

Туннельный транспорт электронов через гетеробарьеры с нанометровыми неоднородностями

© В.А. Козлов[¶], В.А. Вербус

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 8 апреля 2010 г. Принята к печати 20 апреля 2010 г.)

Исследовалось влияние квантовых объектов сферической формы (рассеивателей), встроенных в полупроводниковые барьеры, на протекание через них туннельного тока. Для этого решалась задача рассеяния затухающих (при энергии, меньшей потенциала барьера) падающей и отраженной волновых функций электрона на ступенчатом сферически-симметричном потенциале рассеивателя. Показано, что при этом внутри барьера могут возникать вихревые токовые структуры.

1. Введение

Уменьшение размеров полупроводниковых приборов до нанометровых величин (а следовательно, и используемых в них барьеров) приводит к тому, что потенциальные барьеры в приборах становятся неоднородными, например, просто из-за статистического разброса находящихся в них примесей. С другой стороны, в барьер можно внедрить специальные нанометровые включения, которые позволят изменить свойства барьера и создать потенциальные барьеры, обладающие новыми привлекательными свойствами. Например, нанометровые включения могут быть использованы для создания потенциальных барьеров, которые перестраиваются управляющим напряжением, что позволит осуществить электронное управление протеканием туннельного тока. Для выяснения открывающихся при этом возможностей требуется разработать новые методы квантового описания процессов туннелирования носителей заряда в неоднородных по плоскости потенциальных барьерах, что ранее не делалось. Решение возникающих здесь задач позволит создать новые типы полупроводниковых приборов, основанных на электронном управлении процессом неоднородного туннелирования.

В работе изучается электронный туннельный транспорт в сравнительно толстых гетеробарьерах, где туннелирование электронов через однородные барьеры экспоненциально подавлено. Поэтому здесь рассматриваются неоднородные в плоскости потенциальные барьеры, содержащие нанометровые включения сферической или цилиндрической форм, которые существенно увеличивают проникаемость барьера.

2. Метод описания туннельного транспорта через потенциальные барьеры, содержащие неоднородные по радиусу нанометровые включения

Рассмотрим туннельный транспорт электронов в неоднородных полупроводниковых гетеробарьерах, в кото-

рых неоднородность создается встроенными нанометровыми объектами сферической или цилиндрической формы. В качестве таких барьеров могут служить квантовые проволоки, квантовые точки, а также примесные атомы. Например, на рис. 1 схематически показан зависящий от радиуса ρ профиль потенциала $V(\rho)$ полупроводникового барьера, содержащего встроенные квантовые проволоки, с помощью которых можно управлять проводимостью барьера.

Предлагаемый в работе метод нахождения волновой функции и распределения плотности туннельного тока в барьере опишем на примере задачи с находящимся внутри барьера встроенным сферическим объектом, который можно рассматривать как рассеиватель. Для этого

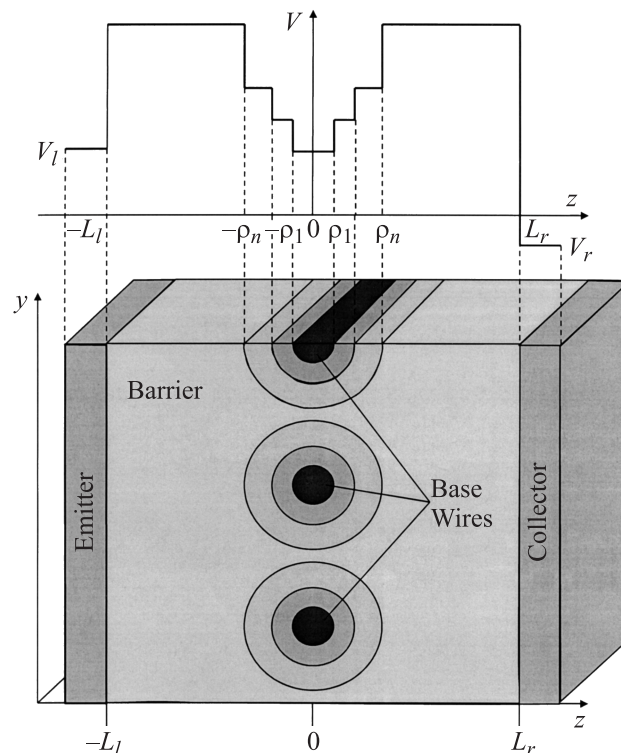


Рис. 1. Встроенные в барьер цилиндрические рассеиватели в виде квантовых проволок со ступенчатым профилем потенциала V , зависящим от радиуса ρ .

[¶] E-mail: kozlov@ipm.sci-nnov.ru

решим квантово-механическую задачу рассеяния затухающих (с энергией, меньшей потенциала барьера) падающей и отраженной от второй границы раздела барьера волновых функций электрона на сферически симметричном, но неоднородном по радиусу потенциале рассеивателя. Чтобы решить эту задачу предложенным методом, реальный профиль потенциала рассеивателя необходимо аппроксимировать достаточным количеством ступенек. Уровень потенциала ступенек внутри рассеивателя может быть как больше энергии падающего электрона, так и меньше. Данная задача схожа с задачей Ми [1] по рассеянию электромагнитной волны на сферической частице, но существует и ряд отличий. Во-первых, здесь имеем дело не с векторным, а со скалярным полем. Это упрощает рассмотрение. Во-вторых, изучается рассеяние скалярных волн на неоднородном по радиусу шаре. Это позволяет рассмотреть достаточно большой класс внедренных объектов. В третьих, рассматривается рассеяние не только распространяющихся, но и затухающих волн в барьере. Это позволяет исследовать влияние рассеивателя на протекание туннельного тока. Отметим, что для возникновения протекания туннельного тока (в отличие от надбарьерного движения) одной плоской затухающей волны недостаточно, так как она не переносит ток. Поэтому здесь необходим учет как падающей, так и отраженной волны от второй границы барьера, поскольку в условиях затухающих волн ток создается только за счет их взаимодействия. Наличие же рассеивателя внутри барьера приводит к образованию рассеянных волн, которые обеспечивают дополнительную интерференцию с падающей и отраженной волнами, что сильно влияет на характер протекания тока.

Подход Ми подразумевает разложение падающей плоской волны по сферическим гармоникам, собственным функциям сферического рассеивателя, и сшивки гармоник на границе рассеивателя, исходя из условия непрерывности волновой функции и ее производной. Данный метод, первоначально разработанный для распространяющихся волн, также применим и в случае затухающих волн [2]. Это связано с тем, что при таком построении волновой функции в качестве базисных функций берутся собственные решения уравнения Шредингера в сферической системе координат, с центром, совпадающим с центром рассеивателя [3]. Метод разделения переменных позволяет представить собственные решения в виде произведения угловой и радиальной части. Среди этих решений выбираются решения, удовлетворяющие условию затухания на бесконечности (условие Зоммерфельда) и условию отсутствия сингулярности в центре рассеивателя. Сконструированная таким образом волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера и всем граничным условиям и, следовательно, является решением задачи. Использование в настоящей работе такого подхода позволяет рассчитать влияние встроенных объектов с различным профилем потенциала (в том числе и потенциала примесей) на над- и под-барьерное протекание тока.

Опишем теперь предлагаемый метод более детально на примере сферического нанообъекта, расположенного внутри барьера. Задачу рассеяния плоской волны на сферическом рассеивателе будем решать в приближении однократного рассеяния [4]. Это означает, что мы пренебрегаем отражением рассеянных на сферическом рассеивателе волн от границ барьера и последующим их попаданием на рассеиватель. В случае подбарьерного распространения волн собственные решения являются экспоненциально затухающими, что делает приближение однократного рассеяния даже более оправданным по сравнению с надбарьерным распространением, поскольку для затухающих волн вклад последующих кратностей рассеяния уменьшается экспоненциально.

В сферической системе координат r, ϑ, φ волновую функцию $\psi_b(r, \vartheta, \varphi)$ внутри барьера ($-L_l \leq z = r \cos \theta \leq L_r$) в области вне рассеивателя ($r > R$) можно записать следующим образом:

$$\psi_b(r, \vartheta) = A e^{i k_b r \cos \vartheta} + B e^{-k_b r \cos \vartheta} + \sum_{l=0}^{\infty} d_{b,l}(\vartheta) h_l^{(1)}(k_b r). \quad (1)$$

Ввиду аксиальной симметрии задачи считаем, что волновая функция не зависит от полярного угла φ . Здесь R — внешний радиус рассеивателя; $k_b = (2m_b(E - V_b)/\hbar^2)^{1/2}$ — волновой вектор; m_b — эффективная масса электрона в барьере; V_b — потенциал барьера; E — энергия электрона; для туннельного транспорта ($E - V_b < 0$) волновой вектор k_b чисто мнимый; $h_l^{(1)}(k_b r)$ — сферическая функция Бесселя третьего рода, описывающая расходящиеся волны; l — индекс сферической гармоники (орбитальный момент). Исходя из граничных условий Зоммерфельда на бесконечности коэффициенты перед сферическими функциями Бесселя $h_l^{(2)}(k_b r)$, описывающими сходящиеся волны, выбираются равными нулю, поэтому они не входят в выражение (1). Амплитуды падающей A и отраженной B плоских волн в барьере в первом приближении считаются не зависящими от рассеивателя и находятся из задачи туннелирования электрона в однородном барьере, следовательно, зависят только от геометрических размеров и высоты барьера, а также от значений волновых векторов внутри и снаружи барьера. Компоненты $d_{b,l}(\vartheta)$ сферических гармоник рассеянной составляющей волновой функции (1) в барьере выражаются через полиномы Лежандра $P_l(\cos(\vartheta))$:

$$d_{b,l}(\theta) = (2l + 1) i^l D_{b,l} P_l(\cos \vartheta), \quad (2)$$

где постоянные коэффициенты $D_{b,l}$ находятся из граничных условий.

Аппроксимация потенциального профиля рассеивателя ступенчатой функцией, зависящей только от радиуса r , позволяет представить рассеиватель в виде набора вложенных n шаровых слоев с постоянными потенциалами V_j и массой m_j внутри каждого шарового слоя. Волновая функция электрона $\psi_j(r, \vartheta)$ внутри шарового

слоя с индексом $j = 1, \dots, n$ и волновым вектором $k_j = (2m_j(E - V_j)/\hbar^2)^{1/2}$ имеет вид

$$\psi_j(r, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(d_{j,l}(\vartheta) h_l^{(1)}(k_j r) + c_{j,l}(\vartheta) h_l^{(2)}(k_j r) \right). \quad (3)$$

Компоненты расходящихся $d_{j,l}(\vartheta)$ и сходящихся $c_{j,l}(\vartheta)$ сферических гармоник выражаются по формуле (2) через соответствующие постоянные коэффициенты $D_{j,l}$ и $C_{j,l}$. Здесь функции $h_l^{(1)}(k_j r)$ и $h_l^{(2)}(k_j r)$ — сферические функции Бесселя третьего рода. Функции $h_l^{(1)}(k_j r)$ описывают расходящиеся от центра рассеивателя сферические волны, а $h_l^{(2)}(k_j r)$ сходящиеся. В каждом шаровом слое, за исключением центрального ядра с индексом $j = 1$, необходимо учесть оба типа волн. В центральном ядре рассеивателя ($j = 1$) постоянный коэффициент $C_{1,l}$ полагаем равным нулю, что обеспечивает отсутствие сингулярности волновой функции при $r \rightarrow 0$.

Дополним уравнения (1) и (3) граничными условиями Бастарда [5] для непрерывности волновых функций и линий тока:

$$\begin{aligned} \psi_j(r_j) &= \psi_{j+1}(r_j), \\ (1/m_j)\partial\psi_j(r_j)/\partial r &= (1/m_{j+1})\partial\psi_{j+1}(r_j)/\partial r \end{aligned} \quad (4)$$

на границах слоев. Здесь r_j — радиус внешней границы j -го шарового слоя. На внешней границе рассеивателя ($r_n = R$) граничное условие Бастарда дает для волн, рассеянных в барьер, следующее выражение: $D_{b,l} = (A + (-1)^l B)/2$, что следует из разложения плоской волны e^{ikz} по сферическим гармоникам:

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= e^{ikr \cos \theta} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{2} \left[h_l^{(1)}(kr) + h_l^{(2)}(kr) \right] P(\cos \vartheta) \end{aligned} \quad (5)$$

и замены $k \rightarrow -k$ для волны, распространяющейся в $-z$ -направлении. Это дает возможность вычислить коэффициенты $D_{b,l}$, $D_{j,l}$ и $C_{j,l}$ через амплитуды A и B падающих на рассеиватель плоских волн методом прогонки с использованием рекуррентных соотношений, позволяющих находить коэффициенты в данном j -м слое через коэффициенты предыдущих слоев. Зная волновую функцию, плотность неоднородного туннельного тока, протекающего в барьере как вне $j = b$, так и внутри рассеивателя в j -м слое ($j = 1, \dots, n$), находим по следующей формуле:

$$\mathbf{j}_j = \frac{ie\hbar}{2m_j} (\psi_j \nabla \psi_j^* - \psi_j^* \nabla \psi_j). \quad (6)$$

В данной работе были проведены численные расчеты волновой функции и распределения плотности тока по формулам (1), (3) и (6) для случая однородного сферического рассеивателя.

Задача, имеющая цилиндрическую симметрию (как на рис. 1), может быть решена аналогичным методом —

простой заменой в (1), (3) сферических функций на цилиндрические. Преимущества, связанные с использованием цилиндрической геометрии вместо сферической, состоят в том, что в качестве встроенных объектов здесь выступают протяженные объекты — квантовые нити. Это позволяет легко изменять их потенциал за счет подачи управляющего напряжения на концы квантовых нитей (рис. 1). Таким образом, появляется возможность электронного управления протеканием туннельного тока через барьер, что позволит создавать активные приборы, способные усиливать сигналы.

Развитый в настоящей работе метод подходит как для описания подбарьерного, так и надбарьерного неоднородного транспорта носителей заряда через барьеры, в частности он позволяет рассчитывать транспорт носителей при наличии резонансных уровней внутри рассеивателя (например, примесного атома). Это дает возможность изучать квантовые свойства внедренных в барьер объектов по поверхностному распределению протекающего туннельного тока, а также влиять на эти распределения с помощью внедрения в барьер объектов с заданными свойствами. Умение описывать резонансное туннелирование через искусственно внедренные внутрь барьеров квантовые объекты позволит найти условия возникновения каскадной инверсной населенности в таких системах и создать новые типы активных сред для квантовых каскадных лазеров [6,7].

3. Результаты расчетов для барьеров со сферическими включениями

Возможности предлагаемого метода вычисления волновой функции и протекающего через барьер тока продемонстрируем на примере туннельного транспорта электронов через сравнительно толстый барьер толщиной $d = 40$ нм, изготовленный на основе гетероструктуры GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN с $x = 0.2$ и величиной разрыва дна зоны проводимости, равной 320 мэВ. В этом случае однородное туннелирование электронов через такой потенциальный барьер экспоненциально подавлено, и здесь интересно посмотреть, что произойдет при резонансном туннелировании. Для этого рассмотрим модельную задачу, в которой будем считать, что внутри потенциального барьера находится сферический объект радиусом 10 нм, образованный на основе того же материала Al_xGa_{1-x}N с $x \approx 0.1$ и высотой барьера ~ 130 мэВ. Этот объект формирует внутри барьера квантовую яму глубиной ~ 190 мэВ, в которой могут находиться несколько уровней размерного квантования. Центр сферического рассеивателя будем считать находящимся в начале координат $x = y = z = 0$. Электрон налетает на барьер в виде плоской волны в $+z$ -направлении и распространяется в барьере, ограниченном слева плоскостью $z = -L_l = -20$ нм и справа плоскостью $z = L_r + 20$ нм. Потенциалы V_l и V_r дна зоны проводимости GaN примем для определенности равными нулю, так что

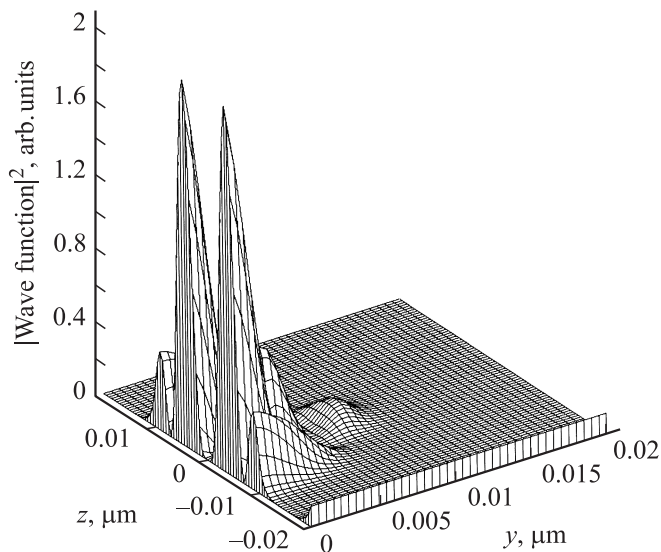


Рис. 2. Квадрат модуля волновой функции электрона при резонансном туннелировании через барьер толщиной $d = 40$ нм, изготовленный на основе гетероструктуры из GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN с $x = 0.2$ и высотой потенциального барьера 320 мэВ, содержащей встроенную сферическую квантовую яму с радиусом 10 нм, изготовленную из Al_xGa_{1-x}N с $x \approx 0.1$ и высотой барьера ~ 130 мэВ.

потенциал барьера V_b из материала Al_{0.2}Ga_{0.8}N будет равен 320 мэВ.

Посмотрим, какие особенности туннельного транспорта возникают при совпадении энергии налетающего на барьер электрона с одним из уровней размерного квантования. На рис. 2 приведен квадрат модуля волновой функции $|\psi(x=0, y, z)|^2$ электрона, имеющего энергию ~ 257 мэВ и туннелирующего через такой барьер в условиях резонанса с уровнем энергии в сферической квантовой яме. Волновая функция изображена на прямоугольнике, имеющем следующие координаты: $-20 \text{ нм} \leq z \leq +20 \text{ нм}$, $+0.5 \text{ нм} \leq y \leq +20 \text{ нм}$, $x = 0$. Отличное от нуля значение $y = +0.5 \text{ нм}$ выбрано для того, чтобы явно показать разрез квадрата модуля волновой функции $|\psi(x=0, y, z)|^2$ плоскостью $y = 0.5 \text{ нм}$, проходящей вблизи центра рассеивателя. На этом рисунке явно видно характерное спадание волновой функции электрона в глубь барьера от плоскости $z = -20 \text{ нм}$. Внутри рассеивателя и вблизи него возникает резонансный рост волновой функции электрона с характерным поведением, соответствующим угловому моменту $l = 2$, что можно усмотреть из вида этого рисунка. Кроме того, величина углового момента также может быть легко установлена и из сравнения вкладов слагаемых с различными l в формулы (1) и (3). Для рассматриваемого случая величины слагаемых с $l = 2$ намного превышают все остальные слагаемые в суммах по l .

Пространственное распределение z -компоненты плотности тока $J_z(x=0, y, z)$ в барьере и рассеивателе представлено на рис. 3. Из этого рисунка видно, что внутри рассеивателя возникают два глубоких минимума при

$z \approx -5 \text{ нм}$ и $z \approx 2.5 \text{ нм}$, соответствующих протеканию тока вблизи центра рассеивателя в отрицательном направлении. Если учесть аксиальную симметрию задачи, то это означает, что внутри рассеивателя возникает два

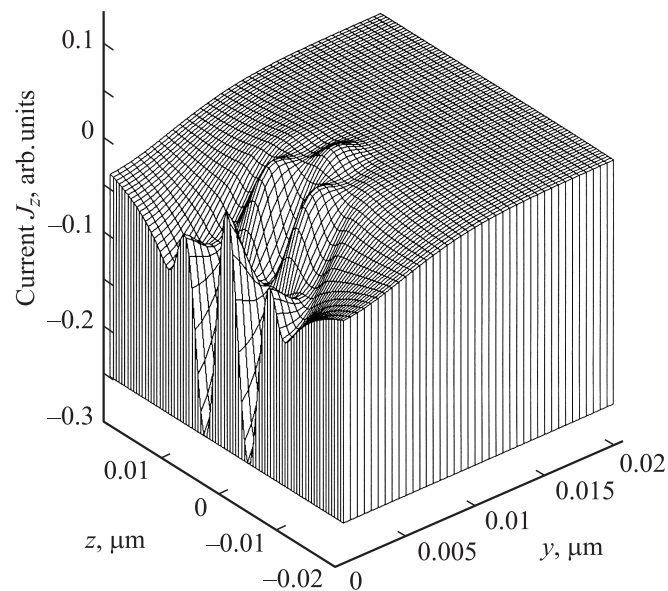


Рис. 3. Пространственное распределение J_z -компоненты туннельного тока, протекающего через барьер толщиной $d = 40$ нм, изготовленный на основе гетероструктуры из GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN с $x = 0.2$ и высотой потенциального барьера 320 мэВ, содержащий встроенную сферическую квантовую яму с радиусом 10 нм, изготовленную из Al_xGa_{1-x}N с $x \approx 0.1$ и высотой барьера ~ 130 мэВ. Ток втекает в барьер в направлении z на границе $z = -0.02$ мкм.

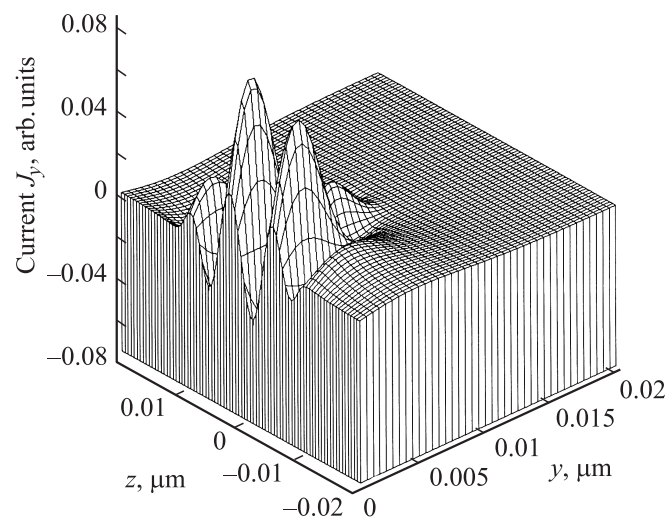


Рис. 4. Пространственное распределение J_y -компоненты туннельного тока, протекающего через барьер толщиной $d = 40$ нм, изготовленный на основе гетероструктуры из GaN/Al_xGa_{1-x}N/GaN с $x = 0.2$ и высотой потенциального барьера 320 мэВ, содержащий встроенную сферическую квантовую яму с радиусом 10 нм, изготовленную из Al_xGa_{1-x}N с $x \approx 0.1$ и высотой барьера ~ 130 мэВ. Ток втекает в барьер в направлении z на границе $z = -0.02$ мкм.

тороидальных вихря тока, надетых как бусы на общую ось торов (ось z) с разными центрами торов: $z \approx -5$ нм и $z \approx 2.5$ нм. Эти вихри вращаются в одинаковом направлении, при этом вихревой ток вблизи оси торов течет против направления туннелирования электрона, т.е. в $-z$ -направлении. Такой характер поведения туннельного тока в условиях резонанса с этим уровнем энергии более ясно виден, если наряду с картиной распределения плотности тока $J_z(x=0, y, z)$ рассмотреть еще и компоненту плотности тока $J_y(x=0, y, z)$, которая представлена на рис. 4. Таким образом, при резонансном протекании туннельного тока в неоднородных барьерах могут возникать нетривиальные топологические структуры, которые могут представлять интерес как в теоретическом, так и в практическом аспектах.

Работа частично поддержана РФФИ: № 09-02-00898-а (В.К.)

Список литературы

- [1] Mic. Ann. Physik, **25**, 377 (1908).
- [2] V.A. Kozlov, V.A. Verbus. J. Phys.: Conference Ser., **193**, 012032 (2009).
- [3] Р. Ньютон. *Теория рассеяния волн и частиц* (М., Мир, 1969).
- [4] А. Исимару. *Распространение и рассеяние волн в случайно неоднородных средах* (М., Мир, 1981).
- [5] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 5693 (1981).
- [6] Р.Ф. Казаринов, Р.А. Сурис. ФТП, **5**, 797 (1971).
- [7] J. Faist, F. Capasso. Science, **264**, 553 (1994).

Редактор Л.В. Беляков

Tunnelling transport of electrons through the heterobarriers with embedded spherical or cylindrical nanoobjects

V.A. Kozlov, V.A. Verbus

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Science,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The tunneling transport through the heterostructure barriers containing the embedded quantum spherical or cylindrical nanoobjects is studied. It is shown that the toroidal vortices of current may arise in these systems.