряда в наноструктурах

§ 2.1. Энергетический спектр в бесконечно глубокой яме

Потенциальная энергия частицы в зависимости от координаты x изображена на рис. 8 [10]. На интервале $(0, a)$ потенциальную энергию U можно принять равной нулю, а вне этого интервала она обращается в бесконечность.

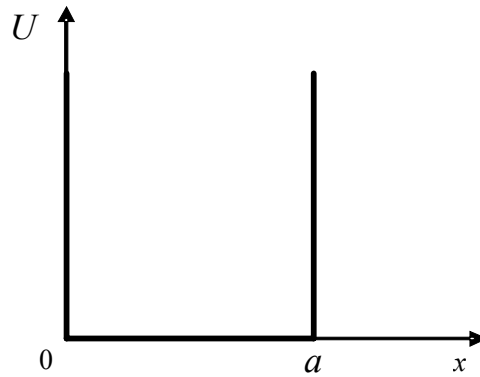


Рис. 8. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины

Вследствие этого частица при своем движении не может выйти за пределы $(0, a)$, или, как говорят, она находится в *потенциальной яме*. Поскольку вероятность нахождения частицы вне потенциальной бесконечно глубокой ямы равна нулю, волновая функция Ψ вне интервала $(0, a)$ равна нулю. Так как она непрерывна, то равна нулю в точках $x = 0$, $x = a$. Таким образом, для $\Psi(x)$ получаем следующие граничные условия:

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0. \quad (2.1)$$

Уравнение Шредингера внутри ямы, где потенциальная энергия равна нулю, имеет вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \kappa^2\Psi = 0, \quad \kappa^2 = 2mE/\hbar^2. \quad (2.2)$$

Общее решение этого уравнения хорошо известно:

$$\Psi(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x). \quad (2.3)$$

Граничное условие $\Psi(0) = 0$ дает

$$B = 0, \quad (2.4)$$

а из граничного условия $\Psi(a) = 0$ следует, что

$$ka = n\pi, \quad \kappa_n = \pi n/a \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (2.5)$$

Это условие квантует движение частиц. На основании (2.5) и определения энергии через κ в (2.2) получаем для уровней энергии выражение

$$E_n = \frac{\hbar^2 \kappa_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (2.6)$$

Эта формула показывает, что существует минимальная, не равная нулю некоторая энергия

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad (2.7)$$

соответствующая основному состоянию движения частиц. Волновая функция этого состояния

$$\Psi_1(x) = A \sin(\pi x/a) \quad (2.8)$$

ни в какой точке внутри ямы в нуль не обращается. Это свойство волновой функции основного состояния имеет общий характер: *волновая функция основного состояния не имеет узлов, т.е. не обращается в нуль внутри рассматриваемой области, а может обращаться в нуль лишь на границах.*

Из (2.7) видно, что минимальная энергия с уменьшением линейных размеров ямы увеличивается. Физическая причина этого заключается в том, что при уменьшении линейных размеров ямы уменьшается длина волны де Бройля частицы, соответствующая основному состоянию, а уменьшение длины волны де Бройля означает увеличение энергии частицы.

Значит, уточнение локализации частиц неизбежно сопровождается увеличением энергии частицы. Это одно из проявлений принципа неопределенности.

Поскольку спектр дискретен, условие нормировки

$$\int_0^a \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_0^a \sin^2(\kappa x) dx = A^2 a/2 = 1$$

для нормировочного множителя дает значение $A = \sqrt{2/a}$.

Поэтому система собственных функций имеет вид

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(\pi nx/a). \quad (2.9)$$

§ 2.2. Энергетический спектр носителей заряда в конечномерной яме

При выращивании пленки узкозонного полупроводника между двумя слоями широкозонного материала может быть реализован потенциальный рельеф, показанный на рис. 9 [5].

В этом случае задача определения стационарных состояний движения электрона сводится к задаче о поведении частицы в прямоугольной потенциальной яме.

Для ассиметричной потенциальной ямы (рис. 9, а) с

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ U_1, & 0 \leq x \leq a, \\ U_2, & x > a, \end{cases}$$

при $E < U_2$ общие решения уравнения Шредингера в областях 1-3 (с постоянными значениями потенциала) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= A_1 \exp(\beta_1 x), & \Psi_3(x) &= B_3 \exp(-\beta_2(x-a)), \\ \Psi_2(x) &= A_2 \exp(iKx) + B_2 \exp(-iKx), \end{aligned} \quad (2.10)$$

где $K = \sqrt{2mE}/\hbar$; $\beta_j = \sqrt{2m(U_j - E)}/\hbar$, $j = 1, 2$.

Решения Ψ_1 и Ψ_3 записаны с учетом того, что они должны равняться нулю на бесконечности.

«Сшивая» волновые функции и их первые производные при $x = 0, a$, приходим к уравнению

$$\frac{(K^2 - \beta_1\beta_2)}{K(\beta_1 + \beta_2)} = \text{ctg}(Ka), \quad (2.11)$$

определяющему значения волнового вектора K , удовлетворяющие условиям данной задачи.

Подставляя β_1 и β_2 в (2.11), получим трансцендентное уравнение, позволяющее оценить разрешенные значения K :

$$Ka = n\pi - \arcsin(K/G_1) - \arcsin(K/G_2), \quad (2.12)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ нумерует разрешенные значения K в порядке их возрастания; $G_j = \sqrt{2mU_j}/\hbar$, $j = 1, 2$; значения арксинуса надо брать в интервале $(0; \pi/2)$.

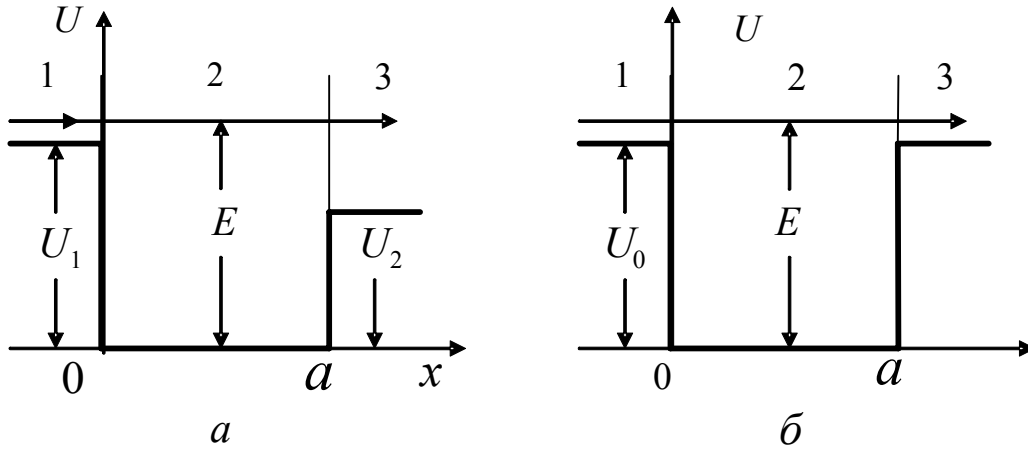


Рис.9. Потенциальный рельеф плёнки узкозонного полупроводника

Уравнение (2.12) определяет набор положительных значений волнового вектора K_n и, следовательно, возможные уровни энергии, соответствующие этим состояниям. Таким образом, энергия $E_n = \hbar^2 K_n^2 / 2m$ частицы в потенциальной яме оказывается квантованной и принимает одно из разрешенных дискретных значений E_n .

Поскольку аргумент арксинуса не может превышать 1, значения K лежат только в интервале

$$0 \leq K \leq G_2. \quad (2.13)$$

Если $aG_2 < \pi$, то в квантовой яме находится не более одного разрешенного энергетического уровня. В общем случае количество разрешенных энергетических уровней в прямоугольной квантовой яме можно оценить, используя неравенство

$$n < \left\{ \left[aG_2 + \arcsin \left(\sqrt{U_2/U_1} \right) \right] / \pi + 0,5 \right\} < n + 1. \quad (2.14)$$

Согласно (2.14) при $U_2 \neq U_1$ всегда найдутся столь малые значения aG_2 , для которых в квантовой яме не будет ни одного разрешенного уровня энергии. Заметим, что при $U_2 = U_1$ (рис. 9, б) условие (2.14) для $n = 1$ всегда выполняется. Следовательно, симметричная одномерная потенциальная яма с произвольными значениями a и U всегда имеет не менее одного разрешенного энергетического уровня.

ческого уровня. Более того, если в случае произвольного одномерного потенциала асимптотические значения $U(\infty) = U(-\infty)$ и между ними находится один минимум, то всегда имеется, по крайней мере, один связанный уровень. Если же $U(\infty) \neq U(-\infty)$, то связанного состояния может и не быть. В случае двух и трех измерений в неглубоких узких потенциальных ямах связанных состояний может не быть даже при $U(\infty) = U(-\infty)$, т.е. частица не будет «захватываться» ямой. Отметим, что согласно законам классической механики частица может «захватываться» и совершать финитное движение в любой потенциальной яме, лишь бы энергия частицы была достаточно мала.

§ 2.3. Энергетический спектр сверхрешеток

В последние годы возрастает интерес исследователей, инженеров, технологов к слоистым структурам, состоящим из различных полупроводниковых (полупроводниковые сверхрешетки) или магнитных (магнитные мультислои) материалов. Сверхрешеткой называется периодическая структура, состоящая из тонких чередующихся в одном направлении слоев полупроводников. Период сверхрешетки намного превышает постоянную кристаллической решетки, но меньше длины свободного пробега электронов. Такая структура обладает, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, дополнительным потенциалом, обусловленным чередующимися слоями полупроводников, называемым потенциалом сверхрешетки. Наличие потенциала сверхрешетки существенно меняет зонную энергетическую структуру исходных полупроводников.

Полупроводниковые сверхрешетки и магнитные мультислои имеют характерные размеры слоев $10 - 1000 \text{ \AA}$ и их принято называть наноструктурами. Кроме полупроводниковых сверхрешеток и магнитных мультислоев к наноструктурам можно отнести и ряд других материалов: фуллерены, пористые кремниевые трубки, некоторые биологические объекты. В спиновых сверхрешетках [4] легирование исходного полупроводникового материала осуществляется магнитными примесями. Периодический потенциал в таких сверхрешетках воз-

никает при наложении внешнего магнитного поля. Потенциал сверхрешетки может создаваться также периодической деформацией образца в поле мощной ультразвуковой волны или стоячей световой волны [4].

Полупроводниковые сверхрешетки обладают особыми физическими свойствами, главные из которых следующие:

- существенное изменение в сравнении с исходными полупроводниками энергетического спектра;
- наличие большого числа энергетических зон;
- очень сильная анизотропия (двумерность);
- подавление электронно-дырочной рекомбинации;
- концентрация электронов и дырок в сверхрешетке является перестраиваемой величиной, а не определяется легированием;
- широкие возможности перестройки зонной структуры.

Все эти особенности полупроводниковых сверхрешеток позволяют считать эти искусственные структуры новым типом полупроводников.

Физические свойства полупроводниковых сверхрешеток определяются их электронным спектром. Для нахождения электронного спектра необходимо решить уравнение Шредингера для волновой функции электрона в сверхрешетке $\nabla^2\psi(r)$ в одноэлектронном приближении, содержащее как потенциал кристаллической решетки $V(r)$, так и потенциал сверхрешетки $\Delta(z)$:

$$\nabla^2\psi(r) - \frac{2m_e^*}{\hbar^2}[E - V(r) - \Delta(z)]\psi(r) = 0. \quad (2.15)$$

Здесь z – направление, перпендикулярное поверхности сверхрешетки (ось сверхрешетки); m_e^* – эффективная масса электрона; E – полная энергия частицы.

Поскольку потенциал сверхрешетки зависит только от координаты z , совпадающей с осью сверхрешетки, то энергетический спектр электронов резко анизотропен. На движение электронов в плоскости, перпендикулярной оси сверхрешетки, ее потенциал не будет оказывать заметного влияния. В то же время, движение электронов вдоль оси z будет соответствовать движению в поле с периодом d .

В общем виде дисперсионное соотношение для электрона в сверхрешетке

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e^*} + E_j(k_z), \quad (2.16)$$

где j – номер энергетической минизоны.

Так как потенциал сверхрешетки периодичен, то энергетический спектр электрона в направлении оси сверхрешетки имеет зонный характер. Так как период сверхрешетки d значительно больше постоянной кристаллической решетки a , то получающиеся при этом сверхрешеточные зоны представляют собой более мелкое дробление энергетических зон исходных полупроводников.

Расщепление энергетической зоны полупроводника в направлении оси сверхрешетки на ряд неперекрывающихся мини-зон является общим результатом для сверхрешеток разного типа. Дисперсионный закон для носителей заряда в мини-зонах, положение и ширина мини-зоны определяется конкретным типом сверхрешетки. Более подробно свойства сверхрешеток, их получение и применение описано в [5, 13-15].

Глава 3. Энергетический спектр носителей заряда в ямах сложной формы

§ 3.1. Энергетический спектр свободных носителей заряда в наноструктурах во внешнем электрическом поле

Электрическое поле оказывает существенное влияние не только на процессы переноса заряда, но и на положение и ширину резонансов (уровней размерного квантования) в квантовой яме. Это обязательно должно учитываться при расчете характеристик современных приборов нано- и оптоэлектроники и в ряде случаев может привести к качественно новым результатам [3, 5].

3.1.1. Энергетический спектр свободных носителей заряда в бесконечно глубокой яме

Для создания электронных приборов необходимо научиться целенаправленно управлять энергетическим спектром носителей заряда с помощью различных внешних воздействий. Наиболее часто для управления используют электрические поля. Рассмотрим влияние постоянного однородного электрического поля на спектр разрешенных состояний бесконечно прямоугольной потенциальной ямы [5].

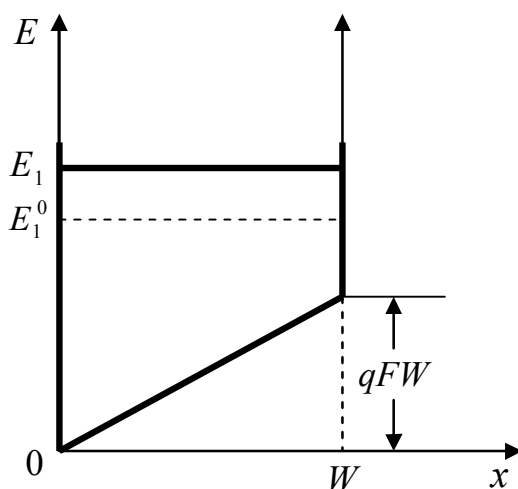


Рис. 10. Энергетический спектр носителей заряда в прямоугольной потенциальной яме в случае воздействия постоянного электрического поля F

Будем полагать, что поле напряженности F направлено параллельно оси x . Потенциальная энергия электрона для $0 < x < W$ в этом случае описывается выражением

$$U(x) = qFx + const,$$

здесь q – абсолютная величина заряда электрона. Выбирая постоянную так, чтобы $U(x) = 0$ при $x = 0$, получим $U(x) = qFx$ (рис. 10). В этом случае отыскание движения частицы сведется к решению уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + qFx\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.1)$$

Сделав замену переменной x на

$$Z = \left(x - \frac{E}{qF} \right) \left(\frac{2mqF}{\hbar^2} \right)^{1/3},$$

уравнение (3.1) можно представить как

$$\Psi''(Z) - Z\Psi(Z) = 0. \quad (3.2)$$

В свою очередь общее решение уравнения (3.2) имеет вид

$$\Psi(Z) = C_1 Ai(Z) + C_2 Bi(Z), \quad (3.3)$$

где $Ai(Z)$ и $Bi(Z)$ – функции Эйри первого и второго рода соответственно (рис.11).

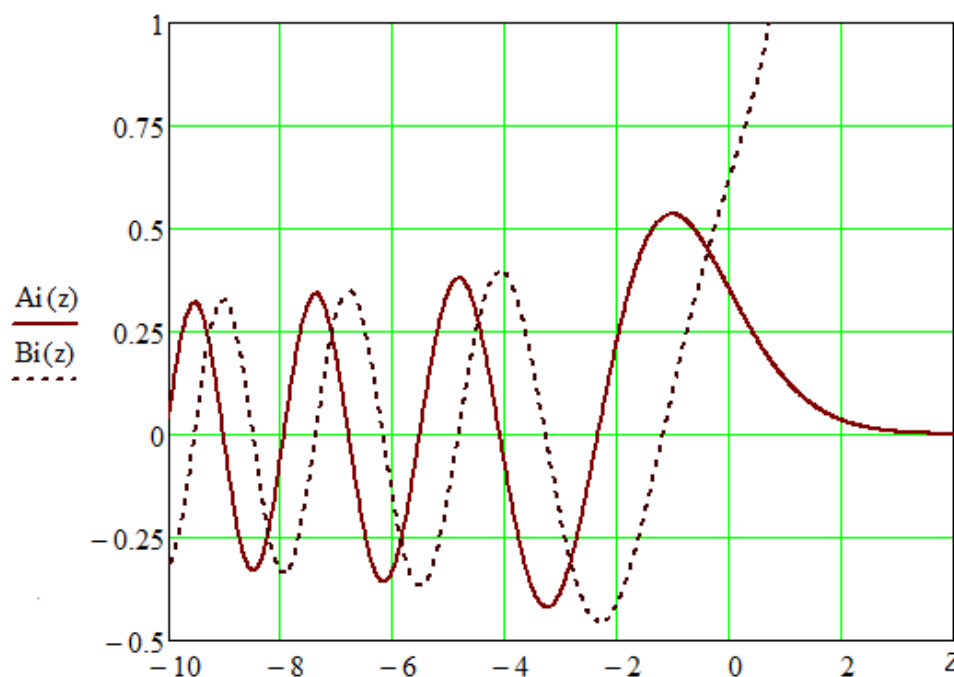


Рис. 11. График функций Эйри

Известно, что при $Z < 0$ $Ai(Z)$ и $Bi(Z)$ – осциллирующие функции, а при $Z > 0$ $Ai(Z) \rightarrow 0$, $Bi(Z) \rightarrow \infty$. Отметим, что расстояния $(\alpha_n - \alpha_{n-1})$ и $(\beta_n - \beta_{n-1})$ уменьшаются с увеличением n (α_n – корни $Ai(Z)$, β_n – корни $Bi(Z)$), т.е. корни $Ai(Z)$ и $Bi(Z)$ сгущаются.

Используя граничные условия $\Psi = 0$ при $x = 0$ и $x = W$ (так как рассматривается бесконечная потенциальная яма), можно получить дисперсионное уравнение, определяющее разрешенные значения энергии E_n в виде

$$Ai(Z^+)Bi(Z^-) - Ai(Z^-)Bi(Z^+) = 0, \quad (3.4)$$

где Z^+ и Z^- соответствуют Z при $x = W$ и $x = 0$. Отметим, что отношение постоянных C_1 и C_2 будет иметь вид

$$\frac{C_2}{C_1} = -\frac{Ai(Z^+)}{Bi(Z^+)} = -\frac{Ai(Z^-)}{Bi(Z^-)}.$$

Для произвольной величины поля и размеров квантовой ямы решение уравнения (3.1) удастся найти лишь приближенными методами.

При $W \rightarrow \infty$ приходим к случаю с треугольной потенциальной ямой, когда $\Psi(x) = 0$ при $x = 0$ и $x \rightarrow \infty$. Это возможно, если $C_2 = 0$. Следовательно, дисперсионное уравнение, определяющее разрешенные значения энергии E_n для треугольной потенциальной ямы, может быть представлено в виде

$$Ai(z)|_{x=0} = 0.$$

Так как значения Z , при которых $Ai(z) = 0$, соответствуют корням функции Эйри α_n , выражение для разрешенных значений энергии принимает вид

$$E_n = -\alpha_n \left(\frac{\hbar^2 q^2 F^2}{2m} \right)^{1/3}. \quad (3.5a)$$

Для оценки разрешенных значений энергии получено и приближенное выражение

$$E_n \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \left[\frac{3}{2} q F \pi (n + 0,75) \right]^{2/3}, \quad (3.5b)$$

отличающееся от точного решения для бесконечной треугольной потенциальной ямы не более чем на 2%.

В слабом электрическом поле для достаточно узкой квантовой ямы решение уравнения (3.1) можно найти, используя теорию возмущений [3].

Для этого разобьем гамильтониан \hat{H} в (3.1) на два слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан задачи, допускающей точное решение, а \hat{V} – малая добавка (оператор возмущения).

В нашем случае положим

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}, \quad \hat{V} = qFx.$$

Тогда для невозмущенной задачи имеем

$$\hat{H}_0 \Psi^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi^{(0)},$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W} \right)^2 n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.6)$$

$$\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{\pi}{W} nx\right) \quad \text{при} \quad \Psi \quad 0 \leq x \leq W.$$

В соответствии со стационарной теорией возмущения в первом приближении собственные значения и собственные функции оператора \hat{H} могут быть вычислены по формулам

$$E_n^{(1)} \approx E_n^{(0)} + V_{nn}, \quad \Psi_n^{(1)} \approx \Psi_n^{(0)} + \sum_{l \neq n} \frac{V_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \Psi_l^{(0)}, \quad (3.7)$$

здесь

$$V_{ln} = \langle \Psi_l^{(0)} | \hat{V} | \Psi_n^{(0)} \rangle; \quad (3.8)$$

V_{ln} – матричный элемент оператора \hat{V} в « $E^{(0)}$ -представлении», т.е. V_{nn} – среднее значение возмущения в состоянии, описываемом невозмущенной функцией $\Psi_n^{(0)}$. Подставляя (3.6) в (3.8), получим

$$V_{nn} = \int_0^W \Psi_n^{(0)*} \hat{V} \Psi_n^{(0)} dx = 0,5qFW, \quad (3.9)$$

т.е. в первом порядке теории возмущений все разрешенные уровни энергии в бесконечной потенциальной яме смещаются одинаково на величину $0,5qFW$ и

$$E_n^{(1)} \approx \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{W} \right)^2 n^2 + 0,5qFW. \quad (3.10)$$

Заметим, что согласно (3.10) положение уровней относительно дна квантовой ямы в точке $x = 0,5W$ не изменяется, так как при наличии электрического поля дно квантовой ямы в этой точке тоже смещается на $0,5qFW$.

Во втором приближении поправка к собственному значению $E_n^{(0)}$ определяется выражением

$$\Delta E_n^{(2)} = V_{nn} + \sum_{l \neq n} \frac{|V_{ln}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}. \quad (3.11)$$

Таким образом, для основного состояния во втором порядке теории возмущений имеем

$$V_{11} = \int_0^W \Psi_1^{(0)*} \hat{V} \Psi_1^{(0)} dx = \frac{-4(1 + (-1)^l) l qFW}{\pi^2 (l-1)^2 (l+1)^2}; \quad (3.12)$$

$$E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + 0,5qFW - \left(\frac{4}{\pi} \right)^4 \frac{(qFW)^2}{E_1^{(0)}} \sum_{k=0} \frac{(k+1)^2}{(2k+1)^5 (2k+3)^5}. \quad (3.13)$$

Согласно (3.13) во втором приближении при наличии слабого однородного электрического поля энергетический зазор между дном квантовой ямы и основным состоянием в точке $x = 0,5W$ будет уменьшаться пропорционально квадрату напряженности электрического поля. Отметим, что вклад в V_{11} , а следовательно, и в $\Delta E_1^{(2)}$ дают состояния только с четным l .

Оценки показывают, что ряд в (3.13) быстро сходится и при вычислении $E_1^{(2)}$ обычно достаточно ограничиться учетом всего одного слагаемого. При этом получим

$$E_1^{(2)} \cong E_1^{(0)} + 0,5qFW - 1,08 \cdot 10^{-2} \frac{(qFW)^2}{E_1^{(0)}}. \quad (3.14)$$

Учет второго слагаемого с $k=1$ в (3.13) изменит значение суммы менее чем на 0,2%. Следовательно, (3.14) можно считать хорошим приближением для (3.13).

Для применения теории возмущений необходимо, чтобы матричные элементы оператора \hat{V} были малы по сравнению с соответствующими расстояниями между невозмущенными уровнями энергии, т.е. выполнялось неравенство

$$|V_{ln}| \ll |E_n^{(0)} - E_l^{(0)}|, \quad (3.15)$$

а в нашем случае – $|V_{21}| \ll |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$ или, если раскрыть V_{21} и $E_2^{(0)}$,

$$qFW \ll 16E_1^{(0)}. \quad (3.16)$$

Таким образом, выражение (3.14) можно использовать для оценки положения разрешенных энергетических уровней в бесконечной потенциальной яме, пока максимальное изменение потенциала на краю ямы под действием электрического поля не станет порядка $E_1^{(0)}$.

3.1.2. Энергетический спектр свободных носителей заряда в электрическом поле в яме конечной глубины

Рассмотрим влияние однородного постоянного электрического поля на разрешенные уровни энергии в прямоугольной квантовой яме конечной глубины. Направив поле параллельно оси x , потенциальную энергию можно представить в виде [5]

$$U(x) = V(x) + qFx + const,$$

здесь F – напряженность электрического поля; $V(x)$ – потенциальный рельеф квантовой ямы при $F = 0$ (рис. 12, а).

Выбирая $const$, так чтобы $U(x) = 0$ при $x = 0$, получим, что потенциальный рельеф квантовой ямы при наличии электрического поля будет иметь вид, показанный на рис. 12, б.

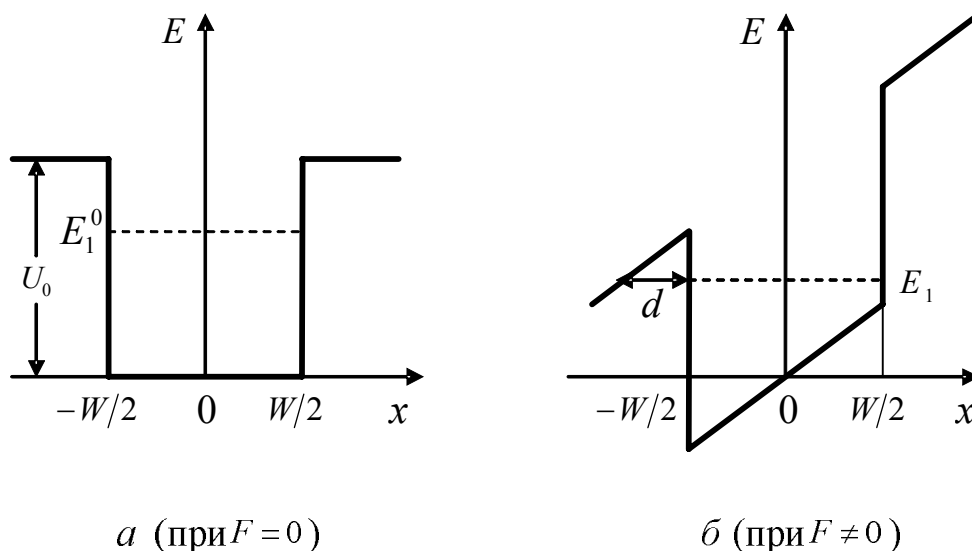


Рис. 12. Потенциальный рельеф квантовой ямы в отсутствие (а) и при наличии (б) внешнего поля

Основное отличие данного случая от рассмотренного в § 3.1.1 связано с изменением хода потенциала при $|x| > 0,5W$. Поскольку при наличии электрического поля потенциала энергия при больших отрицательных значениях x становится меньше полной энергии частицы в квантовой яме, частица может пройти через потенциальный барьер в сторону отрицательных x и удалиться на бесконечность. То, что при $F \neq 0$ все собственные значения гамильтониана оказываются «погруженными» в непрерывный спектр, принципиально отличает их от стационарных состояний при $F = 0$. *Вместо дискретных уровней в электронном спектре появляются резонансные пики, называемые резонансами Брейта-Вингера [8] и в приближении слабо взаимодействующих уровней совпадающие по форме с лоренцевым контуром*

$$L_n(E) = \frac{1}{\pi} \frac{(0,5\Gamma_n)^2}{(E - E_n)^2 + (0,5\Gamma_n)^2},$$

где n – номер пика (состояния).

Ширина пика Γ_n определяется мнимой, а энергетическое положение резонанса E_n – действительной частью соответствующего собственного значения.

Таким образом, *возможность прохождения частицы через потенциальный барьер проявляется в уширении уровней в яме. Это уширение будет тем меньше, чем глубже уровень.*

В слабых полях для нижних уровней вероятность туннелирования может быть ничтожно мала, поэтому решения будут мало отличаться от стационарных. Наличие таких ярко выраженных резонансов позволяет говорить о существовании *квазисвязанных состояний* с конечным временем жизни. Состояния такого типа называют еще и квазистационарными.

Если предположить, что слабое электрическое поле мало изменяет невозмущенное состояние системы, то затухание волновой функции под барьером будет пропорционально

$$\exp[-\beta_n(|x| - 0,5W)] \quad \text{при} \quad |x| > 0,5W,$$

здесь $\beta_n = \left(\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E_n) \right)^{1/2}$.

Для того чтобы амплитуда волновой функции на длине d (рис. 12, б) стала пренебрежимо малой, должно выполняться условие $d \gg 1/\beta_n$. В свою очередь

$$d = \frac{U_0 - E_n}{qF} - 0,5W,$$

т.е. необходимо, чтобы

$$qF \ll \frac{U_0 - E_n}{0,5W + 1/\beta_n}. \quad (3.17)$$

Для нижних уровней широких и глубоких квантовых ям из (3.17) получаем условие квазистационарности состояний

$$qF \ll \frac{U_0 - E_n}{0,5W}, \quad (3.18)$$

а для узких и мелких квантовых ям

$$qF \ll \beta_n (U_0 - E). \quad (3.19)$$

Согласно (3.17) для квантовых ям $Ga_{0,7}Al_{0,3}As/GaAs$ при $W = 10$ нм основное состояние можно считать квазистационарным вплоть до полей напряженностью $F \approx 10^5$ В/см [8].

Ограничиваясь случаем слабых электрических полей и полагая состояния в квантовых ямах квазистационарными, оценим изменение энергии основного

состояния под действием возмущения qFx . В первом порядке теории возмущений

$$\Delta E_1^{(1)} = V_{11} = \langle \Psi_1^{(0)} | qFx | \Psi_1^{(0)} \rangle,$$

где $\Psi_1^{(0)}$ определены выражением

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} A_n \cos(K_n x), & |x| < W/2, \\ C_n \exp[-\beta_n(|x| - W/2)], & |x| > W/2. \end{cases} \quad (3.20)$$

В связи с тем, что оператор электрического дипольного момента qFx изменяет знак при операции инверсии пространственных координат, его среднее значение в основном состоянии равно нулю. Таким образом, поправка к энергии в первом приближении равна нулю, а во втором –

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_{l \neq 1} \frac{|V_{1l}|^2}{E_1^{(0)} - E_l^{(0)}}. \quad (3.21)$$

Учитывая в (3.21), как и в (3.14), только одно слагаемое, получим

$$\Delta E_1^{(2)} \approx \frac{(A_1 A_2 qF)^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \left[\sin(\alpha_1) F_1 + \sin(\alpha_2) F_2 - \frac{W}{2} (F_3 + F_4) \right]^2, \quad (3.22)$$

$$\alpha_1 = 0,5W(K_1 + K_2), \quad \alpha_2 = 0,5W(K_2 - K_1);$$

$$F_1 = \frac{0,5W}{\beta_1 + \beta_2} + \frac{1}{(\beta_1 + \beta_2)^2} + \frac{1}{(K_2 + K_1)^2},$$

$$F_2 = \frac{0,5W}{\beta_1 + \beta_2} + \frac{1}{(\beta_1 + \beta_2)^2} + \frac{1}{(K_2 - K_1)^2},$$

$$F_3 = \frac{\cos(\alpha_1)}{K_2 + K_1}, \quad F_4 = \frac{\cos(\alpha_2)}{K_2 - K_1};$$

K_i определяется по (2.12) при $n = i$; $\beta_i = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E_i^{(0)})}$; $E_i = \frac{\hbar^2 K_i^2}{2m}$; A_i – амплитуда волновой функции i -го невозмущенного состояния квантовой ямы.

Отметим, что $E_1^{(0)} < E_2^{(0)}$, поэтому поправка к энергии основного состояния $\Delta E_2^{(0)} < 0$, т.е. под действием слабого электрического поля энергия основного состояния и в этом случае уменьшается пропорционально квадрату электри-

ческого поля. Однако эти оценки окажутся верными лишь тогда, когда одновременно выполняются условия (3.16) и (3.17).

§ 3.2. Энергетический спектр носителей заряда в туннельно-резонансных структурах

3.2.1. Моделирование энергетического спектра носителей заряда в резонансно-туннельных диодах

Одним из перспективных приборов нанoeлектроники является резонансно-туннельный диод (РТД). Для создания нового поколения РТД и гетеролазеров с отдельным электронным и оптическим ограничением [6,16] применяются структуры с прямоугольными квантовыми ямами, в центре которых имеется дополнительный провал (рис. 13). Благодаря энергетическому провалу возникают новые возможности для управления положением квантовых уровней в широкой основной части ямы.

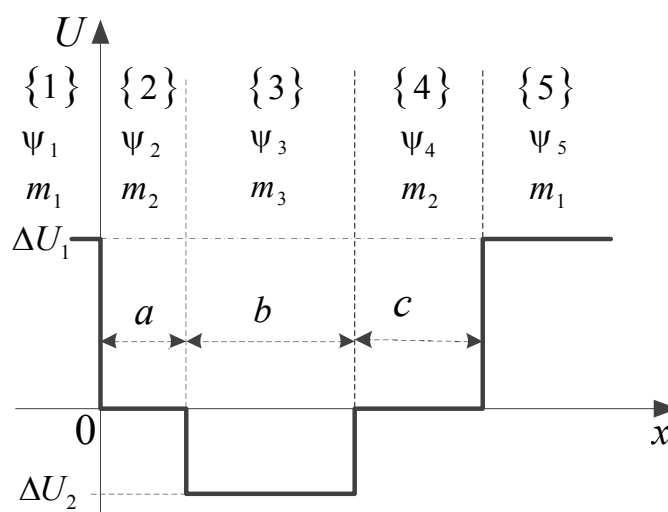


Рис. 13. Схема дна зоны проводимости в слоистой структуре, образующей квантовую яму со сложным профилем

Рассмотрим энергетический спектр носителей заряда в сложной яме, содержащей провал, учитывая, что эффективные массы носителей зарядов изменяются в зависимости от рельефа потенциальной энергии (рис. 13). Проанализируем модель туннельно-резонансного диода, представляющую квантовую яму, состоящую из пяти областей, схема которой указана на рис. 13. На данном

рисунке m_i – эффективная масса носителей заряда в каждом из материалов структуры; ΔU_1 и ΔU_2 – положения дна зон проводимости; a , b , c – толщины нанослоев, образующих среднюю область резонансно-туннельной структуры.

Как известно, в каждой из областей сложной ямы квантование энергии описывается уравнением:

$$\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_i(x)}{\partial x^2} + (E - U_i) \psi_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.23)$$

Значения потенциальных энергий и эффективных масс в выражении (1) распределяются следующим образом:

$$U_i = \begin{cases} \Delta U_1, & x \leq 0, x > l, \\ 0, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ -\Delta U_2, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (3.24)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1, & x \leq 0, x > l, \\ m_2, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ m_3, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (3.25)$$

где $s = a + b$, $l = a + b + c$.

Решение уравнения Шредингера для каждой из пяти областей представимо в виде:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \cdot \exp(k_1 x), \\ \psi_2 = A_2 \cdot \cos(k_2 x) + B_2 \cdot \sin(k_2 x), \\ \psi_3 = A_3 \cdot \cos(k_3(x - a)) + B_3 \cdot \sin(k_3(x - a)), \\ \psi_4 = A_4 \cdot \cos(k_2(x - s)) + B_4 \cdot \sin(k_2(x - s)), \\ \psi_5 = B_5 \cdot \exp(-k_1(x - l)), \end{cases} \quad (3.26)$$

где

$$k_1 = \sqrt{2m_1(\Delta U_1 - E)/\hbar}, \quad k_2 = \sqrt{2m_2 E/\hbar}, \quad k_3 = \sqrt{2m_3(E + \Delta U_2)/\hbar}. \quad (3.27)$$

Граничные условия, следующие из требований непрерывности волновой функции и плотности потока, образуют систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 - A_2 = 0, \\ \frac{k_1}{m_1} A_1 - \frac{k_2}{m_2} B_2 = 0, \\ A_2 \cdot \cos(k_2 a) + B_2 \cdot \sin(k_2 a) - A_3 = 0, \\ -A_2 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 a) + B_2 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 a) - B_3 \frac{k_3}{m_3} = 0, \\ A_3 \cdot \cos(k_3 b) + B_3 \cdot \sin(k_3 b) - A_4 = 0, \\ -A_3 \frac{k_3}{m_3} \sin(k_3 b) + B_3 \frac{k_3}{m_3} \cos(k_3 b) - B_4 \frac{k_2}{m_2} = 0, \\ A_4 \cdot \cos(k_2 c) + B_4 \cdot \sin(k_2 c) - B_5 = 0, \\ -A_4 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 c) + B_4 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 c) + B_5 \frac{k_1}{m_1} = 0. \end{array} \right. \quad (3.28)$$

Полученная система (3.28) имеет нетривиальные решения относительно неизвестных значений энергий лишь тогда, когда определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных, равен нулю. В итоге получаем выражение для определения энергии связанных состояний, которое удобно представить в виде:

$$\begin{aligned} & \left(k_2^2 m_2^2 (k_3^2 m_1^2 - k_1^2 m_3^2) + (k_1^2 k_3^2 m_2^4 - k_2^4 m_1^2 m_3^2) \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c) \right) \operatorname{tg}(k_3 b) + \\ & + k_2 m_2 \left(k_3 m_3 (k_2^2 m_1^2 - k_1^2 m_2^2) + k_1 m_1 (k_3^2 m_2^2 + k_2^2 m_3^2) \operatorname{tg}(k_3 b) \right) (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) + \\ & + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2^2 m_3 \cdot (\operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c) - 1) = 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Необходимо отметить, что решения уравнения (3.29) позволяют определять спектр энергий при $\Delta U_1 > E > 0$. Аналогично, путем решения соответствующей краевой задачи получаем условия квантования для связанных состояний энергии при $0 \geq E > \Delta U_2$:

$$\begin{aligned} & \left(k_2^2 m_2^2 (k_1^2 m_3^2 - k_3^2 m_1^2) + (k_2^4 m_1^2 m_3^2 - k_1^2 k_3^2 m_2^4) \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c) \right) \operatorname{tg}(k_3 b) + \\ & + k_2 m_2 \left(k_3 m_3 (k_2^2 m_1^2 + k_1^2 m_2^2) + k_1 m_1 (k_2^2 m_3^2 - k_3^2 m_2^2) \operatorname{tg}(k_3 b) \right) (\operatorname{th}(k_2 a) + \operatorname{th}(k_2 c)) + \\ & + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2^2 m_3 \cdot (1 + \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c)) = 0. \end{aligned} \quad (3.30)$$

В случае ямы с высоким потенциальным барьером ΔU_1 можно воспользоваться моделью бесконечно глубокой ямы. В данном случае условия

квантования энергии при $E > 0$:

$$(k_2^2 m_3^2 - k_3^2 m_2^2 \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) = 0. \quad (3.31)$$

Соответственно для энергий $0 \geq E > \Delta U_2$:

$$(k_2^2 m_3^2 + k_3^2 m_2^2 \operatorname{th}(k_2 a) \operatorname{th}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{th}(k_2 a) + \operatorname{th}(k_2 c)) = 0. \quad (3.32)$$

Для ямы с бесконечно высокими стенками при $E > 0$ выражения для коэффициентов, определяющих волновую функцию с точностью до нормировочного множителя A , принимают вид:

$$A_1 = A_2 = B_5 = 0, \quad B_2 = A, \quad A_3 = A \cdot \sin(k_2 a), \quad B_3 = A \frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a),$$

$$A_4 = A \left[\frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a) \sin(k_3 b) + \sin(k_2 a) \cos(k_3 b) \right], \quad B_4 = -A_4 \operatorname{ctg}(k_2 c). \quad (3.33)$$

Таким образом, получены выражения, позволяющие определять вероятность нахождения электрона в той или иной области квантовой структуры в зависимости от положения и ширины провала, а также соотношения эффективных масс.

Построим графическую зависимость квадрата волновой функции в основном $\psi_{(1)}^2(x)$ и первом возбужденном $\psi_{(2)}^2(x)$ состояниях в зависимости от координаты x (рис. 14). Для построения графических зависимостей были взяты данные из работы [16]: $a = c = 9 \text{ \AA}$, $b = 18.4 \text{ \AA}$, $\Delta U_2 = 0.24 \text{ \textit{эВ}}$, $m_2 = 0.046 m_0$, $m_3 = 0.023 m_0$, где m_0 – масса свободного электрона.

Для сравнения на рис. 14 приведены квадраты соответствующих волновых функций для простой квантовой ямы с бесконечно высокими стенками, имеющей ширину $l = a + b + c$ (пунктирная линия). Видно, что наличие провала приводит к уменьшению вероятности положения электрона в области с меньшей энергией как для основного (рис. 14а), так и возбужденного (рис. 14б) состояния. Указанное явление объясняется тем, что при финитном движении внутри ямы электрон испытывает частичное отражение при движении над ямой [5].

Полученные условия для квантования энергий позволяют

проанализировать влияние положения и ширины дополнительного провала на энергетический спектр носителей заряда в приборах нанoeлектроники, основу которых составляют гетеропереходы и структуры с переменным профилем легирования.

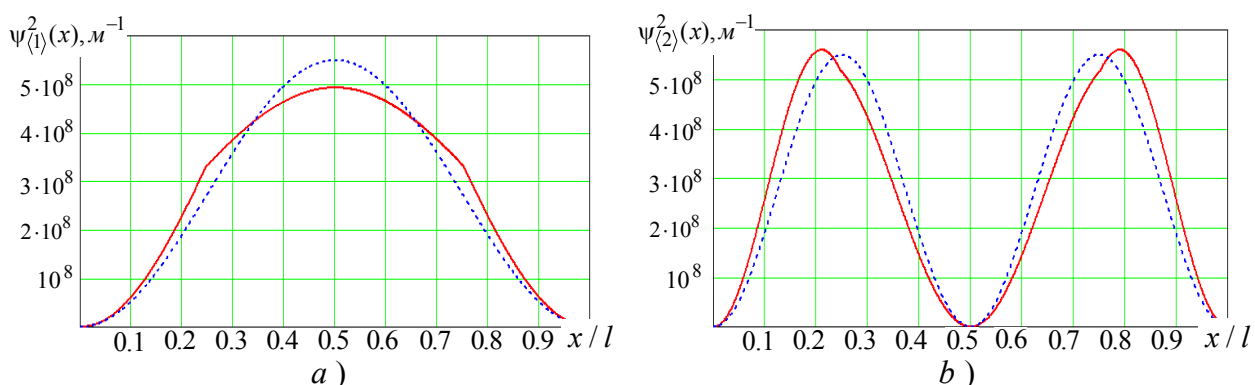


Рис. 14. График зависимости квадрата волновой функции в основном $\psi_{\langle 1 \rangle}^2(x)$ и первом возбужденном $\psi_{\langle 2 \rangle}^2(x)$ состояниях в зависимости от координаты x

Выражения, определяющие волновую функцию в квантовой яме, позволяют находить локализацию электрона в зависимости от потенциального рельефа и профиля легирования.

На рис. 15 показаны зависимости смещений положений основного уровня E_1 и возбужденного уровня E_2 от положения провала для ямы конечной глубины (а) и ямы с бесконечно высокими стенками (b). Значения эффективных масс и энергий электрона в яме, а также общая ширина потенциальной ямы взяты из работы [16]: $a = c = 9 \text{ \AA}$, $b = 18.4 \text{ \AA}$, $\Delta U_1 = 1.32 \text{ эВ}$, $\Delta U_2 = 0.24 \text{ эВ}$, $m_1 = 0.123m_0$, $m_2 = 0.046m_0$, $m_3 = 0.023m_0$.

Как показывают выполненные расчеты, смещение области провала от края к центральной области способствует увеличению разности между первым (основным) уровнем энергий и возбужденным состоянием. Видно, что в различных моделях квантовых ям количественные отличия величин энергий связанных состояний весьма значительны, однако общая картина характера изменений неизменна. Вышеуказанное позволяет полагать, что на характер смещения уровней в яме наибольшее влияние оказывает рельеф провала, а не

форма внешних границ структуры.

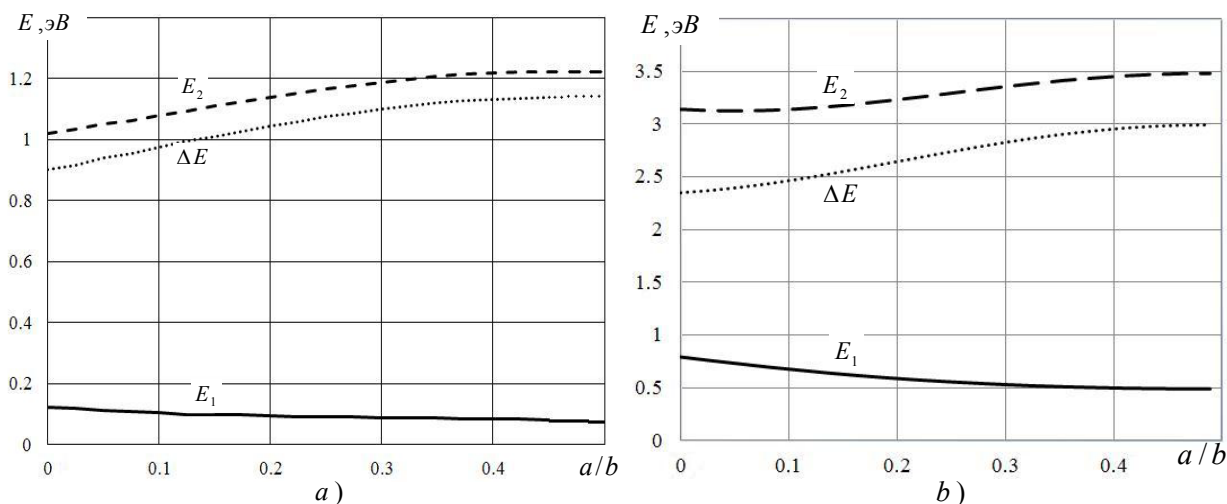


Рис. 15. Зависимость смещений положений основного уровня E_1 и возбужденного уровня E_2 от положения провала для ямы конечной глубины (а) и ямы с бесконечно высокими стенками (б)

На рисунке 15 также показано изменение относительного положения основного и первого возбужденного состояния ($\Delta E = E_2 - E_1$). Известно, что разность между уровнями в квантовой яме увеличивает контрастность ВАХ РТД. Результаты данных расчетов указывают на то, что при расположении провала по центру ямы контрастность ВАХ РТД максимальна. Необходимо отметить, что изменение рельефа квантовой ямы наиболее сильно сказывается на положении возбужденного состояния.

Для анализа влияния ширины провала на структуру состояний внутри ямы нами построены графические зависимости энергий связанных состояний от ширины провала ($b/l, l = const$), представленные на рис. 16.

Выполненные расчеты показывают монотонное снижение положения основного состояния E_1 с ростом ширины провала в модели ямы конечной глубины. Зависимость положения первого возбужденного состояния E_2 от ширины провала не является однообразной и носит более сложный характер, обусловленный тем, что волновая функция с увеличением основного квантового числа имеет большее число узловых точек и более сложный характер влияния границ.

Видно, что при относительной ширине провала $b/l = 0.5$ получаем

примерно такое же значение, как и в случае, если бы материал, образующий провал, составлял всю область ямы. В модели квантовой ямы с бесконечно высокими стенками получаем несколько отличные результаты, что говорит о влиянии границ на смещение уровней.

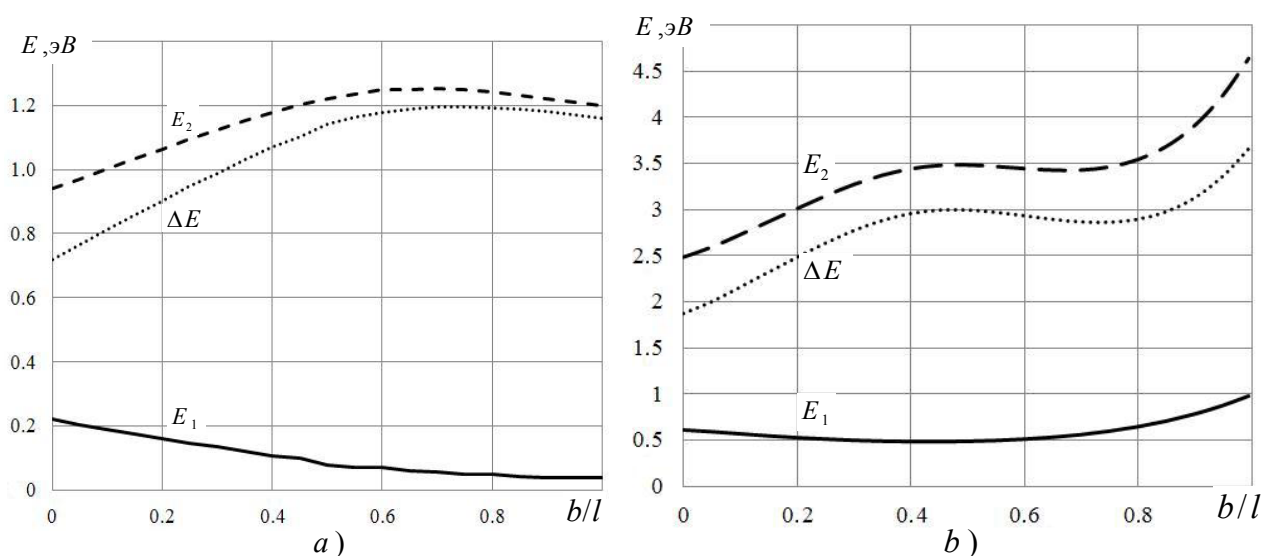


Рис. 16. Графические зависимости энергий связанных состояний от ширины провала ($b/l, l = const$)

Как показывает расчет, выполненный согласно выражениям (9), в случае относительно глубокого или широкого провала (для рассматриваемых структур при $b/l \geq 0.5, a = c$) возникают отрицательные уровни энергий. Таким образом, появляется возможность захвата электрона в области провала при его туннелировании через структуру РТД и появления эффекта кулоновской блокады [1, 5], что, несомненно, уменьшает амплитудные значения резонансного тока.

Относительное смещение положений основного и первого возбужденного состояний можно качественно объяснить на основании теории возмущения [5]. В первом приближении собственные значения энергий могут быть представлены выражением:

$$E_{\langle n \rangle}^{(2)} \approx E_{\langle n \rangle}^{(0)} + \Delta E_{\langle n \rangle}^{(1)}, \quad \Delta E_{\langle n \rangle}^{(1)} = \left\langle \psi_{\langle n \rangle}^{(0)} \left| \hat{V} \right| \psi_{\langle n \rangle}^{(0)} \right\rangle, \quad (3.34)$$

где $E_{\langle n \rangle}^{(0)}$ и $\psi_{\langle n \rangle}^{(0)}$ – невозмущенные значения энергий и волновых функций состояния с номером n , \hat{V} – оператор возмущения. Для случая положения прова-

ла шириной b , глубиной $-\Delta U_2$ посредине бесконечно глубокой квантовой ямы шириной S получаем:

$$\Delta E_{\langle 1 \rangle}^{(1)} = -\Delta U_2 \frac{b}{s} - \frac{\Delta U_2}{\pi} \sin\left(\frac{\pi b}{s}\right), \quad \Delta E_{\langle 2 \rangle}^{(1)} = -\Delta U_2 \frac{b}{s} + \frac{\Delta U_2}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi b}{s}\right). \quad (3.35)$$

Как показывают выражения (3.35), смещения положений энергетических уровней в квантовой яме приводят к понижению положений уровней как основного, так и возбужденного состояний. Очевидно, что для объяснения положительного смещения возбужденного состояния необходимо учесть разность эффективных масс, в соответствии с этим в модели квантовой ямы с бесконечно высокими стенками получаем:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\langle n \rangle}^{(1)} &= \frac{2}{s} \int_{(s-b)/2}^{(s+b)/2} \sin\left(\frac{\pi n x}{s}\right) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m_3} - \frac{\hat{p}^2}{2m_2} - \Delta U_2 \right) \sin\left(\frac{\pi n x}{s}\right) dx = \\ &= \left(\frac{\pi n^2 \hbar^2}{2s^2} \left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_2} \right) - \Delta U_2 \right) \left(\frac{b}{s} - \frac{(-1)^n}{n\pi} \sin\left(\frac{2\pi n b}{s}\right) \right). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Причина смещения возбужденного уровня заключается в том, что гамильтониан частицы в яме с провалом отличается не только потенциальной энергией, но также и кинетической энергией из-за отличия эффективных масс в различных частях ямы. Как было показано ранее, изменение потенциального профиля простой ямы за счет провала глубиной $-\Delta U_2$ должно приводить к понижению уровня, в то время как разность кинетических энергий при $m_3 < m_2$ способствует подъему уровней. Для первого возбужденного состояния ($n = 2$) влияние различия эффективных масс оказывается сильнее и поэтому возбужденный уровень в яме с дополнительным провалом располагается выше возбужденного уровня в простой яме. Необходимо отметить, что в рамках линейной теории возмущений возможно качественно пояснить поведение смещений энергий лишь при малых величинах b/l , с ростом ширины провала необходимо учитывать более высокие степени приближений.

3.2.2. Энергетический спектр носителей заряда в туннельно-связанных квантовых ямах

Выше были рассмотрены примеры поведений частиц в системах, содержащих изолированные квантовые ямы. Накопленный к настоящему времени опыт и достижения техники для выращивания эпитаксиальных структур позволяют создавать и более сложные гетерокомпозиции, содержащие полупроводниковые слои со сложным потенциальным профилем. С этой точки зрения большой интерес представляет изучение энергетического спектра частиц в связанных квантовых ямах, так как в таких системах возможно направленное регулирование энергетического спектра и скоростей рассеяния электронов с помощью изменения не только формы квантовой ямы, но и связи между квантовыми ямами. Структуры со связанными квантовыми ямами стали основой многих электронных и оптоэлектронных приборов. На их основе созданы лазеры инфракрасного (ИК) диапазона, приемники ИК-излучения, элементы нелинейной оптики и быстродействующие транзисторы.

Для выяснения влияния, оказываемого сближением изолированных квантовых ям, рассмотрим систему, состоящую из двух одинаковых одномерных прямоугольных квантовых ям, разделенных проникаемым потенциальным барьером (рис. 17).

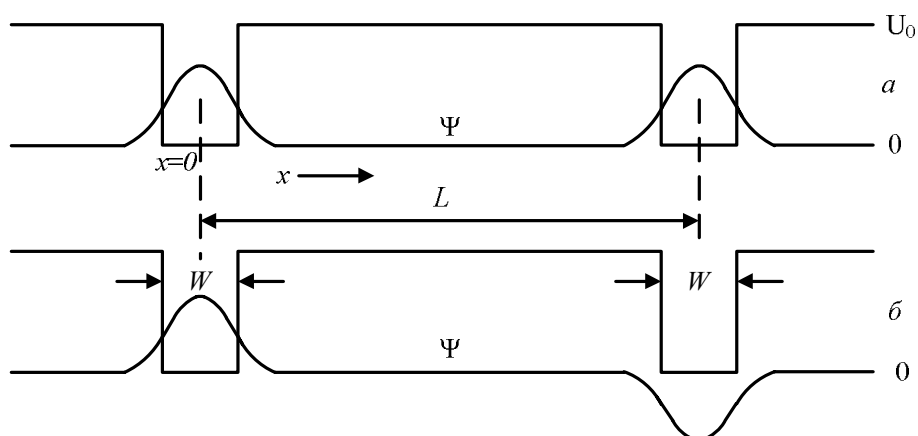


Рис. 17. Потенциальный профиль и волновые функции для системы из двух прямоугольных квантовых ям (симметричная волновая функция – (а), антисимметричная волновая функция – (б))

Обсудим, прежде всего, качественные изменения. Известно, что *энергетический спектр такой системы имеет вид дублетов* [12]. Волновая функция в данном случае является решением уравнения Шредингера с потенциалом, показанным на рис. 17. Если квантовые ямы достаточно удалены друг от друга, то между ними волновая функция Ψ практически равна нулю. Решение для волновой функции в окрестности каждой квантовой ямы в этом случае будет практически совпадать с решением для изолированной квантовой ямы с тем отличием, что величина $|\Psi|^2$ вследствие нормировки уменьшится вдвое. Волновая функция Ψ для наинизшего квантового состояния приведена на рис. 17а.

Единственное различие между Ψ -функциями, показанными на рис. 17, состоит в изменении знака в одной из квантовых ям и означает, что волновая функция Ψ (включая зависимость от времени) в одной из ям отличается по фазе на 180° от Ψ в другой яме. Принято говорить, что волновая функция, представленная на рис. 17а, *симметрична*, а волновая функция, приведенная на рис. 17б, – *антисимметрична*.

Между значениями энергии для обоих решений разницы практически нет, что следует из одинаковой для формы $\Psi(x)$, а следовательно, одинаковой средней кинетической ($\sim |d\Psi/dx|^2$) энергии и средней потенциальной ($\sim U(x)|\Psi|^2$) энергии.

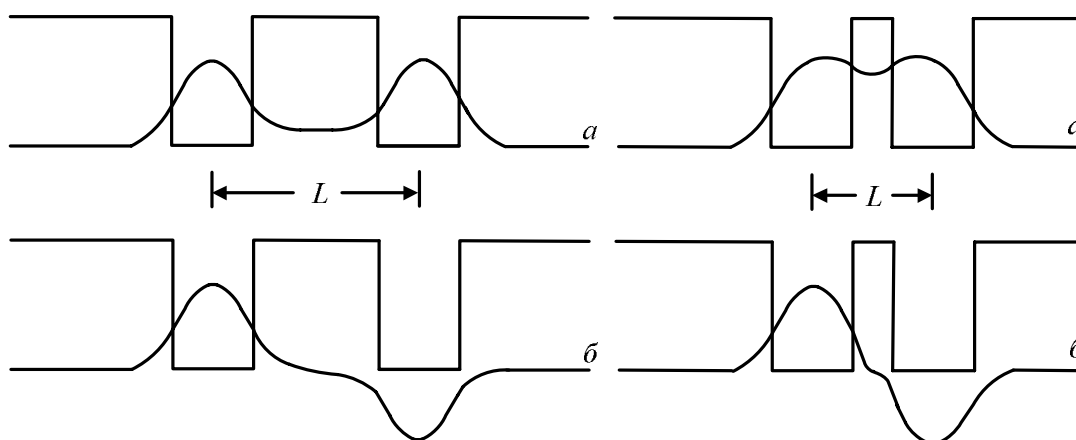
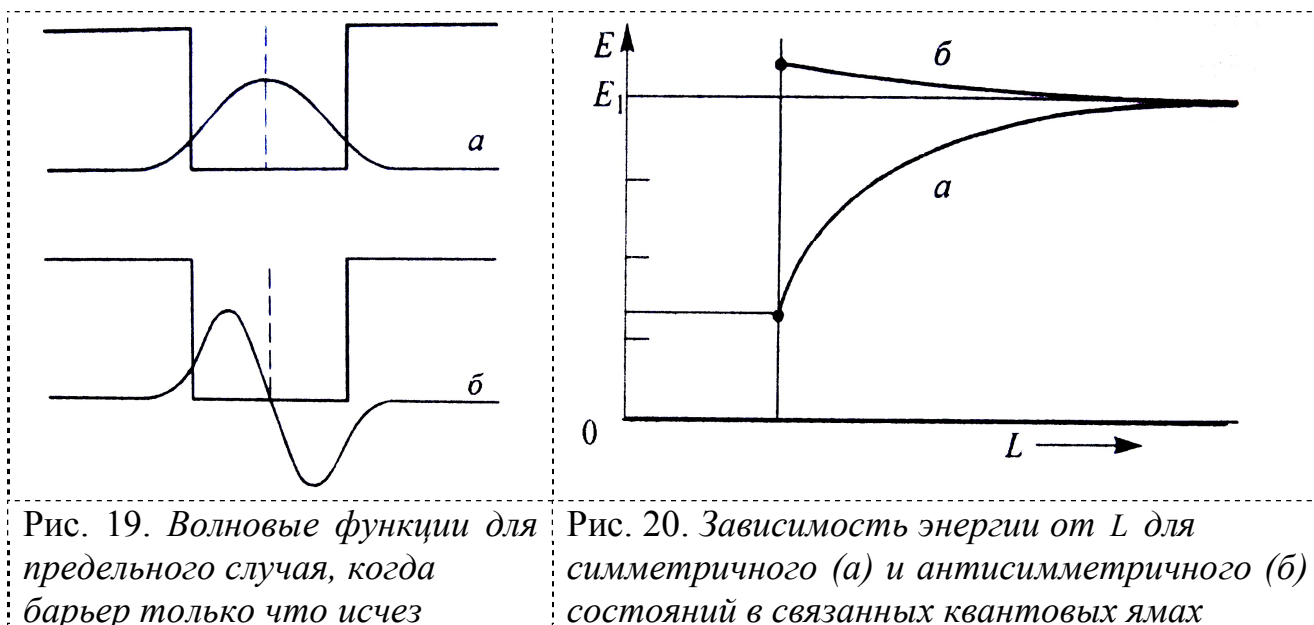


Рис. 18. Трансформация волновых функций при изменении расстояния между квантовыми ямами

При сближении квантовых ям волновые функции изменяют форму (рис. 18). В этом случае волновая функция, показанная на рис. 18а, будет давать меньшее значение полной энергии E , поскольку для нее среднее значение потенциальной энергии приблизительно такое же, как и в случае, приведенном на рис. 18б, тогда как среднее значение кинетической энергии меньше, потому что меньше среднее значение $|d\Psi/dx|^2$.

В предельном случае (рис. 19), когда ширина барьера между ямами равна нулю, т.е. ямы только что соприкоснулись, Ψ -функция (рис. 19а) есть не что иное, как волновая функция основного состояния для квантовой ямы шириной a . Поскольку, согласно (2.6), для энергии глубоких состояний $E \sim n^2/a^2$, соответствующее значение E составит примерно 1/4 энергии E для квантовых ям, показанных на рис. 19б, есть волновая функция с $n = 2$ для квантовой ямы шириной a . Таким образом, значение E , связанное с этой функцией Ψ , будет примерно такое же, что и E для волновой функции на рис. 17, так как n увеличилось в два раза (равенство будет точным для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками).



Зависимость энергии для двух состояний от расстояния L между квантовыми ямами показана на рис. 20. Для обоих состояний исходным является значение энергии E_1 при $L = \infty$ (E_1 – энергия частицы в состоянии $n = 1$ для пря-

моугольной квантовой ямы конечной глубины). Из рис. 20 следует также, что при любом значении L уровень E_1 , соответствующий изолированной квантовой яме, расщепляется на два уровня (образует дублет), причем это расщепление растет с уменьшением расстояния между квантовыми ямами. При этом, если частица находится в состоянии с более низкой энергией, то волновые функции в обеих квантовых ямах оказываются в одной фазе; если частица находится во втором состоянии, то волновые функции оказываются в противоположных фазах. Отметим, что расщепление уровней во взаимодействующих квантовых ямах аналогично расщеплению резонансных частот в связанных резонансных контурах.

Для выяснения влияния формы и положения потенциального барьера, разделяющего квантовую яму, на её энергетический спектр проанализируем модель, представляющую квантовую яму, состоящую из пяти областей, схема которой указана на рис. 21.

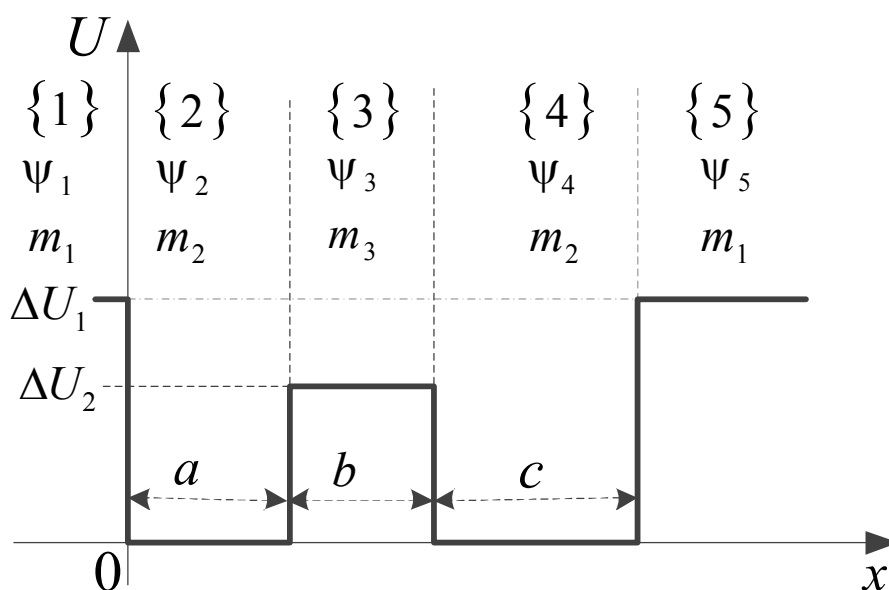


Рис. 21. Схема дна зоны проводимости в слоистой структуре, образующей систему связанных квантовых ям

На данном рисунке m_i – эффективная масса носителей заряда в каждом из материалов структуры; ΔU_1 и ΔU_2 – положения дна зон проводимости; a , b , c – толщины нанослоев, образующих среднюю область структуры с разделёнными квантовыми ямами.

Как известно, в каждой из областей сложной ямы квантование энергии описывается уравнением:

$$\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \cdot \frac{\partial^2 \psi_i(x)}{\partial x^2} + (E - U_i) \psi_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, 5. \quad (3.37)$$

Значения потенциальных энергий и эффективных масс в выражении (1) распределяются следующим образом:

$$U_i = \begin{cases} \Delta U_1, & x \leq 0, x > l, \\ 0, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ \Delta U_2, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (3.38)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1, & x \leq 0, x > l, \\ m_2, & 0 < x \leq a, s < x \leq l, \\ m_3, & a < x \leq s, \end{cases} \quad (3.39)$$

где $s = a + b$, $l = a + b + c$.

Решение уравнения Шредингера (при $E < \Delta U_1, \Delta U_2$) для каждой из пяти областей представимо в виде:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 \cdot \exp(k_1 x), \\ \psi_2 = A_2 \cdot \cos(k_2 x) + B_2 \cdot \sin(k_2 x), \\ \psi_3 = A_3 \cdot \text{ch}(k_3(x - a)) + B_3 \cdot \text{sh}(k_3(x - a)), \\ \psi_4 = A_4 \cdot \cos(k_2(x - s)) + B_4 \cdot \sin(k_2(x - s)), \\ \psi_5 = B_5 \cdot \exp(-k_1(x - l)), \end{cases} \quad (3.40)$$

где

$$k_1 = \sqrt{2m_1|\Delta U_1 - E|}/\hbar, \quad k_2 = \sqrt{2m_2 E}/\hbar, \quad k_3 = \sqrt{2m_3|\Delta U_2 - E|}/\hbar. \quad (3.41)$$

Граничные условия, следующие из требований непрерывности волновой функции и плотности потока, образуют систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 - A_2 = 0, \\ \frac{k_1}{m_1} A_1 - \frac{k_2}{m_2} B_2 = 0, \\ A_2 \cdot \cos(k_2 a) + B_2 \cdot \sin(k_2 a) - A_3 = 0, \\ -A_2 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 a) + B_2 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 a) - B_3 \frac{k_3}{m_3} = 0, \\ A_3 \cdot \text{ch}(k_3 b) + B_3 \cdot \text{sh}(k_3 b) - A_4 = 0, \\ A_3 \frac{k_3}{m_3} \text{sh}(k_3 b) + B_3 \frac{k_3}{m_3} \text{ch}(k_3 b) - B_4 \frac{k_2}{m_2} = 0, \\ A_4 \cdot \cos(k_2 c) + B_4 \cdot \sin(k_2 c) - B_5 = 0, \\ -A_4 \frac{k_2}{m_2} \sin(k_2 c) + B_4 \frac{k_2}{m_2} \cos(k_2 c) + B_5 \frac{k_1}{m_1} = 0. \end{array} \right. \quad (3.42)$$

Полученная система (3.42) имеет нетривиальные решения относительно неизвестных значений энергий лишь тогда, когда определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных, равен нулю. В итоге получаем выражение для определения энергии связанных состояний, которое удобно представить в виде:

$$\begin{aligned} & \left((k_1^2 k_3^2 m_2^4 + k_2^4 m_1^2 m_3^2) \text{tg}(k_2 a) \text{tg}(k_2 c) + k_2^2 m_2^2 (k_3^2 m_1^2 + k_1^2 m_3^2) \right) \text{th}(k_3 b) + \\ & + k_2 m_2 \left(k_3 m_3 (k_1^2 m_2^2 - k_2^2 m_1^2) + k_1 m_1 (k_3^2 m_2^2 - k_2^2 m_3^2) \text{th}(k_3 b) \right) (\text{tg}(k_2 a) + \text{tg}(k_2 c)) + \\ & + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2^2 m_3 \cdot (1 - \text{tg}(k_2 a) \text{tg}(k_2 c)) = 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

Аналогично путем решения соответствующей краевой задачи получаем условия квантования для связанных состояний энергии при $\Delta U_1 \geq E > \Delta U_2$:

$$\begin{aligned} & \left(k_2^2 m_2^2 (k_3^2 m_1^2 - k_1^2 m_3^2) + (k_1^2 k_3^2 m_2^4 - k_2^4 m_1^2 m_3^2) \text{tg}(k_2 a) \text{tg}(k_2 c) \right) \text{tg}(k_3 b) + \\ & + k_2 m_2 \left(k_3 m_3 (k_2^2 m_1^2 - k_1^2 m_2^2) + k_1 m_1 (k_3^2 m_2^2 + k_2^2 m_3^2) \text{tg}(k_3 b) \right) (\text{tg}(k_2 a) + \text{tg}(k_2 c)) + \\ & + 2k_1 k_2^2 k_3 m_1 m_2^2 m_3 \cdot (\text{tg}(k_2 a) \text{tg}(k_2 c) - 1) = 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

В случае ямы с высоким потенциальным барьером ΔU_1 ($\Delta U_1 \gg \Delta U_2$) можно воспользоваться моделью бесконечно глубокой ямы. В данном случае условия квантования энергии при $E < \Delta U_2$:

$$(k_2^2 m_3^2 + k_3^2 m_2^2 \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c)) \operatorname{th}(k_3 b) + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) = 0. \quad (3.45)$$

Соответственно для энергий $E > \Delta U_2$:

$$(k_2^2 m_3^2 - k_3^2 m_2^2 \operatorname{tg}(k_2 a) \operatorname{tg}(k_2 c)) \operatorname{tg}(k_3 b) + k_2 m_2 k_3 m_3 (\operatorname{tg}(k_2 a) + \operatorname{tg}(k_2 c)) = 0. \quad (3.46)$$

Для ямы с бесконечно высокими стенками при $E < \Delta U_2$ выражение для коэффициентов, определяющих волновую функцию, с точностью до нормировочного множителя B , принимают вид:

$$A_1 = A_2 = B_5 = 0, \quad B_2 = B, \quad A_3 = B \cdot \sin(k_2 a), \quad B_3 = B \frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a),$$

$$A_4 = B \left[\frac{m_3 k_2}{m_2 k_3} \cos(k_2 a) \operatorname{sh}(k_3 b) - \sin(k_2 a) \operatorname{ch}(k_3 b) \right], \quad B_4 = -A_4 \operatorname{ctg}(k_2 c). \quad (3.47)$$

Полученные условия для квантования энергий позволяют проанализировать влияние положения и ширины барьера, разделяющего квантовую яму, на энергетический спектр носителей заряда в приборах нанoeлектроники, основу которых составляют гетеропереходы и структуры с переменным профилем легирования. Выражения, определяющие волновую функцию в квантовой яме, позволяют также находить локализацию электрона в зависимости от потенциального рельефа и профиля легирования.

При относительно малом значении барьера относительно глубины основной части ямы ($\Delta U_2 \ll \Delta U_1$) относительное смещение положений основного и первого возбужденного состояний можно качественно объяснить на основании теории возмущения [5, 10], как это было сделано в работе [6] для ямы с энергетическим провалом. В первом приближении для случая положения барьера шириной b , высотой ΔU_2 посередине бесконечно глубокой квантовой ямы шириной s получаем:

$$\Delta E_{\langle 1 \rangle}^{(1)} = \Delta U_2 \frac{b}{s} + \frac{\Delta U_2}{\pi} \sin\left(\frac{\pi b}{s}\right), \quad \Delta E_{\langle 2 \rangle}^{(1)} = \Delta U_2 \frac{b}{s} - \frac{\Delta U_2}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi b}{s}\right). \quad (3.48)$$

Как показывают выражения (14) смещения положений энергетических

уровней в квантовой яме приводят к повышению положений уровней как основного, так и возбужденного состояний. Очевидно, что для более детального объяснения смещения основного и возбужденного состояний необходимо учесть разность эффективных масс, в соответствии с этим в модели квантовой ямы с бесконечно высокими стенками получаем:

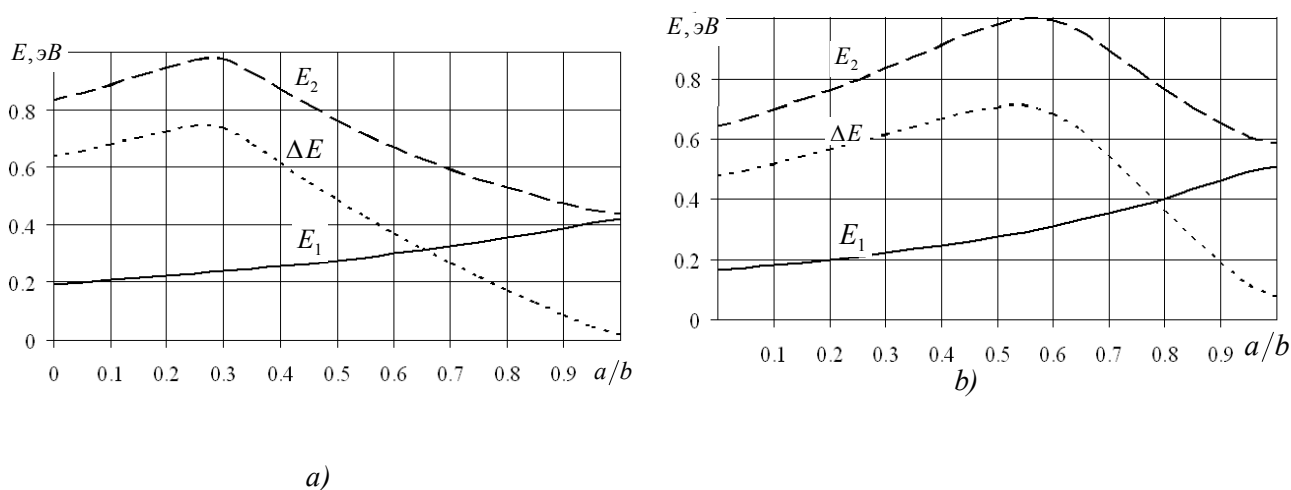
$$\Delta E_{\langle n \rangle}^{(1)} = \left(\frac{\pi n^2 \hbar^2}{2s^2} \left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_2} \right) + \Delta U_2 \right) \left(\frac{b}{s} - \frac{(-1)^n}{n\pi} \sin \left(\frac{2\pi n b}{s} \right) \right). \quad (3.49)$$

Как и в случае провала в квантовой яме [13], причина смещения возбужденного уровня заключается в том, что гамильтониан частицы в яме с барьером отличается не только потенциальной энергией, но также и кинетической энергией из-за отличия эффективных масс в различных частях ямы. Изменение потенциального профиля простой ямы за счет барьера высотой ΔU_2 должно приводить к повышению уровней энергий, одновременно разность кинетических энергий при $m_3 < m_2$ также способствует подъему уровней, а при $m_3 > m_2$, напротив, понижению E_2 . Необходимо отметить, что в рамках линейной теории возмущений возможно качественно пояснить поведение смещений энергий лишь при малых величинах b/l , с ростом ширины барьера необходимо учитывать более высокие степени приближений.

Проанализируем изменение спектра квантовых ям в практически важном случае для туннельно связанных квантовых ям одинаковой глубины. Структуры со связанными квантовыми ямами, как было указано ранее, стали основой многих электронных и оптоэлектронных приборов [3, 4, 10]. Известно, что энергетический спектр такой системы двух квантовых ям, разделенных туннельно проницаемым барьером, имеет вид дублетов [5].

Для выяснения влияния, оказываемого сближением изолированных квантовых ям на энергетический спектр структуры, рассмотрим систему, состоящую из двух одинаковых одномерных прямоугольных квантовых ям ($\Delta U_1 = \Delta U_2$). На рис. 22 показаны зависимости смещений положений основного уровня E_1 и возбужденного уровня E_2 от положения провала для ямы

конечной глубины (*a*) и ямы с бесконечно высокими стенками (*b*). Значения эффективных масс и энергий электрона в яме, а также общая ширина потенциальной ямы взяты из работы [5]: $a = b = c = 20 \text{ \AA}$, $\Delta U_1 = \Delta U_2 = 1.32 \text{ эВ}$, $m_1 = m_3 = 0.123m_0$, $m_2 = 0.046m_0$.



a)

b)

Рис. 22. Зависимости положений основного уровня E_1 и возбужденного уровня E_2 от положения провала для ямы конечной глубины (a) и ямы с бесконечно высокими стенками (b)

Как показывают выполненные расчеты, смещение области барьера от края к центральной области способствует уменьшению разности между первым (основным) уровнем энергий и возбужденным состоянием и образованию энергетических дуплетов. Видно, что в различных моделях квантовых ям количественные отличия величин энергий связанных состояний весьма значительны, однако общая картина характера изменений неизменна. При смещении барьера к центру структуры первоначально энергии основного и возбужденного состояний возрастают как для изолированной ямы с её ростом [5, 6], однако в дальнейшем наблюдаем роль взаимного влияния квантовых ям, которая приводит к понижению уровня возбужденного состояния. На рисунке 22 также показано изменение относительного положения основного и первого возбужденного состояния ($\Delta E = E_2 - E_1$). Известно, что разность между уровнями в квантовой яме увеличивает контрастность ВАХ РТД [3, 8]. Результаты данных расчетов указывают на то, что при расположении барьера несимметрично по отношению к центру ямы контрастность ВАХ РТД

максимальна. Необходимо отметить, что изменение положения барьера между квантовыми ямами наиболее сильно сказывается на положении возбужденного состояния.

Для анализа влияния ширины разделяющего барьера на структуру состояний внутри ямы нами построены графические зависимости энергий связанных состояний от ширины провала ($b/l, l = const$), представленные на рис. 23. Выполненные расчеты показывают повышение положения основного состояния E_1 с ростом ширины провала в модели ямы конечной глубины. Зависимость положения первого возбужденного состояния E_2 от ширины провала не является однообразной и носит более сложный характер, обусловленный тем, что волновая функция с увеличением основного квантового числа имеет большее число узловых точек и более сложный характер влияния границ.

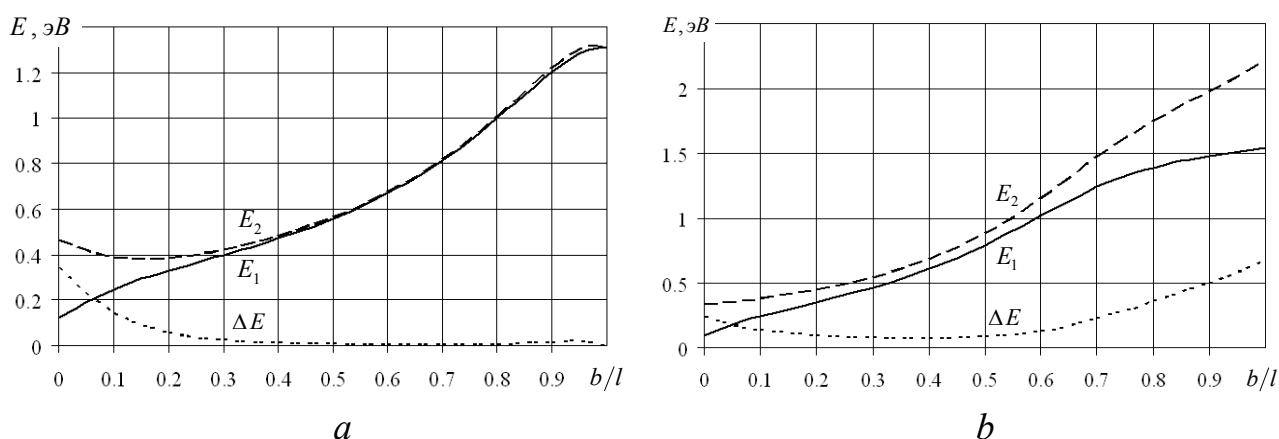


Рис. 23. Зависимости энергий связанных состояний от размеров ям, разделенных барьером ($b/l, l = const = 45 \text{ \AA}$) для ямы конечной глубины (а) и ямы с бесконечно высокими стенками (б).

$$l = 45 \text{ \AA}, \Delta U_1 = \Delta U_2 = 1.32 \text{ эВ}, m_1 = m_3 = 0.123m_0, m_2 = 0.046m_0$$

Согласно выполненным расчетам (рис. 23а), при относительной ширине провала $b/l \geq 0.3$ получаем дуплетную структуру энергетических уровней. В то же время для бесконечно глубокой ямы столь яркой дуплетной структуры энергетических уровней не наблюдается, относительное смещение основного и первого возбужденного состояний с ростом барьера имеет более сложный вид,

так как в данном случае возможны состояния энергий больше ΔU_1 , соответственно, при $E_2, E_1 \geq \Delta U_1 = 1.3 \text{ эВ}$ разность значений E_2 и E_1 значительно возрастает (рис. 23*b*).

Таким образом, приведенные выражения и рассчитанные графические зависимости позволяют сделать вывод, что использование модели бесконечно глубокой ямы для качественного описания положения энергетических уровней в квантовых ямах сложной формы возможно лишь для ям относительно большой глубины. Выражения, определяющие энергетический спектр в квантовых ямах сложной формы, могут быть полезны при проектировании и моделировании туннельно-резонансных структур, используемых в современных быстродействующих устройствах электроники.

Вопросы и задания для самостоятельной работы

1. Получить оценку предельной толщины пленки, при которой возможно наблюдение квантово-размерных явлений, если подвижность электронов в пленке $10^4 \text{ см}^2/(\text{В с})$.
2. Какова предельная толщина пленки, при которой возможно наблюдение квантово-размерных явлений при комнатной температуре, если эффективная масса носителей $m = 0.1 m_0$?
3. Для прямоугольной квантовой ямы шириной L и глубиной U получить уравнение для определения значений энергии связанных состояний. Определить число связанных состояний в яме. Найти условие, при котором расстояние по шкале энергий от вершины барьера до нижнего уровня в яме равно заданной величине E_0 .
4. Решить предыдущую задачу в случае разных эффективных масс электронов в барьере и яме — $m_{\bar{o}}$ и $m_{\text{я}}$.

Указание: воспользоваться граничным условием $\frac{1}{m_{\bar{o}}} \frac{d\psi_{\bar{o}}}{dz} \Big|_{z=0} = \frac{1}{m_{\text{я}}} \frac{d\psi_{\text{я}}}{dz} \Big|_{z=0}$.

5. Рассмотреть цепочку из N атомов в бесконечно глубокой потенциальной яме N_a . Показать, что значения энергии для векторов обратной решетки

равны: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m(Na)^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Какое максимальное значение может

принимать n ?

Указание: Учтеь, что волновые векторы, относящиеся к одной пространственно квантованной зоне, должны лежать в первой зоне Бриллюэна.

6. Найти волновые функции и уровни энергии в треугольной квантовой яме, которая слева в точке $z = 0$ ограничена бесконечно высокой стенкой и справа потенциалом $V = az$.

Указание: ввести константы $l = \left(\frac{\hbar^2}{2m\alpha} \right)^{1/3}$, $\lambda = l^2 \frac{2mE}{\hbar^2}$ и сделать замену переменной $z = l(\xi + \lambda)$.

7. Найти уравнение для определения энергии связанных состояний в яме, ограниченной справа в точке $z = 0$ бесконечно высокой стенкой, а справа потенциалом $V(z) = -V_0 e^{-\alpha z}$.

Указание: сделать сначала замену переменной $t = e^{-\frac{\alpha}{2}z}$, а затем $\xi = \sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2 \alpha^2}} t$.

8. Поверхность тонкой монокристаллической пленки кремния имеет ориентацию (100). Рассчитайте плотность электронных состояний в таком двумерном электронном газе. Что изменится при ориентации поверхности (111)?

9. Получить выражение для экранированного потенциала точечного заряда в двумерном электронном газе.

Указание: решить уравнение Лапласа в цилиндрической системе координат. Заряд в области двумерного электронного газа использовать в качестве граничного условия.

10. Решить уравнение Шредингера для электронов в двумерном электронном газе, находящемся в плоскости $z = 0$ во внешнем магнитном поле $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ и электрическом поле $\mathbf{F} = (F_x, 0, 0)$.

11. Найти связь между концентрацией электронов и уровнем Ферми для вырожденного одномерного электронного газа.

Указание: использовать квадратичный закон дисперсии энергии электронного газа.

12. Сверхрешётки Si/SiGe. Рассчитайте период сверхрешетки Si/SiGe, при котором минимум зоны проводимости Si (который соответствует волновому числу $k \approx 0, 8 \pi/a_0$, где a_0 – постоянная решётки) может быть приведен к $k = 0$ (в соответствии с концепцией расщепления зон рассматривае-

мая сверхрешетка может вести себя подобно объемному полупроводнику с прямыми оптическими переходами).

13. Структуры пониженной размерности. Рассмотрим полупроводниковую квантовую яму с шириной a , квантовую проволоку с квадратным сечением ($a \times a$) и квантовую точку с объемом ($a \times a \times a$). Рассчитайте энергию E_{e1} основного электронного состояния для перечисленных структур в GaAs, где $a = 6$ нм. Качественно объясните, почему значения E_{e1} возрастают с ростом локализации в структуре.
14. Длина волны Ферми λ_F определяется как длина волны электрона при энергии Ферми E_F . Рассчитайте значение для электронов в квантовой яме типа AlGaAs/GaAs/AlGaAs при $n_{2D} = 10^{16} \text{ м}^{-2}$. Сравните полученный результат с известными значениями λ_F для распространенных металлов.

Заключение

Рассмотренные в данном пособии модели наноструктур могут претендовать лишь на качественное описание поведения электронов и дырок. Следует, однако, отметить, что изменения параметров структуры даже в достаточно широких пределах не приводят к существенным изменениям в характере квантовых состояний электронов и дырок, относящихся, по крайней мере, к наиболее глубоким подзонам энергетического спектра. Изменяя эти параметры, например, число квантовых ям (КЯ), их размеры и глубину в различных слоях, можно получить систему КЯ с заданным расположением 2D подзон. Таким образом, могут быть реализованы именно те свойства, которые необходимы для функционирования определенной приборной структуры.

Элементарные низкоразмерные структуры, рассмотренные в данной работе, в определенном смысле являются идеализированными объектами. Очевидно, что низкоразмерные структуры, представляющие практический интерес, должны располагаться на какой-либо подложке и иметь контакт с другими структурами и функциональными элементами. Более того, приборные применения требуют комбинации нескольких элементарных структур. Но несмотря на появление в сложных комбинированных структурах новых квантово-механических эффектов, определяющую роль в них продолжает играть квантовое ограничение.

В скором будущем в электронных и информационных технологиях следует ожидать широкого внедрения новых материалов в устройствах, методы и принципы действия которых будут существенно отличаться от современных. Нанотехнологии уже позволяют получать новые коммерческие продукты, хотя трудно предсказать, когда будут реализованы самые новаторские подходы, относящиеся, например, к синтезу органических и биологических материалов или созданию так называемых квантовых компьютеров. Однако можно быть уверенным, что подобные технологии станут экономически рентабельными и быстро найдут широкое и разнообразное практическое применение.

Список литературы

- [1] Абрамов, И.И. Классификация приборных структур одноэлектроники / И.И. Абрамов, И.И. Новик // Физика и техника полупроводников. – 1999. – Т. 33. – № 11.
- [2] Бондарев, Б.В. Курс общей физики: в 3 книгах. Книга 2. Электромагнетизм. Волновая оптика. Квантовая физика / Б.В. Бондарев, Н.П. Калашников, Г.Г. Спирын. – М.: Высшая школа, 2003.
- [3] Галицкий, В.М. Задачи по квантовой механике / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М.: Наука, 1992.
- [4] Датта, С. Квантовый транспорт: от атома к транзистору / С. Датта; под ред. В.Я. Демиховского. – М.: Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009.
- [5] Драгунов, В.П. Основы наноэлектроники / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. – М.: Физматкнига, 2006.
- [6] Дымников, В.Д. Уровни энергии в квантовой яме с прямоугольными стенками сложной формы / В.Д. Дымников, О.В. Константинов // Физика и техника полупроводников. – 1995. – Т. 29. – № 1.
- [7] Елинсон, М.И. Электрооптические эффекты в структурах с квантовыми ямами / М.И. Елинсон, В.А. Петров // Микроэлектроника. – 1987. – Т. 16. – № 6.
- [8] Лазаренкова, О.Л. Энергетический спектр неидеальной квантовой ямы в электрическом поле / О.Л. Лазаренкова, А.Н. Пихтин // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32. - № 9.
- [9] Лозовский, В.Н. Нанотехнология в электронике. Введение в специальность / В.Н. Лозовский, Г.С. Константинова, С.В. Лозовский. – СПб.: Лань, 2008.
- [10] Матвеев, А.Н. Атомная физика / А.Н. Матвеев. – М.: Мир, 2007.
- [11] Минкин, В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.

- [12] Петров, А.Г. Межуровневые оптические переходы в квантовых ямах / А.Г. Петров, А.Я. Шик // Физика и техника полупроводников. – 1993. – Т. 27. - № 6.
- [13] Силин, А.П. Полупроводниковые сверхрешетки / А.П. Силин // Успехи физических наук. – 1985. – Т. 147. – № 3.
- [14] Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик [и др.] / под ред. В.И. Ильина и А.Я. Шика. – СПб.: Наука, 2001.
- [15] Херман, М. Полупроводниковые сверхрешетки / М. Херман. – М.: Мир, 1989.
- [16] Broekaert, T.P.E. Pseudomorphic $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{AlAs}/\text{InAs}$ resonant tunneling diodes with peak-to-valley current ratios of 30 at room temperature / T.P.E. Broekaert, W. Lee, C.G. Fonstad // Applied Physics Letters. – 1988. – V. 53. – № 16.