# Краткие сообщения

01

## Импедансные условия резонансного прохождения и резонансной локализации волн в барьерных структурах

© Е.А. Нелин

Национальный технический университет Украины „Киевский политехнический институт“,
03056 Киев, Украина
e-mail: ye.nelin@gmail.com

(Поступило в Редакцию 27 октября 2009 г. В окончательной редакции 27 апреля 2010 г.)

Сформулированные импедансные условия резонансного прохождения и резонансной локализации волн в барьерных структурах. Получены аналитические выражения для собственных значений различных барьерных структур.

Слоистые барьерные структуры используются во многих научных и технических приложениях, они составляют основу наноэлектроники. Особую значимость имеют резонансное прохождение (РП), в частности резонансное туннелирование (РТ), и резонансная локализация (РЛ) волн в таких структурах. Традиционно барьерные задачи решаются в матричной форме сшиванием решений на границах из условий непрерывности функции, характеризующей волну, и ее производной [1]. В [2,3] такой подход, а также метод многолучевой интерференции использованы для моделирования двухбарьерной гетероструктуры и квантовой ямы с прямоугольными стенками сложной формы. В импедансном подходе [4] граничные условия учитываются автоматически, что существенно упрощает решение. В настоящей работе на основе такого подхода сформулированы импедансные условия РП и РЛ (РПЛ), а также получены аналитические выражения для собственных значений различных барьерных структур.

Неоднородности возмущений падающей волны на неоднородностях структуры вызывают многократные отражения. В результате интерференции отраженных волн внутри структуры формируется стоячая волна, резонансная при РПЛ. Резонансная стоячая волна компенсирует неоднородности возмущений падающей волны [4].

Обозначим через $Z_+$ и $Z_-$ входные импедансы соответственно в прямом и обратном направлении в любой точке дисперсивных сред структуры. Для РПЛ эти импедансы должны быть согласованы. Поскольку прохождению волны соответствует неравенство нулю активных составляющих импедансов $Z_\pm$, а локализации — равенство, импедансные условия РПЛ имеют вид:

$$Z_+ = Z_-, \quad \mathrm{Re}Z_\pm \neq 0, \tag{1}$$

$$\mathrm{Im}Z_+ = \mathrm{Im}Z_-, \quad \mathrm{Re}Z_\pm = 0, \tag{2}$$

где $\mathrm{Re}Z_\pm$ и $\mathrm{Im}Z_\pm$ — активные и реактивные составляющие импедансов $Z_\pm$.

В приведенной на рис. 1, *a* обобщенной модели барьерной структуры отрезок линии передачи соответствует одному из внутренних слоев, а импедансы $Z_{R,L}$ эквивалентны остальным слоям и внешней среде. При выполнении (1) и (2) имеем

$$A = Z\,\frac{Z_R - Z_L}{Z^2 - Z_R Z_L}, \tag{3}$$

где $A = \mathrm{th}ika$, $k$ и $a$ — волновое число и толщина слоя. Если $Z_R = Z_L = Z$, значение $A$ — любое.

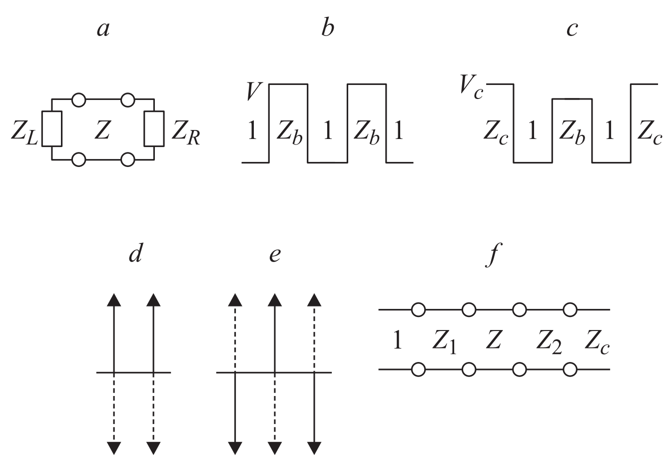


**Рис. 1.** Модели барьерных структур: *a* — обобщенная модель барьерной структуры, $Z$ — импеданс внутреннего слоя, $Z_{R,L}$ — эквивалентные входные импедансы; *b* — симметричная двухбарьерная структура, $V$ — высота барьера, 1 и $Z_b$ — нормированные импедансы внешней среды, ямы и барьера; *c* — двухъямная структура, $V_c$ и $Z_c$ — потенциал и импеданс внешней среды; *d* — двойная $\delta$-неоднородность; *e* — тройная $\delta$-неоднородность; *f* — трехслойная структура, $Z_{1,2}$ — импедансы внешних слоев.

## Симметричные барьерные структуры

Импедансы $Z_R$ и $Z_L$ комплексно сопряжены. Условие (3) примет вид

$$A = \frac{2iZ\mathrm{Im}Z_R}{Z^2 - |Z_R|^2}. \quad (4)$$

Собственные значения РП симметричной двухбарьерной структуры (рис. 1, $b$) определяются выражениями

$$\operatorname{tg} ka = \frac{2\operatorname{ctg} k_b b}{(Z_b + Z_b^{-1})}$$

и $\operatorname{tg} k_b b = 0$ (собственные значения барьера), где $k_b$ и $b$ — волновое число и толщина барьера. В случае квантово-механической среды

$$Z_b = \sqrt{m(E - V)/m_b E},$$

где $m$ и $m_b$ — эффективная масса электрона в области ямы и барьера; $E$ — энергия электрона. При $E < V$ собственные значения соответствуют РТ.

Для двухъямной структуры (рис. 1, $c$) при РЛ ($E < V_c$) и РП ($E > V_c$), согласно (4), учитывая, что средний слой — барьер, имеем

$$B = \frac{2Z_b(1 - Z_c A)(Z_c - A)}{Z_b^2(1 - Z_c A)^2 + (Z_c - A)^2},$$

$$B = \frac{2Z_b(Z_c^2 - 1)A}{Z_b^2(1 - Z_c^2 A^2) - (Z_c^2 - A^2)}, \quad (5)$$

где $B = \operatorname{th} ik_b b$, а $A$ соответствует яме. При $E > V$ необходимо учесть собственные значения барьера ($\operatorname{tg} k_b b = 0$), а при $Z_c = Z_b$ — собственные значения ямы ($\operatorname{tg} ka = 0$).

Двухъямный потенциал обычно рассматривают при $V_c = \infty$ и $E < V$. Исходя из (5) получим уравнение

$$\operatorname{tg}^2 ka + 2\xi \operatorname{ctg} \chi b \operatorname{tg} ka + \xi^2 = 0$$

с решениями $\operatorname{tg} ka = -\xi \operatorname{cth}(\chi b/2)$ и $\operatorname{tg} ka = -\xi \operatorname{th}(\chi b/2)$, где $\xi = |Z_b|^{-1}$; $\chi = |k_b|$. При $m_b = m$ имеем $\xi = k/\chi$ и решения совпадут с [5].

Если $V_c = V$, $E < V$ и $m_c = m_b = m$, где $m_c$ — эффективная масса электрона во внешней среде, то $Z_c = Z_b$ и условие для собственных значений РЛ примет вид

$$\operatorname{cth} \chi b = \frac{1}{2}\left(\frac{\xi^{-1}\operatorname{tg} ka + 1}{\xi \operatorname{tg} ka - 1} + \frac{\xi \operatorname{tg} ka - 1}{\xi^{-1}\operatorname{tg} ka + 1}\right). \quad (6)$$

В случае толстого барьера, когда $\chi b \geq 2$, $\operatorname{cth} \chi b \approx 1$ и из (6) следует известное выражение для потенциальной ямы:

$$\operatorname{tg} ka = \frac{2}{\xi - \xi^{-1}} = \frac{2\sqrt{E(V - E)}}{2E - V}.$$

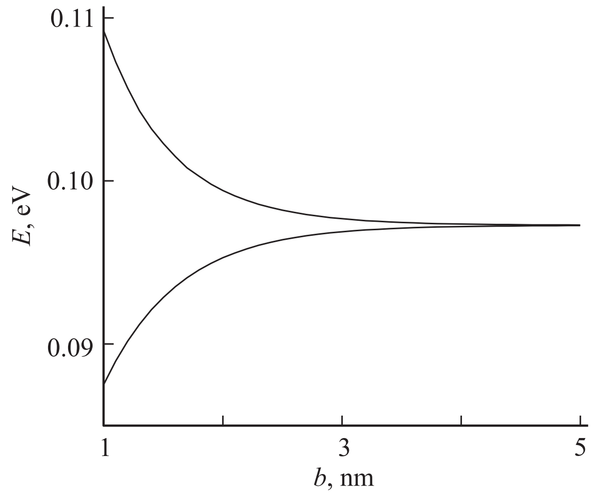


**Рис. 2.** Зависимости уровней двухъямной структуры. $V_c = V = 0.2$ eV, $m_c = m_b = m = m_0$, где $m_0$ — масса электрона, $a = 1$ nm.

Зависимости на рис. 2 соответствуют (6) и иллюстрируют переход собственных значений двухъямного потенциала к собственному значению потенциальной ямы.

При $V_c < E < V$ потенциал на рис. 1, $c$ моделирует симметричную однобарьерную структуру с РТ [4].

Условиям (5) соответствует равенство нулю знаменателя и числителя выражения для коэффициента отражения от структуры. Найденный из (5) коэффициент отражения при нормировании к $Z_c$ совпадает с [4].

При моделировании структур широко используется $\delta$-неоднородность ($\delta$-барьер или $\delta$-яма). Дельта-неоднородность моделирует высокий тонкий барьер или

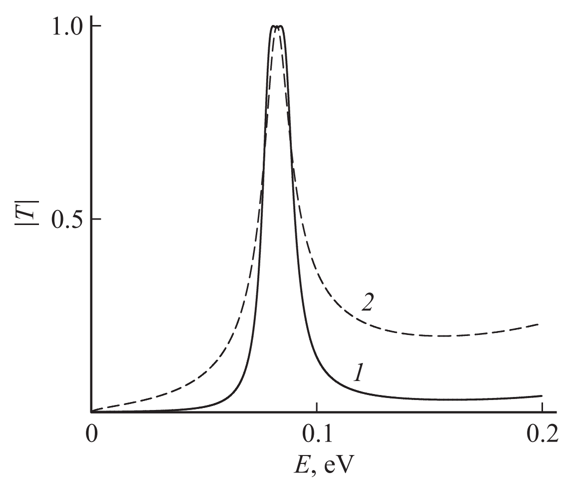


**Рис. 3.** Зависимости коэффициентов прохождения тройной и двойной $\varepsilon$-неоднородностей (кривые *1* и *2*). Высота $\varepsilon$-барьера 1 eV, ширина $\varepsilon$-ямы 0.2 nm; глубина $\varepsilon$-ямы 1.24 и 1.60 eV, толщина $\varepsilon$-барьера 0.4 и 0.2 nm, $a = 2$ и $a = 1.93$ nm соответственно для тройной и двойной $\varepsilon$-неоднородности, эффективная масса электрона — $m_0$.

глубокую узкую яму, которые обозначим как $\varepsilon$-неоднородность. Потенциал квантово-механической $\delta$-неоднородности площадью $\alpha$ и шириной $\Delta \to 0$ равен $V = \alpha/\Delta \to \infty$, а нормированный входной импеданс — $Z_\delta = 1 + 2i\eta$, где $\eta = \pm\alpha m/\hbar^2 k$, верхний знак соответствует $\delta$-барьеру.

Для двойной $\delta$-неоднородности (рис.1, $d$) с идентичными неоднородностями исходя из (4) имеем $\operatorname{tg} ka = -\eta^{-1}$. Здесь $a$ — расстояние между $\delta$-неоднородностями. В случае разных по характеру неоднородностей с одинаковой площадью, согласно (3), $\operatorname{tg} ka = 0$. Для тройной $\delta$-неоднородности (рис. 1, $e$) с идентичными крайними неоднородностями и средней противоположного характера и удвоенной площади исходя из (4) имеем $\operatorname{tg} ka = -1/(2\eta + \eta^{-1})$ и $\operatorname{tg} ka = 0$.

Рис. 3 иллюстрирует РТ сквозь одиночный барьер в тройной и в двойной $\varepsilon$-неоднородности. Собственные значения тройной $\varepsilon$-неоднородности равны 0.081 и 0.082 eV, а ее $\delta$-модели — 0.082 и 0.094 eV.

## Несимметричные барьерные структуры

Модель на рис. 1, $f$ обобщает различные несимметричные трехслойные структуры. Исходя из (3) получим

$$A = Z\frac{Z_2(Z_1 + A_1)(Z_c - Z_2A_2) - Z_1(1 + Z_1A_1)(Z_2 - Z_cA_2)}{Z^2(Z_1 + A_1)(Z_2 - Z_cA_2) - Z_1Z_2(1 + Z_1A_1)(Z_c - Z_2A_2)}, \tag{7}$$

где $A_{1,2}$ — параметры слоев с индексами „1“ и „2“. В случае симметричной двухбарьерной структуры с несимметричными барьерами $Z_2 = Z_1$, $Z_c = 1$ и (7) совпадает с [6].

Для несимметричной однобарьерной структуры $a_2 = 0$ и

$$A = Z\,\frac{Z_c(Z_1 + A_1) - Z_1(1 + Z_1A_1)}{Z^2(Z_1 + A_1) - Z_1Z_c(1 + Z_1A_1)}.$$

При туннелировании $A$ — действительная величина. Из этого условия имеем

$$\operatorname{tg} k_1a_1 = Z_1\sqrt{\frac{(Z_c - 1)(|Z|^2 + Z_c)}{(Z_1^2 - Z_c)(|Z|^2 + Z_1^2Z_c)}}.$$

В наиболее простой структуре $Z_c = Z_1$. При этом

$$\operatorname{tg} k_1a_1 = \sqrt{\frac{Z_1(|Z|^2 + Z_1)}{|Z|^2 + Z_1^3}},$$

что совпадает с [7].

## Кристаллы. Кристаллоподобные структуры

Зонные свойства кристаллов и кристаллоподобных структур (КС) обусловлены РП в разрешенных зонах и реактивным волновым характером — в запрещенных.

Рассмотрим неограниченную КС, образованную чередующимися слоями с дисперсивным и в общем случае реактивным характером сред. Базовая ячейка такой КС — двухъбарьерная структура (рис. 1, $b$). Пусть $Z_R$ и $Z_L$ — входные импедансы соответственно на левой и правой границе барьерного слоя КС. Связав импедансы $Z_R$ и $Z_L$, исходя из (4) получим $Z_R = \sqrt{\psi} + i\eta$, где $\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta \operatorname{ctg} ka$;

$$\eta = \frac{1 - Z_b^2}{2(\operatorname{ctg} ka + Z_b \operatorname{ctg} k_b b)}.$$

При $\psi < 0$, чему соответствует $|\cos ka + \eta \sin ka| > 1$, импеданс $Z_R$ мнимый. Эти интервалы отвечают запрещенным зонам. Уровни дефектов и поверхностные уровни КС определяет условие РЛ (4).

Импедансные условия РПЛ позволяют получить аналитические выражения для собственных значений различных барьерных структур.

## Список литературы


[1] *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.
[2] *Дымников В.Д., Константинов О.В.* // ФТП. 1994. Т. 28. Вып. 5. С. 844–856.
[3] *Дымников В.Д., Константинов О.В.* // ФТП. 1995. Т. 29. Вып. 1. С. 133–139.
[4] *Нелин Е.А.* // УФН. 2007. Т. 177. № 3. С. 307–313.
[5] *Basdevant J.-T.* Lectures on quantum mechanics. NY: Springer, 2007. 308 p.
[6] *Нелин Е.А.* // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 10. С. 6–11.
[7] *Нелин Е.А.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 4. С. 95–98.