

Эффекты пространственной повторяемости при интерференции электронных волн в полупроводниковых двумерных наноструктурах с параболическими квантовыми ямами

© В.А. Петров[¶], А.В. Никитин

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
101999 Москва, Россия

(Получена 8 апреля 2004 г. Принята к печати 28 июня 2004 г.)

Теоретически исследованы эффекты пространственной неоднородности для плотности потока вероятности $j_x(x, z)$ (или плотности квантово-механического тока $e j_x(x, z)$, e — заряд электрона), возникающие в полупроводниковых двумерных наноструктурах, представляющих собой последовательно расположенные в направлении распространения электронной волны (ось x) узкую прямоугольную и широкую параболическую вдоль оси размерного квантования z квантовые ямы. Неоднородное распределение $j_x(x, z)$ возникает из-за интерференции электронных волн, распространяющихся в широкой квантовой яме одновременно по разным квантово-размерным подзонам. Особое внимание уделено эффектам пространственного повторения электронных волн в таких наноструктурах. Показано, что поперечное распределение $j_x(0, z)$, существующее на входе широкой квантовой ямы, с определенной точностью воспроизводится на расстоянии X_1 от входа и периодически повторяется в сечениях $X_p = pX_1$ (p — целые числа). Приведены результаты численных расчетов этих эффектов в симметричных по оси z структурах и их модификация в несимметричных наноструктурах.

1. Введение

В настоящее время успехи нанотехнологии позволяют создавать полупроводниковые наноструктуры, в которых линейные размеры одномерного (1D) или двумерного (2D) проводящего канала в направлении распространения электронной волны меньше длины свободного пробега электрона. В таком канале частицы движутся в баллистическом режиме, что позволяет экспериментально исследовать в таких структурах эффекты баллистического переноса, в частности, различные электронные интерференционные эффекты. Теоретические основы таких эффектов, а также анализ основных экспериментальных результатов в этой области приведены в ряде монографий [1–3]. Вместе с тем большинство теоретических результатов в данной области представлены оригинальными работами, в которых эти эффекты исследованы для различных типов наноструктур. В частности, большое число теоретических работ посвящено исследованию баллистического переноса электронов в 1D и 2D наноструктурах, общей особенностью которых является наличие в квантовых каналах участков резкого (неадиабатического) изменения либо геометрии канала, либо потенциального рельефа в нем. Рассеяние электронных волн на таких участках неоднородности приводит к смешиванию электронных мод в канале и появлению электронных интерференционных эффектов. Квантовый транспорт в таких структурах был теоретически исследован в 1D каналах прямоугольного [4] и параболического [5] профилей, соединяющих 2D электронные резервуары, а также в квантовых точечных контактах различного типа, соединяющих такие резервуары [6], \perp -образных каналах [7,8], каналах с резкими

изломами и каналах изогнутой формы [9–11], каналах с δ -образным рассеивающим центром внутри [12], скрещенных каналах [13], одиночных геометрически неоднородных каналах с участками разной ширины [14–17], геометрически однородных 1D и 2D наноструктурах с участками резкого изменения потенциального рельефа, управляемого поперечным постоянным электрическим полем [18]. Роль затухающих мод в квантовых точечных контактах была рассмотрена в [12,19,20].

Рассеяние на участке резкой неоднородности электронной волны, распространяющейся по одной (например, нижней) размерной подзоне, приводит к появлению в других подзонах отраженных и прошедших волн как с действительными (незатухающие волны), так и с мнимыми (затухающие волны) квазиимпульсами. При этом каждой подзоне соответствует своя волновая функция поперечного квантования. Можно показать, что при таком рассеянии составляющая плотности квантово-механического тока в направлении распространения волны (например, $e j_x$, где e — заряд электрона, j_x — плотность потока вероятности), получающаяся в результате суммирования по всем размерным подзонам, имеет координатную зависимость от продольной координаты x и одной (в 2D структурах) или двух (в 1D структурах) поперечных координат. Напомним, что j_x для свободной частицы не имеет координатной зависимости [21]. В теоретических работах, посвященных эффектам баллистического переноса электронов в каналах с резкими неоднородностями, исследуются, как правило, зависимости квантово-механического коэффициента прохождения структуры T от энергии распространяющейся частицы, геометрии и параметров структуры, внешних полей. При необходимости вычисляется кондактанс структуры G [22] и его температурная зависимость. Подчеркнем, что при нахождении этих величин необходимо вы-

[¶] E-mail: vpetrov@mail.cplire.ru

числение полного тока частиц в квантовом канале, что достигается интегрированием зависящей от координат плотности квантово-механического тока по поперечному сечению канала. Далее мы покажем, что в результате такой процедуры пространственно-неоднородные эффекты для плотности квантово-механического тока исчезают.

Основная цель нашей работы — теоретическое исследование эффектов пространственной неоднородности для плотности потока вероятности j_x (или плотности квантово-механического тока $e j_x$), возникающих в полупроводниковых 2D наноструктурах, представляющих собой последовательно расположенные в направлении распространения электронной волны (ось x) узкую прямоугольную и широкую параболическую по оси z квантовые ямы (КЯ) (ось z — ось размерного квантования). Мы покажем, что из-за интерференции электронных волн, распространяющихся в широкой КЯ одновременно по нескольким квантово-размерным подзонам возникает неоднородное распределение $j_x(x, z)$. Будет показано, что поперечное распределение $j_x(0, z)$, существующее на входе широкой КЯ, с определенной точностью воспроизводится на расстоянии X_1 от входа и периодически воспроизводится в сечениях $X_q = qX_1$ (q — целые числа). Мы покажем, что эффекты мультипликации, которые резко выражены в структурах с прямоугольными КЯ разной ширины, в структурах с ямами параболического профиля выражены значительно слабее. Мы приводим результаты численных расчетов таких эффектов в симметричных структурах и их модификации в несимметричных по оси z наноструктурах. Будет показано, в частности, что в несимметричных структурах возможно инверсное и немонотонное поведение вероятности обнаружения частицы в квантово-размерной подзоне в широкой КЯ от номера подзоны.

Необходимо отметить, что эффект пространственной повторяемости был ранее предсказан и частично экспериментально проиллюстрирован для электромагнитных волн в волноводах [23]. В этой работе на основе анализа простых фазовых соотношений между электромагнитными волнами, распространяющимися в волноводе с разными фазовыми скоростями, было показано, что для волноводов определенного типа, в частности, плоского или прямоугольного волновода ширины A , при некоторых условиях возможна ситуация, когда поступающий на вход волновода монохроматический волновой пучок с характерным поперечным размером $a \ll A$ (например, из узкого волновода) на определенном расстоянии от входа с определенной точностью повторяет структуру электромагнитного поля на входе. Физической причиной такого эффекта является выполнение определенных фазовых соотношений между волнами различных собственных мод, распространяющимися вдоль волновода. Однако очевидно, что простое объявление результатов, полученных для электромагнитных волн в волноводах, справедливыми в полной мере для электронных волн в полупроводниковых наноструктурах некорректно. Причины возможных отличий связаны с наличием у

электрона заряда и массы, существующие на практике ограничения на геометрические размеры наноструктур, накладываемые необходимостью одновременного выполнения условий размерного квантования и баллистического переноса частиц в наноструктуре, температурные ограничения в задачах электронного переноса, специфика рассеяния частиц в твердом теле и т.д. Таким образом, необходимо всестороннее исследование возможности существования и реализации в наноструктурах электронных аналогов существующих для электромагнитных волн волноводных эффектов.

Возможность существования эффекта повторяемости для электронной волны в потенциальном канале кратко обсуждалась в [24]. На возможность существования эффектов повторяемости и мультипликации для плотности потока вероятности j_x (или $e j_x$) в полупроводниковых наноструктурах было указано в [25]. В продолжение и развитие этой работы мы провели детальный численный анализ этих эффектов для полупроводниковых 2D наноструктур на основе последовательности узкой прямоугольной и широкой параболической квантовых ям с конкретными геометрическими параметрами на основе системы GaAs–GaAlAs. Насколько нам известно, такой анализ эффектов пространственного распределения $e j_x$ и возможных сопутствующих эффектов в полупроводниковых 1D и 2D наноструктурах ранее не проводился.

2. Модель и метод расчета

Изложим вначале модель и метод расчета. Рассмотрим симметричную (рис. 1, *a*) (или асимметричную, рис. 1, *b*) 2D наноструктуру, состоящую из двух последовательно расположенных вдоль оси x квантовых ям: КЯ₁(QW₁) с потенциалом $U_1(z)$ (область 1, $x < 0$) и КЯ₂(QW₂) (область 2, $x > 0$) с потенциалом $U_2(z)$, локализуящими частицу по оси z (нормаль к плоскостям ям). Будем считать также, что движение по оси y отделяется и является свободным, а потенциальная энергия в пределах каждой из областей не зависит от x , меняясь скачком в точке сочленения ям ($x = 0$). Эффективные массы частиц m^* будем считать изотропными и одинаковыми в обеих областях. Тогда уравнения Шредингера, описывающие движения частиц по оси z в каждой из областей, имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \chi_j(z)}{dz^2} + U_1(z) \chi_j(z) = E_j \chi_j(z), \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi_n(z)}{dz^2} + U_2(z) \varphi_n(z) = E_n \varphi_n(z). \quad (2)$$

Здесь E_j и E_n — собственные значения, а $\chi_j(z)$ и $\varphi_n(z)$ — собственные функции уравнений (1) и (2) соответственно в областях 1 и 2. Полная энергия частицы $E = E_{x,z} + E_y$, где $E_y = \hbar^2 k_y^2 / 2m^*$ — энергия, соответствующая свободному движению по оси y . Рассмотрим ситуацию, когда слева направо, из области 1 в область 2, по квантовой подзоне m в области 1

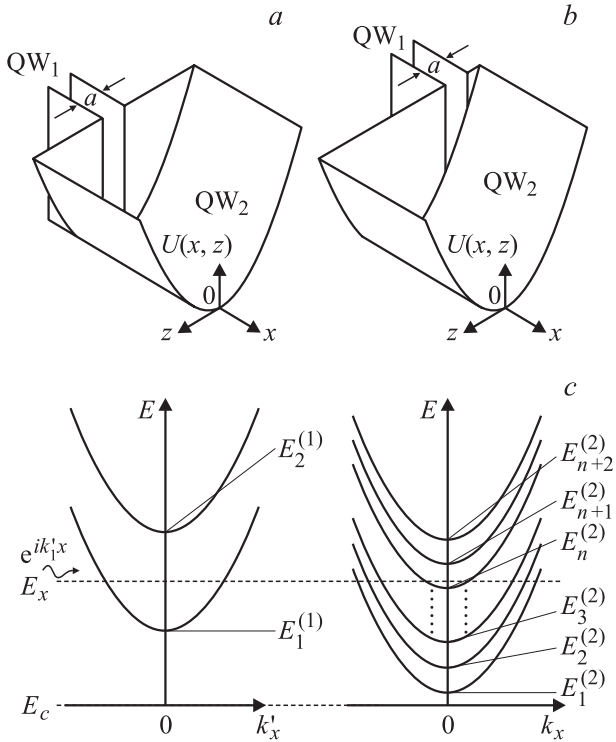


Рис. 1. Схематичное изображение симметричной (а) и несимметричной (б) 2D наноструктур на основе последовательности узкой прямоугольной (QW₁) и широкой параболической (QW₂) квантовых ям, а также энергетическая схема таких 2D наноструктур (с). $E_1^{(1)}$ и $E_2^{(1)}$ — донья первой и второй квантово-размерных подзон в КЯ₁, $E_1^{(2)}, E_2^{(2)} \dots E_n^{(2)}, E_{n+1}^{(2)}$ — донья подзон в КЯ₂, $E_m^{(1)}(k'_x)$ и $E_n^{(2)}(k_x)$ — законы дисперсии электронов для подзон в КЯ₁ и КЯ₂ соответственно, E_c — дно зоны проводимости в массивном полупроводнике, E_x — энергия инжектированного электрона с волновым вектором k'_x в КЯ₁.

распространяется монохроматическая электронная волна единичной амплитуды. Будем считать, что квантовые ямы, локализирующие частицу по оси z , имеют бесконечно высокие потенциальные барьеры, т.е. спектры энергий в обеих ямах в этом направлении полностью дискретны. Тогда волновые функции частицы $\phi^{(1)}(x, z)$ и $\phi^{(2)}(x, z)$ в каждой из областей по отдельности имеют вид

$$\phi^{(1)}(x, z) = \chi_m(z) \exp(ik'_m x) + \sum_j B_j \chi_j(z) \exp(-ik'_j x), \quad (3)$$

$$\phi^{(2)}(x, z) = \sum_n C_n \varphi_n(z) \exp(ik_n x). \quad (4)$$

Здесь B_j и C_n — постоянные коэффициенты, определяющие амплитуды отраженных в области 1 по подзонам E_j и прошедших в область 2 по подзонам E_n волн; k'_j и k_n — волновые числа, соответствующие движению частицы по оси x в этих областях: $k'_j = [2m^*(E - E_j - E_y)]^{1/2}/\hbar$; $k_n = [2m^*(E - E_n - E_y)]^{1/2}/\hbar$. Отражение и трансформация электронных волн в такой структуре происходит на скачке потенциала $U_0 = E_1^{(1)} - E_1^{(2)}$, где $E_1^{(1)}$ и $E_1^{(2)}$ —

донья нижних квантово-размерных подзон в КЯ₁ и КЯ₂. Отметим, что если $E - E_y > E_j$, E_n , то k'_j и k_n действительны и соответствующие им волны являются распространяющимися; при обратном неравенстве k'_j и k_n — мнимые и волны являются затухающими с характерными длинами затухания $l_j = |k'_j|^{-1}$ и $l_n = |k_n|^{-1}$. Для рассматриваемых нами структур со ступенчатым переходом между первой и второй областями коэффициенты B_j и C_n определяются из системы уравнений, следующей из граничных условий для волновых функций и их производных в точке $x = 0$:

$$\phi^{(1)}(x = 0, z) = \phi^{(2)}(x = 0, z),$$

$$\nabla_x \phi^{(1)}(x = 0, z) = \nabla_x \phi^{(2)}(x = 0, z),$$

$$\chi_m(z) + \sum_j B_j \chi_j(z) = \sum_n C_n \varphi_n(z), \quad (5)$$

$$k'_m \chi_m(z) - \sum_j k'_j B_j \chi_j(z) = \sum_n k_n C_n \varphi_n(z). \quad (6)$$

Умножая слева уравнение (5) на $\varphi_p^*(z)$, а (6) на $\chi_p^*(z)$ и интегрируя полученные выражения по z , получим систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов B_j и C_n :

$$t_{p,m} + \sum_j B_j t_{p,j} = C_p, \quad (7)$$

$$k'_m \delta_{pm} - k'_p B_p = \sum_n k_n C_n f_{p,n}. \quad (8)$$

Здесь $t_{p,m} = \int \varphi_p^*(z) \chi_m(z) dz$ и $f_{p,n} = \int \chi_p^*(z) \varphi_n(z) dz$ — коэффициенты неортогональности собственных функций в областях 1 и 2, причем $f_{p,m} = t_{m,p}^*$. Для симметричных по оси z структур, когда локализирующие частицу потенциалы $U_1(z)$ и $U_2(z)$ в областях 1 и 2 удовлетворяют условиям $U_1(z) = U_1(-z)$ и $U_2(z) = U_2(-z)$ (точка $z = 0$ находится на оси симметрии структуры), собственные функции $\chi_i(z)$ и $\varphi_n(z)$ в областях 1 и 2 можно классифицировать по четности. В этом случае коэффициенты неортогональности равны нулю для функций разной четности. При этом система (7), (8) разбивается на две независимые подсистемы: систему неоднородных линейных уравнений, содержащую только коэффициенты B_j и C_n с индексами той же четности, что и номер подзоны m , по которой волна из области 1 распространяется в область 2, и подсистему однородных линейных уравнений для коэффициентов B_j и C_n с индексами противоположной m четности. Нетрудно показать, что определитель второй системы всегда отличен от нуля, что обеспечивает равенство нулю всех коэффициентов B_j и C_n с индексами j и n , имеющими четность, противоположную m .

В дальнейшем нас будет интересовать координатная зависимость $j_x(x, z)$ — плотности потока вероятности по оси x в области 2 (или $e j_x(x, z)$ — компоненты

плотности квантово-механического тока вдоль оси x), которая, как известно, задается выражением [21]

$$j_x(x, z) = \frac{\hbar}{2m^*} \left\{ \phi^{(2)}(x, z) \nabla_x [\phi^{(2)}(x, z)]^* - [\phi^{(2)}(x, z)]^* \nabla_x \phi^{(2)}(x, z) \right\}. \quad (9)$$

Подставляя волновую функцию частицы в области 2 (4) в (9), получим

$$j_x(x, z) = \frac{\hbar}{2m^*} \sum_{n,t} C_n C_t^* \varphi_n(z) \varphi_t^*(z) \times (k_n + k_t^*) \exp[i(k_n - k_t^*)x]. \quad (10)$$

Для дальнейшего анализа удобно разбить (10) на сумму трех членов $j_x = j_{x1} + j_{x2} + j_{x3}$, где выделены суммы по различным комбинациям действительных и мнимых волновых векторов k . В рассматриваемой нами модели КЯ с бесконечно высокими потенциальными барьерами при заданной энергии падающего электрона E в области 2 существует конечное число N нижних подзон с действительными k , а все вышележащие подзоны имеют мнимые волновые векторы. Выделим первое слагаемое j_{x1} в (10), учитывая в нем суммирование только по N подзонам с действительными k и предполагая комплексность как C_n , так и $\varphi_n(z)$:

$$j_{x1}(x, z) = \frac{\hbar}{m^*} \sum_{n=1, n \neq t}^N |C_n|^2 |\varphi_n(z)|^2 k_n + \frac{\hbar}{2m^*} \sum_{n,t=1; n \neq t}^N C_n C_t^* \varphi_n(z) \varphi_t^*(z) (k_n + k_t) \exp[i(k_n - k_t)x]. \quad (11)$$

Если в системе уравнений для определения коэффициентов C_n (7), (8) ограничиться только уравнениями с действительными k , то все C_n будут действительными. При включении в расчет подзон с мнимыми k коэффициенты C_n становятся комплексными. Далее при анализе других слагаемых в (10) учтем, что в рассматриваемой нами задаче $\varphi_n(z)$ действительны. Представим чисто мнимые k в виде $k_j = i \operatorname{Im}(k_j)$, а комплексные коэффициенты C_j в виде $C_j = C_{j1} + i C_{j2}$, где $C_{j1} = \operatorname{Re}(C_j)$, $C_{j2} = \operatorname{Im}(C_j)$. Здесь $\operatorname{Re}(C_j)$, $\operatorname{Im}(C_j)$ и $\operatorname{Im}(k_j)$ — реальная часть C_j и мнимые части C_j и k_j соответственно. Тогда выражение для j_{x2} , в котором суммирование ведется по индексам, соответствующим действительным и мнимым k (перекрестные члены), имеет вид

$$j_{x2}(x, z) = \frac{\hbar}{m^*} \sum_{t=1}^N \sum_{n=N+1}^{\infty} \varphi_n(z) \varphi_t^*(z) \left\{ [(C_{n1} C_{t1} + C_{n2} C_{t2}) k_t + (C_{n1} C_{t2} - C_{n2} C_{t1}) \operatorname{Im}(k_n)] \cos(k_t x) + [(C_{n1} C_{t1} + C_{n2} C_{t2}) \operatorname{Im}(k_n) - (C_{n1} C_{t2} - C_{n2} C_{t1}) k_t] \times \sin(k_t x) \right\} \exp[-\operatorname{Im}(k_n)x]. \quad (12)$$

Выражение для j_{x3} , в котором суммирование ведется по индексам, соответствующим только мнимым k_j , имеет вид

$$j_{x3}(x, z) = \frac{\hbar}{m^*} \sum_{n,t=N+1; n \neq t}^{\infty} \varphi_n(z) \varphi_t(z) [\operatorname{Im}(k_n) - \operatorname{Im}(k_t)] \times (C_{n1} C_{t2} - C_{n2} C_{t1}) \exp\{-[\operatorname{Im}(k_n) + \operatorname{Im}(k_t)]x\}. \quad (13)$$

В (13) отсутствуют члены с $n = t$, которые равны нулю. Из (11)–(13) следует, что координатную зависимость от x в выражении для $j_x(x, z)$ имеют все члены, содержащие произведения функций $\varphi_n(z) \varphi_t(z)$ с $n \neq t$, т.е. второй член в (11) и суммы (12), (13). Отметим принципиально различное поведение j_{x1} , содержащего члены с действительными k , и слагаемых j_{x2} и j_{x3} , содержащих члены с мнимыми k , при увеличении x . Как следует из (11)–(13), j_{x2} и j_{x3} экспоненциально затухают при $x \rightarrow \infty$, тогда как j_{x1} осциллирует в этой области изменения x . При этом полный поток плотности вероятности вдоль оси x $J_x = \int j_x(x, z) dz$ (а значит, и полный квантово-механический ток) вследствие ортонормированности функций $\{\varphi_n(z)\}$ не имеет координатной зависимости от x , так как в (10) остаются только члены с $n = t$. При этом члены, соответствующие подзонам с $E_{n,t} > E$ и мнимыми $k_{n,t}$, равны нулю и J_x определяется выражением

$$J_x = \frac{e\hbar}{m^*} \sum_n |C_n|^2 k_n. \quad (14)$$

В (14) суммирование проводится только по подзонам с $E_n < E$, т.е. по всем подзонам в области 2 с действительными k_n , по которым происходит незатухающее распространение электронных волн. Отметим, что кондактанс структуры G также не зависит от x . Из выражений (11)–(13) следует, что координатная зависимость $j_x(x, z)$ возникает из-за интерференционных членов с $n \neq t$ в выражении (10). Очевидно, что для возникновения такой зависимости необходимо, как минимум, наличие двух подзон с незатухающим распространением электронных волн в области 2. Таким образом, выражение (10) совместно с найденными из решения уравнений (1), (2) собственными функциями $\chi_i(z)$ и $\varphi_n(z)$, а также определенными из решения системы (7), (8) коэффициентами B_j и C_n дает полное решение задачи о распределении плотности потока вероятности $j_x(x, z)$ (или квантово-механической плотности тока) в области 2.

Исследуем подробнее координатную зависимость $j_{x1}(x, z)$ в (11), не содержащую затухающих членов с мнимыми k . Легко видеть, что если все разности $(k_n - k_t)$ в показателе экспоненты второго члена в сумме (11) могут быть представлены одновременно для всех n и t в виде

$$(k_n - k_t) = p_{n,t} \Delta, \quad (15)$$

где $p_{n,t}$ — целое число, то $j_{x1}(X_1, z) = j_{x1}(x = 0, z)$ для поперечного сечения при $X_1 = 2\pi/|\Delta|$. В этом

идеальном случае поперечный профиль $j_{x1}(x=0, z)$ по оси z , существующий на входе области 2 в точке $x=0$, будет точно воспроизводиться в сечениях $X_p = pX_1$ ($p=1, 2, \dots$). Очевидно, что это условие в общем случае точно не выполняется из-за корневых зависимостей k_n и k_t от E_n и E_t . Однако такая ситуация может быть приближенно реализована в случае, когда в области 2 кинетическая энергия частицы вдоль оси x существенно больше энергий доньев квантово-размерных подзон, по которым происходит незатухающее распространение электронных волн в этой области, т.е. $E_x \gg E_{n,t}$. Действительно, раскладывая в ряд $k_{n,t}$ по малому параметру $E_{n,t}/E_x \ll 1$ и ограничиваясь вторым членом разложения, имеем

$$(k_n - k_t) \approx (m^*/2E_x)^{1/2}(E_t - E_n)/\hbar. \quad (16)$$

В этом случае для ряда наноструктур определенного типа, когда разности $(E_t - E_n)$ пропорциональны целым числам, т.е. $(k_n - k_t)$ может быть представлена в виде (15), в сделанных приближениях возможны эффекты повторения для j_{x1} .

Все такие 2D наноструктуры имеют общую особенность. Они представляют собой последовательно расположенные вдоль оси x две КЯ существенно разной эффективной ширины. В дальнейшем мы рассмотрим ситуацию, когда из узкой прямоугольной КЯ₁ (область 1) в широкую КЯ₂ параболического профиля (область 2) распространяется монохроматическая электронная волна, у которой $E_y = 0$, т.е. полная кинетическая энергия частицы $E = E_x$. Интересующие нас эффекты интерференции происходят в широкой КЯ₂. В настоящей работе мы рассмотрим две наноструктуры на основе последовательности таких двух КЯ: симметричную (рис. 1, а) и несимметричную (рис. 1, б) наноструктуры. На рис. 1, с приведены энергетические диаграммы этих структур.

В настоящее время параболические квантовые ямы в 2D наноструктурах экспериментально реализованы и в них исследуются различные физические эффекты. В приближении бесконечно высоких потенциальных стенок собственными функциями частицы в параболической КЯ₂ являются функции гармонического осциллятора, а квантованная по оси z часть электронного спектра частицы с потенциалом $U_2(z) = m^*\omega_0^2 z^2/2$ в уравнении (2) имеет вид: $E_n = \hbar\omega_0(n + 1/2)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Частота $\omega_0 = (K/m^*)^{1/2}$ определяется кривизной параболы K , зависящей от параметров наноструктуры. В этом случае в (16) разность $E_t - E_n = \hbar\omega_0(t - n)$, где $(t - n)$ — всегда целое число, и профиль начального распределения $j_{x1}(0, z)$ на входе параболической ямы повторяется в ней на оси x в точках $X_p = pX_1$, где X_1 задается выражением

$$X_1 = (4\pi/\omega_0)[(E - E_y)/2m^*]^{1/2}. \quad (17)$$

Для симметричной по оси z наноструктуры, когда собственные функции в областях 1 и 2 можно классифицировать по четности, при падении частицы из КЯ₁ по-

подзонам с нечетными m (четные решения) в уравнениях (7), (8) отличны от нуля только коэффициенты $C_{n,t}$ при нечетных t и n . Для четных m (нечетные решения) отличны от нуля только $C_{n,t}$ для нечетных t и n . Поэтому в симметричной структуре синфазные сечения следуют в 2 раза чаще, чем в несимметричной:

$$X_1 = (2\pi/\omega_0)[(E - E_y)/2m^*]^{1/2}. \quad (18)$$

Таким образом, в сделанных приближениях распределение незатухающей части плотности потока вероятности $j_{x1}(0, z)$ (или плотности квантово-механического тока) на входе параболической КЯ₂ будет воспроизводиться в синфазных сечениях в точках pX_1 . В пренебрежении затухающими членами j_{x2} (12) и j_{x3} (13) полная плотность потока $j_x \approx j_{x1}$ и начальное распределение $j(0, z)$ будет далее воспроизводиться в этих же сечениях.

3. Результаты расчета и обсуждение

В этом разделе мы приводим результаты численного расчета эффектов пространственного повторения для $j_x(x, z)$ в 2D наноструктуре с конкретными параметрами. Мы рассмотрели задачу о рассеянии монохроматической электронной волны, распространяющейся из узкой прямоугольной КЯ₁ (ширина $a = 50\text{Å}$) по нижней квантово-размерной подзоне ($m = 1$), на ступенчатом переходе «узкая КЯ₁» — «широкая КЯ₂» параболического профиля для двух 2D наноструктур с параметрами GaAs ($m^* = 0.067m_0$, m_0 — масса свободного электрона) — симметричной по оси z (рис. 1, а) и несимметричной, когда ось симметрии узкой КЯ₁ смещена относительно оси симметрии широкой КЯ₂ на 34.8 нм.

Расчет сделан в модели КЯ с бесконечно высокими стенками. В обоих случаях энергия частицы, отсчитанная от дна зоны проводимости E_c в массивном полупроводнике, составляла 270 мэВ, что соответствовало кинетической энергии частицы в КЯ₁ для первой подзоны $E_{x1}^{(1)} = 45.5$ мэВ при $E_{y1}^{(1)} = 0$ (энергия доньев двух нижних подзон в КЯ₂ $E_1^{(1)} = 224.5$ мэВ и $E_2^{(1)} = 898.0$ мэВ). Так как движение по оси y в рассматриваемых структурах отделяется, то в КЯ₂ $E_{y,n}^{(2)} = 0$. Расстояния между доньями квантово-размерных подзон в параболической КЯ₂ в силу эквидистантности спектра были одинаковыми и принимались при расчете равными 21 мэВ. При этом кинетическая энергия частицы в КЯ₂ для первой подзоны $E_{x1}^{(2)} = 259.5$ мэВ и уменьшалась с ростом номера подзоны. Для структур с такими параметрами в узкой КЯ₁ в рамках рассмотренной модели существует только одна нижняя подзона с действительными k , тогда как в КЯ₂ при выбранной энергии частицы незатухающее распространение электронных волн возможно по 13 подзонам с действительными k_{xn} . На рис. 1, с приведены энергетические диаграммы для узкой и широкой КЯ, которые одинаковы для симметричной и асимметричной наноструктур. Здесь и далее вся необходимая информация содержится в подписях к рисункам.

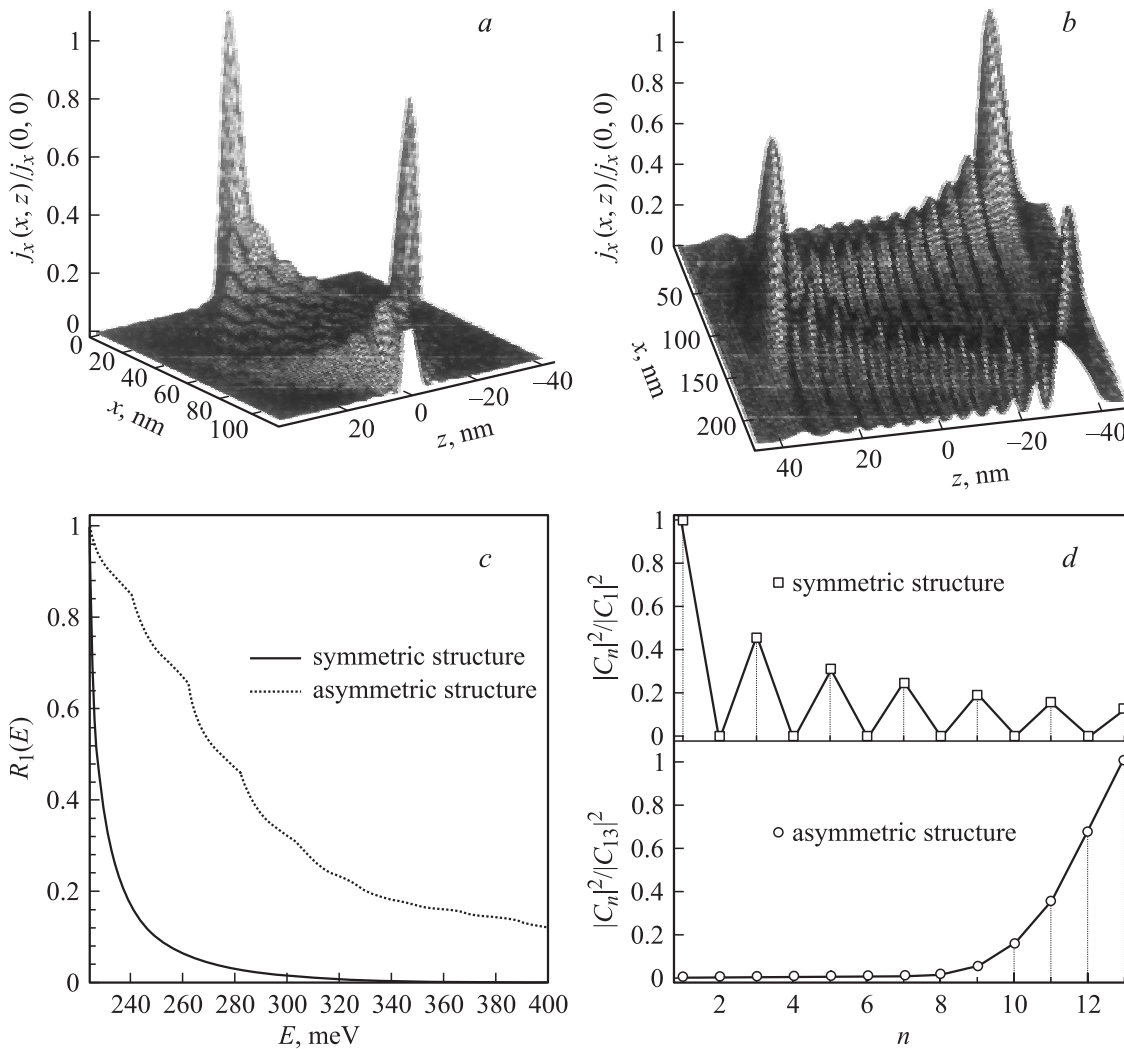


Рис. 2. Пространственное распределение нормированной плотности потока вероятности $j_x(x, z)/j_x(0, 0)$ в параболической КЯ₂ для симметричной 2D наноструктуры с параметрами GaAs, демонстрирующее в приближении действительных и разложенных k_x эффект повторения в сечении при $x = X_1$ (a) и модификацию этого эффекта в несимметричной 2D наноструктуре (b). c — зависимости коэффициентов отражения от энергии $R_1(E)$ частицы, падающей и отражающейся по нижнему квантово-размерному уровню в КЯ₁ для симметричной и несимметричной структур в интервале энергий $E_1^{(1)} < E < E_2^{(1)}$. d — зависимости отношений $|C_n|^2/|C_1|^2$ для симметричной и $|C_n|^2/|C_{13}|^2$ для несимметричной 2D наноструктур от номера подзоны n в параболической КЯ₂. Величины $|C_n|^2$ определяют степени заселенности подзон в КЯ₂. $a = 50 \text{ \AA}$ (КЯ₁), расстояние между доньями подзон в параболической КЯ₂ $\hbar\omega_0 = 21 \text{ мэВ}$.

В результате решения системы уравнений (7), (8), включающей одну подзону с действительными k'_{xj} и 20 подзон с мнимыми квазимпульсами в КЯ₁, а также 13 подзон с действительными (индексация подзон в параболической яме начинается с $n = 0$) и 8 подзон с мнимыми k_{xn} в КЯ₂, мы получили коэффициенты B_j и C_n для симметричной и несимметричной 2D наноструктур. Ограничение таким числом уравнений в системе (7), (8) было связано с тем, что дальнейшее увеличение числа уравнений практически не влияло на величины коэффициентов.

В этом приближении мы рассчитали пространственное распределение плотности потока вероятности $j_x(x, z)$ в параболической КЯ₂ в приближении разложен-

ных и действительных k_x для обеих структур. На рис. 2 приведены пространственные распределения нормированной плотности потока вероятности $j_x(x, z)/j_x(0, 0)$ в широкой КЯ₂ в плоскости $x-z$ для симметричной 2D наноструктуры, демонстрирующие в этих приближениях эффект повторения в сечении при $x = X_1$ (рис. 2, a) и его модификацию в несимметричной структуре (рис. 2, b). На рис. 2, c приведены зависимости коэффициентов отражения $R_1(E)$ от энергии частицы, падающей и отражающейся по нижнему квантово-размерному уровню в узкой КЯ₁, для симметричной и несимметричной структур в интервале энергий $E_1^{(1)} < E < E_2^{(1)}$. Энергия на рис. 2, c отсчитывается от дна зоны проводимости E_c в массивном полупроводнике. Расчет показывает, что

коэффициенты отражения для симметричной и несимметричной структур в интересующем нас диапазоне кинетической энергии частицы малы, $R_1(E) \leq 0.1$. (Это позволяет в принципе, пренебрегая в уравнениях (7), (8) слагаемыми, содержащими коэффициенты отражения, получить все основные особенности координатной зависимости $j_x(x, z)$, существенно упростив вычисления). Мы исследовали также зависимости вероятностей $|C_n|^2$ обнаружения частицы в подзоне n в широкой КЯ₂ от номера подзоны для симметричной и несимметричной наноструктур. Приведенные на рис. 2, *d* зависимости нормированной вероятности $|C_n|^2/|C_1|^2$ для симметричной и $|C_n|^2/|C_{13}|^2$ для несимметричной 2D структур от номера подзоны n в параболической КЯ₂ различны для этих случаев. В симметричной структуре отличные от нуля $|C_n|^2$ монотонно уменьшаются с ростом номера подзоны, что обусловлено уменьшением при увеличении номера n отличных от нуля интегралов перекрытий между зависящей от z поперечной волновой функцией частицы в нижней подзоне узкой КЯ₁ и собственными функциями подзон в широкой КЯ₂. Напомним, что в симметричной структуре при рассматриваемом нами падении волны по первой подзоне из узкой КЯ₁ (четная поперечная волновая функция) коэффициенты C_n для подзон с другой четностью в широкой КЯ₂ равны нулю. Однако для несимметричной структуры ситуация другая: наблюдается инверсное поведение вероятностей обнаружения частицы в подзоне n в широкой КЯ₂ — увеличение $|C_n|^2$ с ростом номера подзоны. Этот эффект в несимметричной структуре обусловлен резким уменьшением интегралов перекрытий между волновой функцией нижней подзоны в КЯ₁ и собственными функциями низших подзон в КЯ₂.

Мы построили также двумерные топограммы зависимостей $j_x(x, z)/j_x(0, 0) = \text{const}$ в плоскости $x-z$ для ряда сечений в интервале (0–1) для рассмотренных наноструктур. На рис. 3, *a* приведена топограмма, рассчитанная в приближении разложенных и действительных k_x для симметричной по оси z наноструктуры, показывающая эффекты повторения для электронных волн в различных сечениях. На рис. 3, *b* приведена топограмма для несимметричной 2D структуры в этих же приближениях, свидетельствующая о существенной модификации эффектов. Как видно из рис. 2, *b* и 3, *b*, в несимметричной структуре исходный профиль $j_x(0, z)$ повторяется в синфазных сечениях X_q , в 2 раза больших, чем для симметричной структуры, как и следует из формулы (17). Наряду с этим в несимметричной структуре возникают также пики $j_x(x, z)$ такой же амплитуды, как и на входе широкой КЯ₂, но расположенные в сечениях $X_q/2$ асимметрично точке входа электронной волны.

Очевидно, что рассмотренные эффекты пространственной неоднородности $j_x(x, z)$, возникающие при интерференции электронных волн в широкой КЯ₂, родственны хорошо известному классическому эффекту — интерференции электронной волны на двух (или нескольких) разнесенных в координатном пространстве

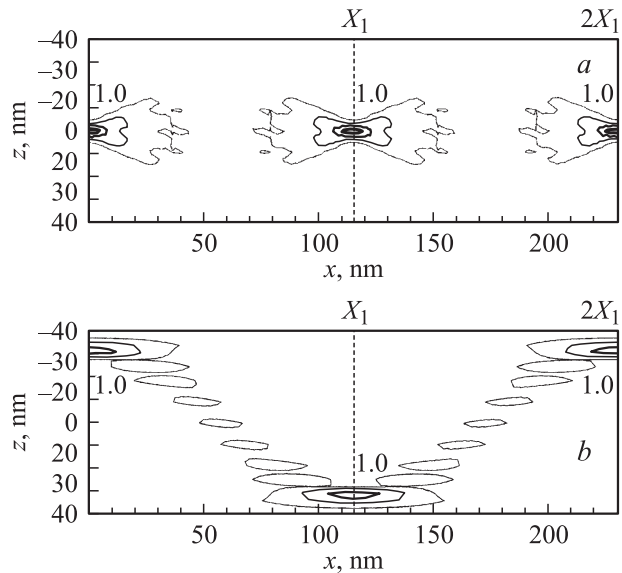


Рис. 3. Топограммы пространственного распределения в плоскости $(x-z)$ нормированной плотности потока вероятности $j_x(x, z)/j_x(0, 0)$ в параболической КЯ₂ для симметричной (*a*) и несимметричной (*b*) структур. Ось симметрии узкой КЯ₁ смещена от оси симметрии структуры на $\Delta z = 348 \text{ \AA}$. Значения 1.0 — амплитуды пиков в относительных единицах. Расчет в приближении действительных и разложенных k_x . *a*: убывающие по толщине линии — сечения на высотах 0.8, 0.5, 0.2 и 0.1 соответственно. *b*: убывающие по толщине линии — сечения на высотах 0.8, 0.5 и 0.3.

щелях [26]. Недавно такие эффекты электронной интерференции были экспериментально исследованы в твердотельном аналоге системы с двумя щелями — двухплечевом (double-path) интерферометре, реализованном в системе с двумерным электронным газом высокой подвижности [27]. В рассмотренных нами структурах роль этих щелей играют разнесенные в энергетическом пространстве квантово-размерные подзоны в широкой КЯ₂. При этом фактически в любом сечении, перпендикулярном оси x , формируется неоднородное по оси z поперечное распределение $j_x(x, z)$, обусловленное интерференцией, однако только для некоторых сечений эти распределения имеют ярко выраженные минимумы и максимумы.

Разумеется, исходное распределение плотности потока вероятности (или плотности тока) не может быть совершенно точно воспроизведено в синфазных сечениях. Основные причины этого — конечное число членов в сумме (10), ограниченное требованием действительности $k_{n,t}$, а также неточность условия синфазности, определяемая отбрасываемыми членами высших порядков при разложении квазиимпульсов (16). Анализ показывает также, что модификация пространственного распределения $j_x(x, z)$ за счет вклада в сумму (10) экспоненциально затухающих с ростом координаты x слагаемых j_{x2} (12) и j_{x3} (13) с мнимыми $k_{n,t}$ существует в широкой параболической КЯ₂ только на расстоянии

нескольких десятков ангстрем от входа в нее. Это обусловлено малыми длинами затухания l_n для таких подзон. Так, в рассмотренной нами структуре при энергии частицы $E = 270$ мэВ длина затухания в KЯ_2 $l_n = |k_n|^{-1}$ равна 64.9 \AA для первой подзоны с мнимыми k_n ($n = 13$), затем l_n уменьшается до 19 \AA при $n = 20$ — последней включенной в расчет подзоны в широкой параболической KЯ_2 . Разумеется, для более высоких подзон l_n еще меньше. Таким образом, выполнение неравенства $l_n \ll X_1$ позволяет пренебречь при расчете $j_x(x, z)$ членами $j_{x2}(x, z)$, $j_{x3}(x, z)$ и получить практически незатухающее с дальнейшим ростом координаты x пространственное распределение $j_x(x, z) \approx j_{x1}(x, z)$.

Как известно, для формирования интерференционной картины необходим режим баллистического транспорта электронов в наноструктуре. Процессы неупругого рассеяния на фононах и электрон-электронное рассеяние нарушают фазовую когерентность. Обычно время неупругого рассеяния ~ 40 пс при $T \sim 1$ К. При этом средняя скорость электронов $\sim 2.5 \cdot 10^7$ см/с и длина свободного пробега для неупругого рассеяния ~ 10 мкм [28]. Однако для горячих электронов, которыми в нашем случае являются инжектированные в широкую KЯ_2 частицы, ситуация более жесткая. Тем не менее оценки показывают, что и в рассматриваемом случае возможно сохранение интерференционной картины, по крайней мере на расстоянии нескольких повторений. При выбранной нами кинетической энергии частицы в $\text{KЯ}_2 \sim 260$ мэВ, ее скорость $\sim 1.2 \cdot 10^8$ см/с. В этом случае время пролета частицы до точки первого повторения в симметричной структуре $X_1 \sim 115$ нм $\tau \approx 9.6 \cdot 10^{-14}$ с. Эта величина почти на порядок меньше характерных времен релаксации электронов по энергии τ_e из-за рассеяния на продольных оптических (LO) фононах в GaAs, где $\tau_e \sim 10^{-12}$ с. Как известно, именно этот механизм релаксации ограничивает в основном фазовую когерентность горячих электронов, разрушая интерференционную картину.

Отметим, что реальный пучок частиц, инжектированный в широкую KЯ_2 , не является строго моноэнергетическим. Если разброс энергий частиц в пучке около значения E_{x0} равен $\pm \Delta E_{x0}$, то это, как следует из (18), приводит в первом приближении к уширению по оси x пиков точного повторения в точках X_p исходного распределения $j_x(0, z)$ на величину $\pm \Delta X_p = \pm X_p (\Delta E_{x0} / 2E_{x0})$. Так, например, если энергетическая ширина инжектированного пучка электронов составляет 10 мэВ, то это приводит в рассмотренной нами структуре к уширению первого пика повторения при $x = X_1$ на 22 \AA . В настоящее время существуют способы инъекции квазиодноэнергетических пучков электронов в 2D наноструктурах. Так, например, в [29] исследовался баллистический электронный транспорт по минизонам в сверхрешетке на основе системы GaAlAs–GaAs путем инъекции в сверхрешетку квазиодноэнергетического пучка горячих электронов.

Отметим, что рассмотренными эффектами можно управлять с помощью постоянного поперечного (вдоль

оси z) электрического поля. Поле, приложенное в области широкой KЯ_2 , приводит к изменению ее эффективной ширины, а в симметричной структуре и к появлению асимметрии вдоль оси z . Все это приводит к модификации исходного (в отсутствие поля) пространственного распределения $j_x(x, z)$.

В настоящей работе предполагалось, что скачок потенциала U_0 на ступенчатом переходе «узкая KЯ_1 –«широкая KЯ_2 » равен разности энергетических положений доньев нижних подзон в этих ямах: $U_0 = E_1^{(1)} - E_1^{(2)}$. Очевидно, что, комбинируя процентное содержание Al в квантовых ямах в областях 1 и 2, можно формировать дополнительный встроенный скачок потенциала на переходе.

В настоящей работе мы рассмотрели только структуры на основе комбинации узкой прямоугольной и широкой параболической квантовых ям. В то же время очевидно, что рассмотренные эффекты носят достаточно общий характер и должны существовать в структурах с KЯ других профилей. Мы исследовали ряд таких ситуаций, включая модификации рассмотренных эффектов в 1D наноструктурах. Эти результаты будут опубликованы отдельно. Следует также отметить, что, меняя параметры структуры (эффективную ширину KЯ , отношение ширин узкой и широкой KЯ , энергию частицы, степень асимметрии структуры, материал), можно в широких пределах менять картину пространственного распределения $j_x(x, z)$.

Авторы благодарны В.Л. Братману и В.А. Сабликову за полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 01-02-17450.

Список литературы

- [1] Y. Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford, Oxford University Press, 1997).
- [2] D.K. Ferry, S.M. Goodnick. *Transport in Nanostructures* (Cambridge, Cambridge University Press, 1997).
- [3] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge, Cambridge University Press, 1995).
- [4] George Kircenow. *Phys. Rev. B*, **39**, 10452 (1989).
- [5] George Kircenow. *Sol. St. Commun.*, **68**, 715 (1988).
- [6] E. Tekman, S. Ciraci. *Phys. Rev. B*, **43**, 7145 (1991).
- [7] Fernando Sols, M. Macucci, U. Ravaioli, K. Hess. *J. Appl. Phys.*, **66**, 3892 (1989).
- [8] Hiroyuki Tachibana, Hiroo Totsuji. *J. Appl. Phys.*, **79**, 7021 (1996).
- [9] Hua Wu, D.W.L. Sprung, J. Martorell. *J. Appl. Phys.*, **72**, 151 (1992).
- [10] A. Namiranian, M.R.H. Khajepour, Yu.A. Kolesnichenko, S.N. Shevchenko. *Physica E*, **10**, 549 (2001).
- [11] O. Olendski, L. Mikhailovska. *Phys. Rev. B*, **66**, 035331 (2002).
- [12] P.F. Bagwell. *Phys. Rev. B*, **41**, 10354 (1990).
- [13] Y. Takagaki, D.K. Ferry. *Phys. Rev. B*, **44**, 8399 (1991).
- [14] Toshihiro Itoh, Nobuyuki Sano, Akira Yoshii. *Phys. Rev. B*, **45**, 14131 (1992).

- [15] P. Singha Deo, B.C. Gupta, A.M. Jayannavar, F.M. Peeters. Phys. Rev. B, **58**, 10 784 (1998).
- [16] K. Nolicic, R. Sordan. Phys. Rev. B, **58**, 9631 (1998).
- [17] G.J. Jin, Z.D. Wang, A. Hu, S.S. Jiang. J. Appl. Phys., **85**, 1597 (1999).
- [18] В.А. Петров, И.М. Сандлер. Микроэлектроника, **23**, 3 (1994).
- [19] K.F. Berggren, Z. Ji. Phys. Rev. B, **43**, 4760 (1991).
- [20] K.F. Berggren, Z. Ji. Phys. Rev. B, **45**, 6650 (1992).
- [21] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (Нерелятивистская теория)* (М., Наука, 1989).
- [22] R. Landauer. Z. Phys. B, **68**, 217 (1978).
- [23] Л.А. Ривлин, В.С. Шильдяев. Изв. вузов. Сер. Радиофизика, **11**, 572 (1968).
- [24] Л.А. Ривлин. Квант. электрон., **6**, 1087 (1979).
- [25] V.A. Petrov, V.L. Vratman. Phys. Status Solidi B, **221**, 459 (2000).
- [26] Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. *Фейнмановские лекции по физике* (М., Мир, 1978) т. 8, 9.
- [27] E. Buks, R. Schuster, M. Heiblum, D. Mahalu, V. Umansky. Nature (London), **391**, 871 (1998).
- [28] S. Datta. Superlat. Microstruct., **6**, 83 (1989).
- [29] C. Rauch, G. Strasser, K. Unterrainer, W. Boxleitner, K. Kempa, E. Gornik. Physica E, **2**, 282 (1998).

Редактор Л.В. Шаронова

Effects of a spatial reproduction at the interference of electron waves in semiconductor 2D nanostructures with parabolic quantum wells

V.A. Petrov, A.V. Nikitin

Institute of Radio Engineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences,
101999 Moscow, Russia

Abstract Effects of spatial inhomogeneity for the probability current density $j_x(x, z)$ (or a quantum-mechanical current density $e j_x(x, z)$, e is the electron charge) in the semiconductor 2D nanostructures in the form of joints in the direction of propagation of the electron wave (the x -axis) of narrow rectangular and wide parabolic (on the z -axis) quantum wells (QWs) (z -axis being the axis of the quantization) have been theoretically studied. The inhomogeneous distribution of the $j_x(x, z)$ arises because of the interference of electron waves spreading in the wide QW simultaneously in different electron subbands. Special attention is given to effects of spatial reproduction for electron waves in such nanostructures. It is shown that transverse distribution $j_x(0, z)$ existing at the entry of the wide QW is reproduced to some accuracy at a certain distance X_1 from the joint. This picture is reproduced periodically in cross-sections $X_p = pX_1$ (p are integers). The results of numerical calculations of this effect in symmetric structure and its modification in asymmetric (on the z -axis) nanostructure are given.