

# Динамика резонансного туннелирования в гетероструктурах с двухдолинным спектром

© Г.Ф. Караваев, А.А. Воронков

Сибирский физико-технический институт,  
634050 Томск, Россия

(Получена 4 марта 1998 г. Принята к печати 16 апреля 1998 г.)

Рассмотрим временные характеристики резонансного туннелирования электронов в квантовых гетероструктурах на основе GaAs и AlAs в рамках двухзонной модели. Из анализа фаз прошедшей и отраженной волн получены аналитические выражения для времен туннелирования и отражения. Решена задача распада Г- и X-резонансных состояний, которые существуют в таких гетероструктурах. Путем численного решения нестационарного уравнения Шредингера промоделирован процесс туннелирования волнового пакета через двухбарьерную гетероструктуру.

## Введение

Резонансно-туннельные эффекты, наблюдаемые в полупроводниковых квантоворазмерных структурах, являются физической основой для разработки быстродействующих приборов. Поэтому важное значение приобретает изучение временных характеристик резонансного туннелирования [1–9]. Подавляющее большинство теоретических работ по этой проблеме выполнено в приближении огибающих функций в рамках однодолинной модели зонного спектра или для случая свободной частицы, налетающей на барьер. Вместе с тем известно, что в наиболее широко используемых структурах, основанных на полупроводниковых соединениях  $A^{III}B^V$ , однодолинное описание часто недостаточно и потому требуется более точный подход, учитывающий многодолинный характер энергетического спектра.

Так, например, для структур на основе GaAs/AlAs (001) в экспериментах и в теории установлено, что Г–X-междолинное рассеяние электронов на гетерогранице является весьма существенной чертой квантовых процессов. В ряде работ [10–13] с помощью расчетов методом сильной связи и псевдопотенциала было установлено, что так называемая трехдолинная  $\Gamma_1$ – $X_1$ – $X_3$ -модель очень хорошо описывает спектры прохождения электронов в гетероструктурах (ГС) GaAs/AlAs (001).

В работах [14,15] методом функций Ванье и эмпирическим методом сильной связи анализировались также временные характеристики резонансного туннелирования электронов в структурах на основе GaAs/AlAs. Подобного рода исследования весьма трудоемки и потому многие вопросы динамики туннелирования еще не выяснены. По этой причине требуется более простой подход, который бы учитывал многодолинное устройство зонного спектра компонентов ГС, но использовал бы преимущества метода огибающих функций, позволяя рассмотреть большое число различных структур, в том числе помещенных во внешние поля.

Такой подход можно реализовать, воспользовавшись трехдолинной моделью, однако в качестве первого шага

предпочтительно рассмотреть более простую двухдолинную модель. В ней легче выполнить аналитические вычисления практически до конца, проще анализировать полученные результаты и делать на их основе качественные выводы. Наш опыт расчетов показал, что двухдолинная модель качественно правильно описывает спектры прохождения электронов в ГС на основе GaAs/AlAs. Наблюдающиеся отличия не принципиальны. В работе [16] методом огибающих функций численно было исследовано время убегания волнового пакета из квантовой ямы GaAs при упрощенном учете взаимодействия Г–X. Однако систематического исследования всех временных характеристик резонансного туннелирования при учете Г–X-рассеяния не проводилось.

## Модель

Предположим, что электронные состояния и спектр в компонентах ГС хорошо описываются в модели двух долин. Имея в виду полупроводниковые материалы GaAs и AlAs, будем говорить о Г- и X-долинах. Энергетический профиль Г- и X-долин зон проводимости в отсутствие внешнего поля в двухбарьерной ГС изображен на рис. 1.

При изучении характеристик ГС будем исследовать наиболее интересный промежуток энергий  $E$  падающей электронной волны  $E_{AlAs}^X \leq E \leq E_{GaAs}^X$ .

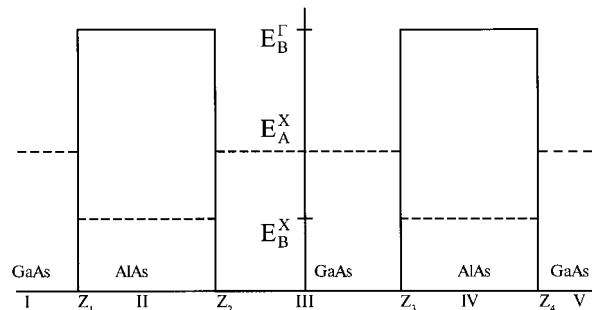


Рис. 1. Энергетический профиль Г- и X-долин зон проводимости двухбарьерной ГС на основе GaAs и AlAs.

При этом условия слои AlAs являются квантовыми ямами, а слои GaAs — барьерами для  $X$ -электронных состояний, и наоборот для  $\Gamma$ -электронных состояний. В дальнейшем под понятиями барьер, яма будем иметь в виду барьер и яму для  $\Gamma$ -электронных состояний (AlAs и GaAs соответственно), для  $X$ -электронных состояний будем употреблять понятия  $X$ -барьер (GaAs) и  $X$ -яма (AlAs). Когда электрон находится внутри слоя, он может принадлежать либо  $\Gamma$ -, либо  $X$ -долине, но когда он пересекает гетерограницу, имеет место процесс  $\Gamma$ - $X$ -рассеяния. Поэтому для описания электронных процессов мы будем использовать уравнения для огибающих  $F^\Gamma$ ,  $F^X$  в отдельности для  $\Gamma$ - и для  $X$ -долин в рамках метода эффективной массы, а также условия сшивания этих огибающих на гетерогранице.

Примем условия сшивания в виде, ранее обсуждавшемся в работах [17–20], а именно

$$F_A^\Gamma = F_B^\Gamma, \quad a_0 \frac{m_0}{m_A^\Gamma} \frac{\partial}{\partial z} F_A^\Gamma = a_0 \frac{m_0}{m_B^\Gamma} \frac{\partial}{\partial z} F_B^\Gamma + (-1)^n t F_X^B,$$

$$F_A^X = F_B^X, \quad a_0 \frac{m_0}{m_A^X} \frac{\partial}{\partial z} F_A^X = a_0 \frac{m_0}{m_B^X} \frac{\partial}{\partial z} F_B^X + (-1)^n t F_\Gamma^B, \quad (1)$$

где индексами  $A$  и  $B$  обозначены различные компоненты ГС,  $m_A^\Gamma$ ,  $m_B^\Gamma$ ,  $m_A^X$ ,  $m_B^X$  — эффективные массы,  $t$  — безразмерный параметр  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания,  $m_0$  — масса свободного электрона,  $a_0$  — период решетки. Целые числа  $n$  на гетерограницах отличаются на единицу, если расстояние между ними включает нечетное число молекулярных слоев, если же расстояние между гетерограницами включает четное число молекулярных слоев, то числа  $n$  на этих гетерограницах одинаковы. Это связано с тем, что блоховские функции  $|\Gamma\rangle$ ,  $|X\rangle$  имеют разные периоды вдоль направления  $[001]$ .

## Время прохождения и отражения, время распада резонансного состояния

В каждом из слоев ГС решения уравнения Шредингера для огибающих каждой долины записываются в виде суперпозиции волны, движущейся (затухающей) слева направо, и волны, движущейся (затухающей) справа налево. Используя затем условия сшивания (1) на каждой гетерогранице, построим матрицу переноса  $Q_i$  через границу между  $i$ -м и  $i+1$  слоями.

Перемножая матрицы переноса через две последовательные гетерограницы  $z = z_1$ ,  $z = z_2$ , можно получить матрицу переноса  $M_1 = Q_1 Q_2$  через один барьер. Эта матрица связывает коэффициенты огибающих в 1-м слое с коэффициентами огибающих в 3-м слое. Уравнения, связывающие налетающие, прошедшие и отраженные

волны, принимают вид

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ C_1 \\ D_1 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \\ C_3 \\ D_3 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

здесь  $A_i$ ,  $B_i$  и  $C_i$ ,  $D_i$  — коэффициенты, относящиеся к  $\Gamma$ -волне и к  $X$ -волне соответственно;  $A_i$ ,  $C_i$  — амплитуды волн, движущихся (затухающих) слева направо;  $B_i$ ,  $D_i$  — амплитуды волн, движущихся (затухающих) справа налево.

Полагая, что слева на барьер налетает только  $\Gamma$ -волна, а справа налетающих на барьер волн нет, мы должны принять  $C_1 = B_3 = D_3 = 0$ . В этом случае из (2) следует

$$A_3 = \frac{\beta_{11}^1}{\alpha_{11}^1 \beta_{11}^1 - \gamma_{11}^1 \delta_{11}^1} A_1. \quad (3)$$

Определение входящих в (3) величин разъясняется в *Приложении I*. Для двухбарьерной ГС с одинаковыми барьерами, начала которых разделены четным количеством молекулярных слоев, матрица переноса через второй барьер  $M_2$  аналогична матрице переноса через первый барьер  $M_1$ , надо только заменить координаты  $z_1$  и  $z_2$  на  $z_3$  и  $z_4$  соответственно. Матрица переноса через двухбарьерную структуру может быть представлена в блочном виде

$$M = M_1 M_2 = \begin{bmatrix} \alpha_{ij} & \gamma_{ij} \\ \delta_{ij} & \beta_{ij} \end{bmatrix} \quad i, j = 1, 2. \quad (4)$$

Матрица  $M$  связывает коэффициенты  $\Gamma$ - и  $X$ -волн по разные стороны двухбарьерной ГС. Аналогично предыдущему случаю при  $C_1 = D_5 = B_5 = 0$  находим

$$A_5 = \frac{\beta_{11}}{\alpha_{11} \beta_{11} - \gamma_{11} \delta_{11}} A_1. \quad (3)$$

Вид  $\alpha_{ij}$ ,  $\beta_{ij}$ ,  $\gamma_{ij}$ ,  $\delta_{ij}$  приведен в *Приложении II*.

Квадраты модуля правой части выражений (3) и (5) без  $A_1$  представляют собой коэффициенты прохождения, а их фазы определяют время прохождения.

Обсудим временные характеристики. Вопрос о времени туннелирования электрона через потенциальный барьер вызывает немало споров вследствие того, что время в квантовой механике не имеет статуса динамической переменной. В данной работе используется стандартный пакетный анализ.

При туннелировании электронной волны можно выделить три характерных процесса, связанных с прохождением, отражением и захватом волны в исследуемой ГС. Соответственно этому можно выделить время прохождения, время отражения и время жизни резонансного состояния (если энергия налетающего электрона близка к резонансному уровню). Времена прохождения и отражения определим как величины, связанные с поведением гребня волнового пакета [21–22].

Тогда время прохождения (туннелирования) электронной волны

$$\tau_T = \hbar \frac{\partial \Phi_T}{\partial E} + \frac{z' - z_1}{v_G}, \quad v_G = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (6)$$

где  $\Phi_T(k)$  — фаза, накопленная волной с волновым числом  $k$  при туннелировании через ГС ( $z' = z_2$  для однобарьерной ГС, а  $\Phi_T(k)$  определяется из (3),  $z' = z_4$  для двухбарьерной ГС, а  $\Phi_T(k)$  определяется из (5)). Время отражения  $\tau_R$  волнового пакета от ГС определим как разницу между моментом появления максимума отраженного волнового пакета в точке  $z = z_1$  и моментом появления максимума падающего волнового пакета. Таким образом

$$\tau_R = \hbar \frac{\partial \Phi_R}{\partial E}, \quad (7)$$

где  $\Phi_R(k)$  — фаза, накопленная волной при отражении от ГС.

Для нахождения времени жизни резонансного состояния в ГС следует решать задачу о распаде резонансного состояния, которая будет рассмотрена далее.

Фаза, накопленная волной при прохождении структуры, равна

$$\Phi_T = \Phi_1 - k_A a, \quad (8)$$

где  $\text{tg } \Phi_1 = -\frac{f_3}{f_2}$  в случае однобарьерной структуры, и

$$\Phi_T = \Phi_2 - k_A(2a + d), \quad (9)$$

где  $\text{tg } \Phi_2 = -\frac{P_3}{P_2}$  в случае двухбарьерной структуры. Вид функций  $f_2, f_3$  и  $P_2, P_3$  приведен в *Приложении I* и *II*.

Время туннелирования  $\Gamma$ -волны, например, через двухбарьерную ГС имеет вид

$$\tau_T = \hbar \frac{\partial \Phi_2}{\partial E} = \frac{\hbar}{P_2^2 + P_3^2} \left[ P_2 \frac{\partial P_3}{\partial E} - P_3 \frac{\partial P_2}{\partial E} \right]. \quad (10)$$

Рассмотрим время отражения электронной волны от ГС. Коэффициент  $B_1$  отраженной волны можно представить через элементы матрицы переноса  $M$  следующим образом:

$$B_1 = \frac{\alpha_{21}\beta_{11} - \gamma_{21}\delta_{11}}{\alpha_{11}\beta_{11} - \gamma_{11}\delta_{11}} A_1. \quad (11)$$

Заметим, что коэффициенты  $A_5, B_1$  имеют одинаковые знаменатели, отличаясь лишь видом числителей. Анализ числителя  $B_1$  показывает, что он является мнимой функцией, следовательно, время прохождения  $\tau_T$  и отражения  $\tau_R$  совпадают. Все особенности, присущие времени туннелирования, присущи и времени отражения.

Рассмотрим время жизни резонансного состояния. В двухбарьерной ГС наряду с  $\Gamma$ -резонансными состояниями вследствие эффекта  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания электронных состояний существуют  $X$ -электронные резонансные состояния. Время жизни и тех и других может быть найдено из решения системы уравнений (2) для однобарьерной ГС или из решения системы, отличающейся от (2) заменой  $M_1 \rightarrow M, A_3 \rightarrow A_5, C_3 \rightarrow C_5$  в случае

двухбарьерной ГС. Только теперь в этих уравнениях надо положить  $A_1 = C_1 = B_{3(5)} = D_{3(5)} = 0$ . Условия разрешимости этих уравнений дают комплексное уравнение, определяющее полюса соответствующих матриц рассеяния:

$$f_2(E) + if_3(E) = 0 \text{ для однобарьерной структуры, } (12)$$

$$P_2(E) + iP_3(E) = 0 \text{ для двухбарьерной структуры. } (13)$$

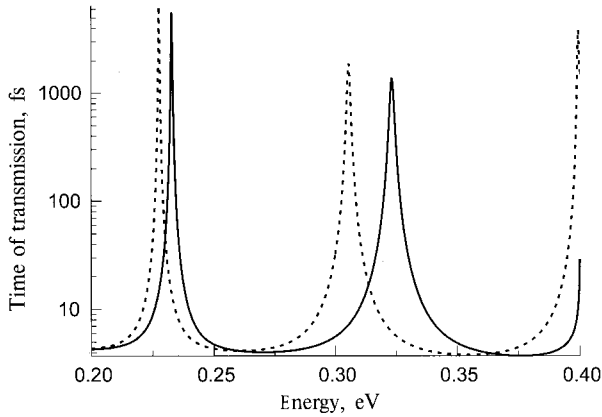
Эти уравнения решались численно методом Ньютона, находилась комплексная энергия  $E = E_R + iE_i$ , где ( $E_i < 0$ ), время распада резонансного состояния оценивалось по формуле  $\tau_D = -\frac{\hbar}{2E_i}$ .

В данной работе наряду с расчетом характеристик процесса туннелирования, основанном на анализе решения стационарного уравнения Шредингера, было выполнено моделирование процесса туннелирования через двухбарьерную ГС путем решения нестационарного уравнения Шредингера с учетом  $\Gamma$ - $X$ -рассеяния на гетерограницах. Моделирование прохождения волнового пакета проводилось с использованием прямого сеточного метода, трехслойного, явного и абсолютно устойчивого алгоритма Дюфора–Франкеля [23], причем на гетерограницах структуры учитывается  $\Gamma$ - $X$ -рассеяние в соответствии с условиями сшивания (1). Моделируется область длиной  $L \approx 28000 \text{ \AA}$ , двухбарьерная ГС состоит из барьеров толщиной 10 молекулярных слоев AlAs и ямы толщины 24 молекулярных слоя GaAs. Шаг по времени  $\Delta t = 0.001 \text{ фс}$ , шаг по пространственной координате  $\Delta x = 2.825 \text{ \AA}$ . Полуширина волнового пакета выбирается  $\delta z = 1000 \text{ \AA}$ . В рассматриваемом промежутке энергий  $E = 0.2 \div 0.4 \text{ эВ}$  неопределенность в энергии волнового пакета для данного  $\delta x$  соответствует  $\delta E \approx 10^{-3} \text{ эВ}$ , вследствие чего о времени туннелирования можно говорить с точностью  $\delta t \geq \frac{\hbar}{2\delta E} \approx 300 \text{ фс}$ . Время расплывания пакета  $\approx m_A^\Gamma \frac{(\delta x)^2}{\hbar} \approx 5800 \text{ фс}$  для GaAs, что больше времени моделирования.

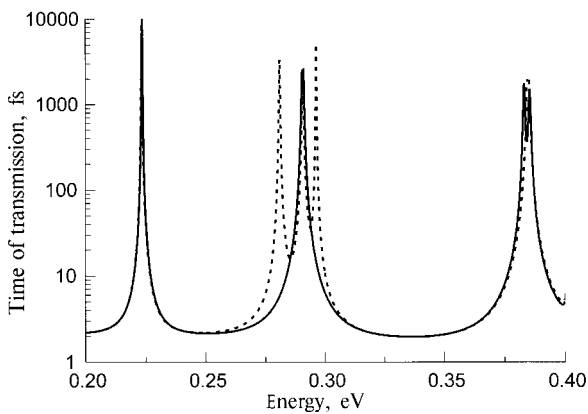
## Результаты и обсуждение

Численные расчеты были выполнены для ряда однобарьерных и двухбарьерных ГС на основе анализа решения стационарного уравнения Шредингера, для некоторых структур было проведено решение нестационарного уравнения Шредингера. При вычислении были использованы следующие параметры:  $m_A^\Gamma = 0.067m_0$ ,  $m_B^\Gamma = 0.13m_0$ ,  $m_A^X = m_B^X = 1.2m_0$ ,  $E_B^\Gamma = 1.0 \text{ эВ}$ ,  $E_B^X = 0.2 \text{ эВ}$ ,  $E_A^X = 0.4 \text{ эВ}$ ,  $a_0 = 5.65 \text{ \AA}$ .

Рассчитанные спектры пропускания соответствуют известным результатам [13,20,21]. Обсудим временные характеристики. Время туннелирования, рассчитанное согласно (10) для одно- и двухбарьерной ГС, как функция энергии имеет пики, соответствующие пикам коэффициента прохождения. Отчетливо видно присутствие  $X$ - и  $\Gamma$ -резонансных пиков времени туннелирования, заметна тонкая структура  $X$ -пигов (см. рис. 2,3). Из рисунков



**Рис. 2.** Время прохождения электрона через однобарьерную структуру; сплошная линия — AlAs (8 мол. слоев), штриховая линия — AlAs (9 мол. слоев).



**Рис. 3.** Время прохождения электрона через двухбарьерную структуру: сплошная линия — AlAs (10)/GaAs (16)/AlAs (10), штриховая линия — AlAs (10)/GaAs(24)/AlAs (10).

видно, что  $\Gamma$ - $X$ -рассеяние очень сильно влияет на время прохождения электронной волны через ГС. Если энергия падающей волны совпадает с разрешенными  $X$ -уровнями энергии в AlAs, то из-за эффекта  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания на гетерограницах электрон захватывается в  $X$ -состояния, локализованные в барьере, и за счет этого время прохождения существенно возрастает. Расчеты показывают, что время прохождения в пиках вблизи  $X$ -уровней отличается на 3 порядка от результатов, не учитывающих эффекта  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания.

Отметим, что несмотря на сложный вид электронного спектра пропускания ГС (пики и нули), никаких особенностей времени туннелирования в окрестности этих нулей не обнаружено. Особенности, связанные со спектрами коэффициента прохождения и времени туннелирования, в случае, когда энергия налетающего электрона близка к  $X$ -уровню, одинаковы как для двухбарьерной, так и для однобарьерной ГС. Наличие двух  $X$ -уровней в двухбарьерной ГС никак себя не проявляет. Ситуация меняется, когда в случае двухбарьерной ГС  $X$ -уровень по энергии близко подходит к  $\Gamma$ -резонансному уровню

ямы. В этом случае вырождение  $X$ -уровня снимается, происходит его расщепление на два уровня, и это обнаруживается как в спектрах пропускания, так и в спектре времени прохождения (например, на рис. 3 в области энергий  $\approx 0.3$  эВ наблюдается группа из двух  $X$ -уровней и одного  $\Gamma$ -уровня, а для двухбарьерной ГС с ямой из 16 монослоев и теми же барьерами наблюдается один  $X$ -пик, так как  $\Gamma$ -уровни находятся при других энергиях).

Формулы (6), (7) позволяют исследовать зависимость времени туннелирования от параметра  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания  $t$ . С ростом  $t$  становятся шире пики пропускания и меньше туннелирования, что очевидно. Чем больше  $\Gamma$ - $X$ -перемешивание, тем легче электрону туннелировать по  $\Gamma$ - $X$ - $\Gamma$ - $X$ - $\Gamma$ -каналу, почти свободно распространяясь в каждом из слоев структуры.

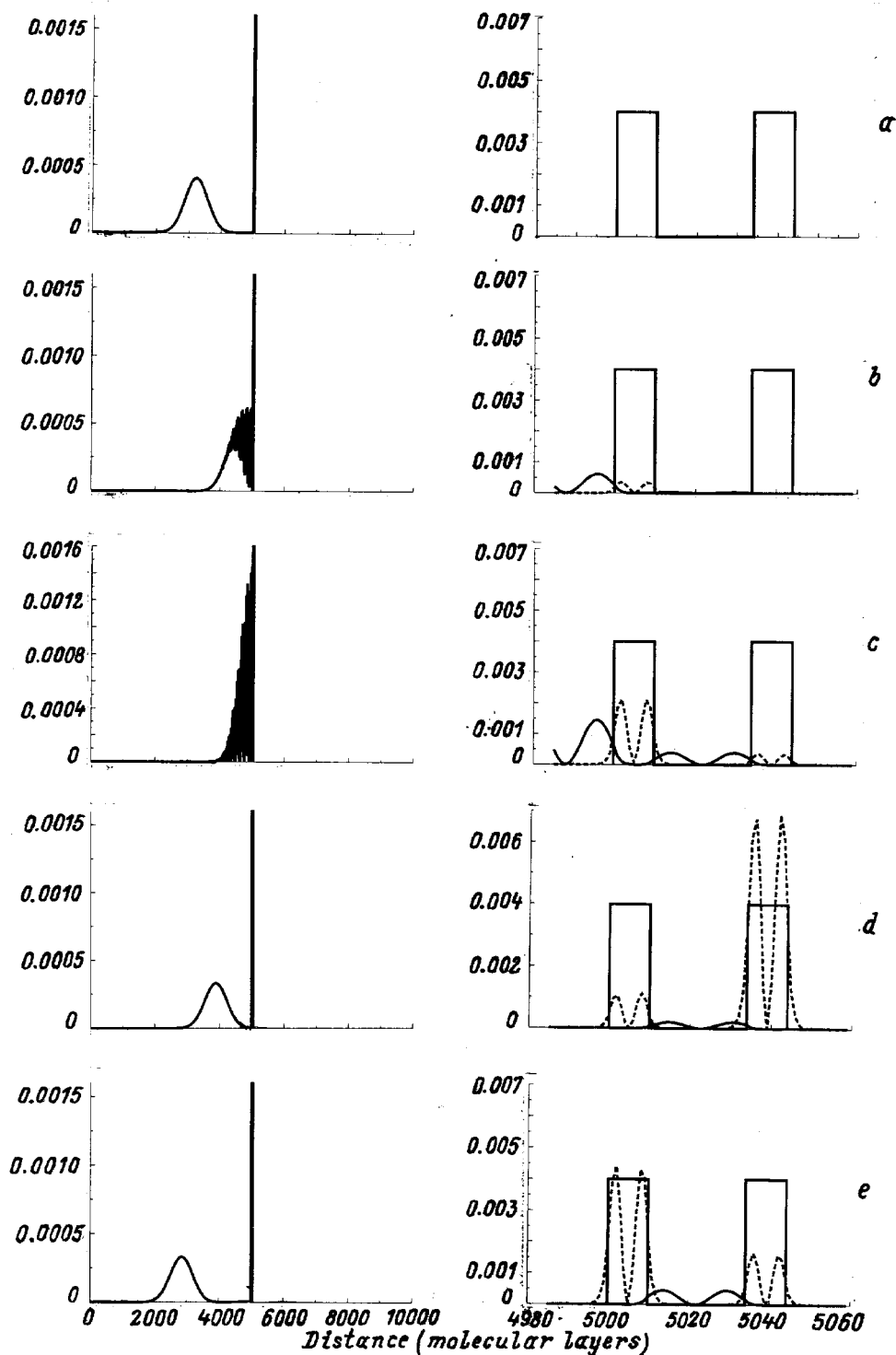
Обсудим времена распада резонансных состояний. Для этого необходимо решить уравнения (12), (13) для комплексной энергии  $E$ . Из расчетов следует, что значения вещественной компоненты энергии резонансного состояния с хорошей точностью соответствуют  $\Gamma$ - и  $X$ -пикам коэффициента прохождения, а мнимая компонента оказывается достаточно малой. Сравнивая времена, видим, что время прохождения оказывается достаточно близким

**Таблица 1.** Времена распада и прохождения  $\tau_D$ ,  $\tau_T$  электронной волны для однобарьерной гетероструктуры с  $N$  (AlAs) = 10 и 11 молекулярными слоями

| Пики            | $\tau_T$ , фс | $\tau_D$ фс |
|-----------------|---------------|-------------|
| $N$ (AlAs) = 10 |               |             |
| X1              | 4500          | 2240        |
| X2              | 900           | 540         |
| X3              | 700           | 390         |
| $N$ (AlAs) = 11 |               |             |
| X1              | 5000          | 2680        |
| X2              | 1500          | 700         |
| X3              | 700           | 370         |

**Таблица 2.** Времена распада и прохождения  $\tau_D$ ,  $\tau_T$  электронной волны для двухбарьерной гетероструктуры с  $N$  (AlAs) = 8 и  $N$  (GaAs) = 8,  $N$  (AlAs) = 10 и  $N$  (GaAs) = 24 молекулярными слоями

| Пики                             | $\tau_T$ , фс | $\tau_D$ фс |
|----------------------------------|---------------|-------------|
| $N$ (AlAs) = 8, $N$ (GaAs) = 8   |               |             |
| 1X                               | 7500          | 3930        |
| 1 $\Gamma$                       | 900           | 490         |
| 2X                               | 1300          | 700         |
| 3X                               | 4500          | 2300        |
| $N$ (AlAs) = 10, $N$ (GaAs) = 24 |               |             |
| 1X                               | 9100          | 19200       |
| 2X                               | 3400          | 1630        |
| 2 $\Gamma$                       | 2200          | 1280        |
| 3X                               | 5100          | 2530        |
| 4X                               | 1900          | 750         |



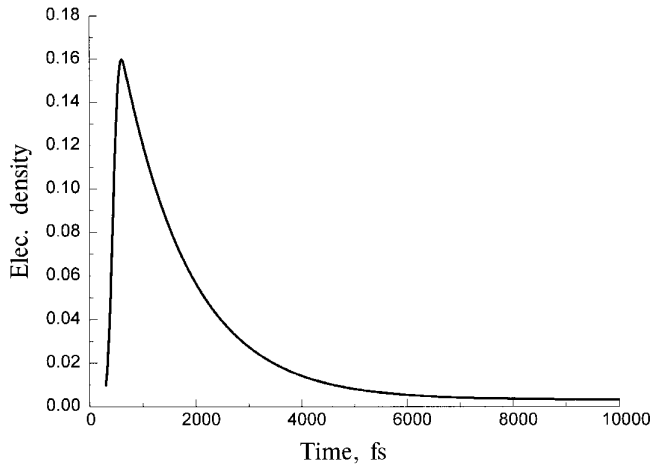
**Рис. 4.** Динамика туннелирования и отражения волнового пакета вне и внутри двухбарьерной гетероструктуры для  $\Gamma$ -уровня энергии. Время, фс:  $a - 0$ ,  $b - 300$ ,  $c - 410$ ,  $d - 660$ ,  $e - 900$ .

к удвоенным временам распада резонансных состояний (см. табл. 1 и 2).

При изменении параметра  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания  $t$  наблюдается, что время распада резонансного состояния увеличивается при уменьшении параметра  $t$ . Чем мень-

ше параметр  $t$ , тем больше локализованы  $X$ - и  $\Gamma$ -уровни и больше время жизни.

Моделирование процесса туннелирования проводилось для ГС GaAs/AlAs(10)/GaAs(24)/AlAs(10)/GaAs вблизи  $X$ - и  $\Gamma$ -пиков коэффициента прохождения.



**Рис. 5.** Зависимость электронной плотности внутри двухбарьерной структуры от времени.

На рис. 4 приведен процесс рассеяния волнового пакета со средней энергией  $E = 0.2910$  эВ, приблизительно соответствующей положению  $\Gamma$ -резонанса. В левом столбце изображено движение волнового пакета в целом, в правом столбце изображена детальная картина процессов, происходящих в двухбарьерной ГС. На рис. 4 видно, как волновой пакет подходит к ГС, как интерферируют подходящие и отраженные волны из волнового пакета, как происходит отражение и прохождение. В более подробной схеме видно, как в структуру проникает электронная волна, в яме появляются  $\Gamma$ -состояния, которые попали туда за счет туннелирования и  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания, а также в барьерах появляются  $X$ -электронные состояния вследствие  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания; в квантовой яме концентрируются  $\Gamma$ -электронные состояния, в  $X$ -ямах —  $X$ -электронные состояния. В момент времени, когда волновой пакет отразился и движется влево, электронная плотность  $\Gamma$ - и  $X$ -состояний в двухбарьерной ГС максимальна. С дальнейшим ростом времени волновой пакет уходит за пределы области моделирования, а электронная плотность  $\Gamma$ - и  $X$ -состояний в ГС медленно убывает. Из рис. 4, *c-e* видно, что имеют место осцилляции электронной плотности между барьерами (см. также [14]).

Вследствие узости пиков коэффициентов прохождения гетероструктуры очень трудно попасть на острие пика, и поэтому прошедшая через ГС волна мала.

Собственно сами временные характеристики демонстрируются на рис. 5, где изображена зависимость общей электронной плотности  $\Gamma$ - и  $X$ -состояний внутри ГС от времени. Отметим, что в некоторый момент времени наблюдается сильная аккумуляция плотности вероятности внутри ГС, а в дальнейшем с течением времени плотность вероятности убывает по экспоненциальному закону.

Время туннелирования волнового пакета определим как разность времен отрыва максимума прошедшего через ГС волнового пакета и падения максимума на-

летающего на ГС волнового пакета. Из моделирования следует, что это время  $\tau_{\text{mod}} = 300$  фс. Заметим, что в момент отрыва прошедшей волны электронная плотность в ГС мало отличается от максимальной. Таким образом, структура медленно разряжается, что уменьшает быстродействие рассматриваемой ГС.

При моделировании резонансного туннелирования волнового пакета при энергиях, соответствующих  $X$ -уровням энергии системы, наблюдается сильная аккумуляция электронной плотности в двухбарьерной структуре, причем очень велика  $X$ -электронная плотность. За счет этого в ГС происходит более медленная разрядка.

В заключение отметим два любопытных факта. При рассеянии волнового пакета с энергией, соответствующей  $\Gamma$ -резонансному состоянию, близкому к  $X$ -электронному состоянию, оказалось, что электронная плотность в  $X$ -состояниях сравнима с электронной плотностью в  $\Gamma$ -состояниях. Вероятно, это произошло из-за того, что для структуры  $\text{AlAs}(10)/\text{GaAs}(24)/\text{AlAs}(10)$   $\Gamma$ -резонансный уровень окружен уровнями  $2X$  и  $3X$ , поэтому роль  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания велика. Второй факт состоит в том, что при моделировании рассеяния пакета с энергией, соответствующей  $4X$  уровню энергии, прошедшего через ГС волнового пакета не сформировалось, электронная плотность просто вытекает с течением времени из структуры.

Таким образом, из моделирования процессов туннелирования (позволяющего учитывать процесс разрядки ГС) следует, что эффект  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания существенно уменьшает быстродействие подобного рода ГС. Более быстрая разрядка ГС наблюдается при энергиях, соответствующих  $\Gamma$ -уровням, нежели  $X$ -уровням энергии.

## Сравнение аналитических и модельных результатов

Моделирование процесса туннелирования волнового пакета через двухбарьерную ГС дает много полезной информации о взаимодействии волнового пакета и структуры, об эффекте  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания электронных состояний на гетерограницах. К сожалению, реализация алгоритма моделирования занимает массу машинного времени, поэтому одной из задач при реализации моделирования была задача соответствия характеристик, полученных модельным путем, и характеристик, полученных путем анализа фазы прошедшей волны. При сравнении характеристик оказалось, что полученные данные на примере ГС  $\text{AlAs}(10)/\text{GaAs}(24)/\text{AlAs}(10)$  хорошо согласуются друг с другом. Хорошее согласие показывает, что аналитически найденные времена дают адекватно качественные и разумные количественные характеристики процесса туннелирования электрона через квантовую ГС. Как аналитические, так и модельные расчеты показывают важность учета явления  $\Gamma$ - $X$ -перемешивания. Этот эффект увеличивает прозрачность ГС, также увеличивает (в целом) время туннелирования волны через ГС.

### Заключение

В данной работе рассмотрены вопросы резонансного туннелирования электронов в квантовых ГС на основе GaAs и AlAs в рамках двухзонной модели эффективной массы. Рассмотрено влияние Г–Х-перемешивания, которое увеличивает прозрачность ГС и приводит к появлению новых пиков и нулей коэффициента прохождения, связанных с Х-резонансными состояниями в ГС.

Из анализа фаз прошедшей и отраженной волн получены аналитические выражения для времен туннелирования и отражения. Показано, что для рассмотренных нами симметричных ГС оба времени совпадают. Решена задача распада резонансных состояний, которые существуют на квазилокализованных уровнях ГС. Получено, что пики времен туннелирования соответствуют резонансам системы, вследствие учета Г–Х-перемешивания появляются пики времени, соответствующие Х-пикам коэффициента прохождения. Чем уже пик коэффициента прохождения, тем больше время туннелирования через ГС.

При численном решении нестационарного уравнения Шредингера промоделирован процесс туннелирования волнового пакета через двухбарьерную ГС с учетом Г–Х-перемешивания. Из моделирования следует, что Г–Х-перемешивание увеличивает время туннелирования через ГС, а также существенно замедляет процесс разрядки.

Из сравнения временных характеристик туннелирования, полученных аналитически и моделированием, видно, что имеется хорошее согласие их друг с другом.

Данная работа, использующая модельные представления, не может дать точных рекомендаций при разработке приборов на основе ГС, но из работы явствует, что следует учитывать влияние Г–Х-перемешивания на временные (частотные) характеристики ГС. Полученные результаты приводят к выводу, что для улучшения временных (частотных) свойств резонансного туннелирования следует так подбирать размеры квантовой ямы и барьеров, чтобы избежать появления Х-резонансов вблизи того Г-резонанса, который обеспечивает главный вклад в ток через ГС.

### Приложение I

#### Однобарьерная структура

Матрица переноса  $M_1$  имеет вид  $M_1 = \begin{bmatrix} \alpha_{ij}^1 & \gamma_{ij}^1 \\ \delta_{ij}^1 & \beta_{ij}^1 \end{bmatrix}$ ,  $\alpha_{ij}^1$ ,  $\beta_{ij}^1$ ,  $\gamma_{ij}^1$ ,  $\delta_{ij}^1$  —  $2 \times 2$  матрицы.

$$\alpha_{11}^1 = (\alpha_{22}^2)^* = \exp(ik_A a) \left\{ \frac{GcGt}{Gc - Gt} - (-1)^n \frac{g_\Gamma g_X}{Xc - Xt} \right\},$$

$$\begin{aligned} \alpha_{12}^1 &= (\alpha_{21}^2)^* = \exp(-ik_A(z_1 + z_2)) \\ &\times \left\{ \frac{\gamma_\Gamma^{-2} - 1}{Gc - Gt} - (-1)^n \frac{g_\Gamma g_X}{Xc - Xt} \right\}, \\ \beta_{11}^1 &= \exp(-\sigma a) \left\{ \frac{XcXt}{Xc - Xt} - (-1)^n \frac{g_\Gamma g_X}{Gc - Gt} \right\}, \\ \beta_{22}^1(a) &= \beta_{11}^1(-a), \\ \beta_{12}^1 &= \beta_{21}^1 \exp(2\sigma(z_1 + z_2)) \\ &= \frac{1}{2} \exp(\sigma(z_1 + z_2)) \left\{ -\frac{1 - \gamma_X^{-2}}{Xc - Xt} - (-1)^n \frac{g_\Gamma g_X}{Gc - Gt} \right\}, \\ \gamma_{11}^1 &= (\gamma_{21}^1)^* = -\exp(-\sigma z_2) \exp(-ik_A z_1) \frac{g_\Gamma}{2} \\ &\times \left\{ (-1)^n \frac{Gc + Gt}{Gc - Gt} - \frac{Xc + Xt}{Xc - Xt} \right\}, \\ \gamma_{12}^1 &= (\gamma_{22}^1)^* = -\exp(\sigma z_2) \exp(-ik_A z_1) \frac{g_\Gamma}{2} \\ &\times \left\{ (-1)^n \frac{Gc + Gt}{Gc - Gt} - \frac{\bar{X}c + \bar{X}t}{Xc - Xt} \right\}, \\ \delta_{11}^1 &= (\delta_{12}^1)^* = \exp(-\sigma z_1) \exp(ik_A z_2) \frac{g_X}{2} \\ &\times \left\{ \frac{Gc + Gt}{Gc - Gt} - (-1)^n \frac{Xc + Xt}{Xc - Xt} \right\}, \\ \delta_{21}^1 &= (\delta_{22}^1)^* = -\exp(-\sigma z_1) \exp(ik_A z_2) \frac{g_X}{2} \\ &\times \left\{ (-1)^n \frac{Gc + Gt}{Gc - Gt} - \frac{\bar{X}c + \bar{X}t}{Xc - Xt} \right\}, \end{aligned}$$

где приняты обозначения  $a = z_2 - z_1$  — толщина барьера,

$$\begin{aligned} \gamma_\Gamma &= -\frac{k_A m_B^\Gamma}{k_B m_A^\Gamma}, & \gamma_X &= i \frac{\sigma}{q}, \\ g_\Gamma &= \frac{t}{a_0 m_0} \frac{m_A^\Gamma}{ik_A}, & g_X &= -\frac{t}{a_0 m_0} \frac{m_X}{\sigma}, \end{aligned}$$

$$Gc = 1 + i\beta_\Gamma \operatorname{cth} \varphi, \quad Gt = 1 + i\beta_\Gamma \operatorname{th} \varphi, \quad Xc = 1 + \frac{q}{\sigma} \operatorname{ctg} \phi,$$

$$Xt = 1 - \frac{q}{\sigma} \operatorname{tg} \phi, \quad \bar{X}c = 2 - Xc, \quad \bar{X}t = 2 - Xt,$$

$$\beta_\Gamma = -i\gamma_\Gamma^{-1} = \frac{k_B m_A^\Gamma}{k_A m_B^\Gamma}, \quad \varphi = k_B a / 2, \quad \phi = q a / 2,$$

где  $k_A = \sqrt{\frac{2m_A^\Gamma E}{\hbar^2}}$ ,  $k_B = \sqrt{\frac{2m_B^\Gamma (E - E_B^\Gamma)}{\hbar^2}}$ ,  $q = \sqrt{\frac{2m_B^\Gamma (E - E_B^\Gamma)}{\hbar^2}}$ ,  $i\sigma = \sqrt{\frac{2m_A^\Gamma (E - E_A^\Gamma)}{\hbar^2}}$  — волновые числа Г-волны в GaAs, Г-волны в AlAs, Х-волны в AlAs, Х-волны в GaAs соответственно.

Функции  $f_2$  и  $f_3$  записываются следующим образом:

$$f_2 = \frac{XcXt}{Xc - Xt} \operatorname{ch} 2\varphi + \frac{|g_\Gamma|g_x}{2\beta_\Gamma} \frac{Xc + Xt}{Xc - Xt} \operatorname{sh} 2\varphi,$$

$$f_3 = \frac{1 - \beta_\Gamma^2}{2\beta_\Gamma} \frac{XcXt}{Xc - Xt} \operatorname{sh} 2\varphi - \frac{|g_\Gamma|g_x}{2}$$

$$\times \left[ \frac{Xc + Xt}{Xc - Xt} \operatorname{ch} 2\varphi - (-1)^n + \frac{|g_\Gamma|g_x}{\beta_\Gamma(Xc - Xt)} \operatorname{sh} 2\varphi \right].$$

## Приложение II

### Двухбарьерная структура

Матрица переноса через двухбарьерную структуру  $M = M_1 M_2$ .

Коэффициенты матрицы  $M$ , необходимые для вычисления коэффициента прохождения и временных характеристик:

$$\alpha_{11} = \alpha_{11}^1 \alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^1 \alpha_{21}^2 + \gamma_{11}^1 \delta_{11}^2 + \gamma_{12}^1 \delta_{21}^2,$$

$$\alpha_{21} = \alpha_{21}^1 \alpha_{11}^2 + \alpha_{22}^1 \alpha_{21}^2 + \gamma_{21}^1 \delta_{11}^2 + \gamma_{22}^1 \delta_{21}^2,$$

$$\gamma_{11} = \alpha_{11}^1 \gamma_{11}^2 + \alpha_{12}^1 \gamma_{21}^2 + \gamma_{11}^1 \beta_{11}^2 + \gamma_{12}^1 \beta_{21}^2,$$

$$\gamma_{21} = \alpha_{21}^1 \gamma_{11}^2 + \alpha_{22}^1 \gamma_{21}^2 + \gamma_{21}^1 \beta_{11}^2 + \gamma_{22}^1 \beta_{21}^2,$$

$$\delta_{11} = \delta_{11}^1 \alpha_{11}^2 + \delta_{12}^1 \alpha_{21}^2 + \beta_{11}^1 \delta_{11}^2 + \beta_{12}^1 \delta_{21}^2,$$

$$\beta_{11} = \delta_{11}^1 \gamma_{11}^2 + \delta_{12}^1 \gamma_{21}^2 + \beta_{11}^1 \beta_{11}^2 + \beta_{12}^1 \beta_{21}^2.$$

Функции  $P_1, P_2, P_3$  получены следующим образом:

$$P_1 = \beta_{11}, \quad P_2 = \operatorname{Re}(\alpha_{11}\beta_{11} - \gamma_{11}\delta_{11}),$$

$$P_3 = \operatorname{Im}(\alpha_{11}\beta_{11} - \gamma_{11}\delta_{11}).$$

### Список литературы

- [1] E.H. Hauge, J.A. Stavney. Rev. Mod. Mod. Phys., **61**, 917 (1989).
- [2] V.S. Olkhovsky, E. Rcoami. Phys. Reports, **214**, 339 (1992).
- [3] R. Landauer, Th. Martin. Rev. Mod. Phys., **66**, 217 (1994).
- [4] T.E. Hartman. J. Appl. Phys., **33**, 3427 (1962).
- [5] K.W.H. Stevens. J. Phys. C, **16**, 3649 (1983).
- [6] D. Collins, D. Lowe, J.R. Barker. J. Phys. C, **20**, 6213 (1987).
- [7] Н.А. Чуприков. ФТП, **27**, 799 (1993).
- [8] J.G. Muga, H. Cruz. Physica B, **179**, 326 (1992).
- [9] В.Д. Дымников, О.В. Константинов. ФТП, **28**, 844 (1994).
- [10] T. Ando, S.W. Kahora, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11 609 (1989).
- [11] T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11 618 (1989).
- [12] Г.Ф. Караваев, С.Н. Криняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, **35**, № 9, 64 (1992).
- [13] С.Н. Гриняев, Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **28**, 1393 (1993).
- [14] D.Z-Y. Ting, T.C. McGill. J. Vac. Sci. Technol. (b), **7**, № 4, 1031 (1989).
- [15] D.Z-Y. Ting, T.C. McGill. J. Vac. Sci. Technol. (b), **10**, № 4, 1980 (1992).

- [16] Z. Yumin, Z. Hazhi. Appl. Phys. Lett., **65**, 1036 (1994).
- [17] T. Ando, H. Akera. Proc. 19th Int. Conf. on the Physics of Semicond., ed. by W. Zawadzki (Institute of Physics, Polish Academy of Sciences. Warszawa, 1988) p. 603.
- [18] J.-B. Xia. Phys. Rev. B, **41**, 3117 (1990).
- [19] E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev, Y.Fu, M.W. Willander. Phys. Rev. B, **50**, 7747 (1994).
- [20] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышев, А.А. Воронков. Изв. вузов. Физика, **40**, № 1, 63 (1997).
- [21] E.P. Wigner. Phys. Rev., **98**, 145 (1995).
- [22] M.L. Goldberg, K. Watson. Collision Theory (J. Wiley, N.-Y.-London-Sydney, 1964) ch. 3.
- [23] Д. Поттер. Вычислительные методы в физике (М., Мир, 1975).

Редактор В.В. Чалдышев

### Dynamics of a resonant tunneling in two-valley spectrum heterostructures

G.F. Karavaev, A.A. Voronkov

Siberian Physicotechnical Institute,  
634050 Tomsk, Russia