

## МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

# Импедансная модель для "барьерных" задач квантовой механики

Е.А. Нелин

*Рассмотрено использование импедансной модели для решения типичных "барьерных" задач квантовой механики, в том числе для структур с резонансным туннелированием электронов. Приведены характеристики, иллюстрирующие эффективность такого подхода. Обсуждаются физическая наглядность, компактность модели, широкие возможности по ее использованию в учебном процессе.*

PACS number: 03.65.Ge

## Содержание

1. Введение (307).
  2. Квантово-механический импеданс (307).
  3. Классические "барьерные" задачи (308).
    - 3.1. Однобарьерные структуры. 3.2. Двухбарьерная структура с резонансным туннелированием электронов.
  4. Однобарьерные структуры с резонансным туннелированием электронов (311).
  5. Моделирование кристаллов и полупроводниковых сверхрешеток (312).
  6. Заключение (312).
- Список литературы (313).

## 1. Введение

"Барьерные" задачи квантовой механики — задачи о квантово-механическом движении в среде со скачками потенциала — используются как модельные во многих научных и технических приложениях. Эти задачи имеют высокую методическую и педагогическую значимость, особенно в связи с современными исследованиями и разработками в нанодиапазоне.

Особенности "барьерных" задач обусловлены взаимодействием полей волн, отраженных от скачков потенциала. При синфазной интерференции отраженных волн коэффициент прохождения равен нулю для бесконечной периодической структуры и минимален для конечной. При противофазной интерференции отраженные волны полностью самокомпенсируются, так что падающая волна резонансно проходит (туннельно или надбарьер-

но) через барьерную структуру. Такое взаимодействие отраженных волн приводит к формированию запрещенных и разрешенных зон в естественных кристаллах и искусственных кристаллоподобных структурах (полупроводниковых сверхрешетках (СР), фотонных и фононных кристаллах). Искусственные кристаллоподобные структуры составляют основу новых разнообразных нанoeлектронных устройств обработки сигналов.

Традиционное решение "барьерных" задач сшиванием решений в областях с различающимися потенциалами с учетом граничных условий требует достаточно громоздких преобразований. В [1, 2] предложена концепция импеданса для квантово-механической волны. Эта модель вносит важное физическое содержание, обладает значительной общностью, как основанная на импедансе, позволяет воспользоваться аппаратом теории линий передачи и упростить решение. Несмотря на явные достоинства, такой подход к решению квантово-механических задач не получил распространения. В данной заметке импедансная модель использована для решения типичных "барьерных" задач, в том числе для структур с резонансным туннелированием электронов (РТЭ). РТЭ лежит в основе нанoeлектронных устройств обработки сигналов. Рассмотренные задачи представлены на рис. 1.

## 2. Квантово-механический импеданс

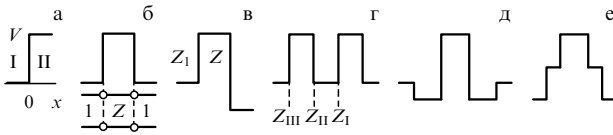
Импеданс (от лат. *impedio* — препятствую) характеризует силу реакции среды на волновое возмущение. На границе сред с различающимися импедансами силы волнового возмущения и реакции среды различны, что вызывает появление отраженной волны.

Для определения квантово-механического импеданса рассмотрим прохождение электроном границы между средами I и II с разными потенциалами. Расположим границу между средами с потенциальной ступенькой высотой  $V$  в точке  $x = 0$  (рис. 1а). В среде I волновая функция определяется выражением

$$\psi = \exp(ikx) + r \exp(-ikx). \quad (1)$$

Е.А. Нелин. Национальный технический университет Украины "Киевский политехнический институт", 03056 Киев, просп. Победы 37, Украина  
Тел. (044) 241-86-87  
E-mail: ye\_nelin@rtf.ntu-kpi.kiev.ua

Статья поступила 24 марта 2006 г.,  
после доработки 15 декабря 2006 г.



**Рис. 1.** "Барьерные" задачи (зависимость потенциала показана сплошной линией). (а) Потенциальная ступенька. (б) Симметричный потенциальный барьер и линия передачи для его моделирования;  $1$  и  $Z$  — нормированные импедансы окружающей среды и барьера. (в) Потенциальный барьер с разной высотой оснований;  $Z_1$  — нормированный импеданс окружающей среды слева от барьера. (г) Симметричная двухбарьерная структура с РТЭ;  $Z_1$ – $Z_{III}$  — нормированные входные импедансы на границах барьеров. (д, е) Симметричные однобарьерные структуры с РТЭ.

Здесь  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ,  $m$  — эффективная масса электрона,  $E$  — энергия электрона,  $r$  — коэффициент отражения. Первое слагаемое в правой части (1) соответствует падающей волне, второе — отраженной. Согласно [3]  $r = (1 - \rho)/(1 + \rho)$ , где  $\rho = \sqrt{(E - V)/E}$  (в [3] рассмотрен случай  $E > V$ , но формула верна и при  $E < V$ ). Если эффективные массы электрона  $m_I$ ,  $m_{II}$  в средах I, II различаются, то  $\rho = \sqrt{m_I(E - V)/m_{II}E}$  [1].

Выражение (1) аналогично формуле для тока в линии передачи с распределенными параметрами (длинной линии). При этом  $\rho = Z_n/Z$ , где  $Z_n$  — импеданс нагрузки,  $Z$  — волновой импеданс линии. Из сравнения выражений для  $\rho$  в случае квантово-механической и электромагнитной волн следует, что квантово-механический импеданс  $Z \sim \sqrt{(E - V)/m}$ . Абсолютное значение квантово-механического импеданса определяется из равенства плотности потока вероятности в квантово-механической среде и средней мощности в эквивалентной линии передачи [1, 2]:  $Z = 2\sqrt{2(E - V)/m}$ .

Рассмотрим особенности прохождения волной границы между средами I и II (например, квантово-механическими при  $E > V$ ). Коэффициент прохождения  $t_{II}$ , равный амплитуде прошедшей волны при единичной амплитуде падающей, определяется из граничных условий:  $t_{II} = 1 + r = 2/(1 + \rho)$ . В соответствии с законом сохранения энергии амплитуда волны, проходящей из среды I в среду II, со стороны среды I равна  $t_I = \sqrt{1 - r^2} = 2\sqrt{\rho}/(1 + \rho)$ . Как видим,  $t_{II} = t_I/\sqrt{\rho}$ . Таким образом, вследствие различия импедансов сред на границе между средами происходит трансформация амплитуды проходящей волны. Коэффициент трансформации равен корню квадратному из отношения импедансов. Трансформация проходящей волны сопровождается формированием отраженной волны.

Выражение для коэффициента отражения через отношение импедансов универсально для волн различной природы. Знак перед выражением зависит от физической величины, характеризующей волной. Для волны с коэффициентом отражения, равным  $-r$  (например, напряжение в линии передачи, нормальная составляющая вектора напряженности электрического поля электромагнитной волны),  $t_{II} = 2\rho/(1 + \rho) = \sqrt{\rho} t_I$ . В этом случае коэффициент трансформации равен  $\sqrt{\rho}^{-1}$ .

В рамках импедансной модели области квантово-механических сред с различающимися потенциалами и эффективными массами электрона моделируются отрезками линии передачи с различающимися импедансами. Анализ квантово-механической структуры сводится к анализу неоднородной линии передачи. Поскольку

характеристики отражения и прохождения зависят не от абсолютных значений импедансов сред, а от их отношения, то использование нормированных импедансов позволит упростить выкладки.

Импедансная модель, основанная на концепции квантово-механического импеданса и теории линий передачи, — физическая в отличие от традиционно используемой математической матричной модели.

### 3. Классические "барьерные" задачи

#### 3.1. Однобарьерные структуры

Рассмотрим типичные учебные задачи — прохождение электроном симметричного и несимметричного одиночного потенциального барьера. В рамках импедансной модели вывод выражения для коэффициента отражения выполняется в одну строку в отличие от заметно более громоздких традиционных выкладок. В анализе результатов сделаем акцент на важном физическом эффекте — резонансном надбарьерном прохождении электронов.

Случай симметричного одиночного барьера иллюстрирует рис. 1б. Области барьера и окружающей среды имеют различающиеся импедансы. Пронормируем импеданс барьера к импедансу окружающей среды. Нормированный входной импеданс на границе барьера для волны, распространяющейся слева направо, равен

$$Z_1 = \frac{Z - Z^2 A}{Z - A}. \quad (2)$$

Здесь  $Z = \sqrt{m(E - V)/m_1 E}$  — нормированный импеданс барьера;  $m$  и  $m_1$  — эффективные массы электрона соответственно в окружающей среде и в области барьера,  $V$  — высота барьера;  $A = \tanh(ik_1 a)$ ,  $k_1 = \sqrt{2m_1(E - V)}/\hbar$  — волновое число в области барьера,  $a$  — толщина барьера. Заметим, что  $Z = k_1 m/km_1$ , где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  — волновое число в окружающей среде. Отношение, соответствующее  $Z$ , фигурирует в известных конечных выражениях для "барьерных" задач. Таким образом, нормировкой импеданса уже в начале выкладок заложена компактность решения. При  $E < V$  импеданс и волновое число в области барьера мнимые, что соответствует туннелированию электронов.

Коэффициент отражения определяется выражением  $R = (1 - Z_1)/(1 + Z_1)$ . Подставив в него (2), получаем

$$R = \frac{(Z^2 - 1)A}{2Z - (Z^2 + 1)A}. \quad (3)$$

Выражение (3) обобщает туннелирование и надбарьерное прохождение электронов, а также учитывает различие эффективных масс электрона в окружающей среде и в области барьера. Это выражение справедливо и для потенциальной ямы, если  $k$ ,  $m$  и  $k_1$ ,  $m_1$  соответственно поменять местами в выражениях для  $Z$  и  $A$ .

Если  $m = m_1$ , то  $Z = k_1/k$  и, поскольку  $\tanh ix = i \tan x$ , выражение (3) принимает вид

$$R = \frac{(k^2 - k_1^2) \sin k_1 a}{(k^2 + k_1^2) \sin k_1 a + 2ikk_1 \cos k_1 a}.$$

Получено известное выражение для отражения от потенциального барьера [3].

Согласно закону сохранения энергии  $|R|^2 + |T|^2 = 1$ , где  $T$  — коэффициент прохождения. При туннелировании  $|T| \ll 1$ . С учетом этого  $|R|^{-2} \approx 1 + |T|^2$ . После несложных преобразований из (3) находим

$$|T| \approx 2 \frac{|Z| \sqrt{\tilde{A}^2 - 1}}{|Z|^2 + 1},$$

где  $\tilde{A} = \tanh \chi a$ ,  $\chi = \sqrt{2m_1(V-E)}/\hbar$ . При  $m = m_1$  с учетом того, что  $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$  и  $\chi a \gg 1$ , получим известное выражение [3]

$$|T| \approx 4 \frac{\sqrt{E(V-E)}}{V} \exp(-\chi a).$$

Перепишем его в виде

$$|T| \approx 4 \sqrt{\hat{E}(1-\hat{E})} \exp(-5,1 \sqrt{1-\hat{E}} \sqrt{V} a). \quad (4)$$

Здесь  $\hat{E} = E/V$ ,  $m = m_0$ ,  $m_0$  — масса покоя электрона, высота барьера  $V$  измеряется в эВ, ширина барьера  $a$  — в нм. При  $\hat{E} = 0,5$   $|T| \approx 2 \exp(-3,6 \sqrt{V} a)$ . Значениям  $V = 0,4$  эВ,  $\hat{E} = 0,5$  и  $a = 6$  нм соответствует  $|T| \approx 2 \times 10^{-6}$ .

При надбарьерном прохождении электронов ( $E > V$ )  $A = i \tan k_1 a$ . Если  $a = n\lambda_1/2$ , где  $n = 1, 2, \dots$ ,  $\lambda_1$  — длина волны электрона в области барьера, то  $A = 0$  и  $R = 0$  — условие резонансного надбарьерного прохождения электронов в общем случае. Заметим, что при  $k_1 = 0$  коэффициент отражения  $R \neq 0$ .

В частном случае, когда  $m_1 < m$ , при соответствующем значении  $E$  импеданс  $Z = 1$ , что также отвечает резонансному надбарьерному прохождению электронов.

Резонансное прохождение волн имеет исключительное значение в формировании характеристик волновых структур. Обратим внимание на физические особенности условий такого прохождения. Для резонансного прохождения волн ключевое значение имеет стоячая волна. Скачки потенциала барьера образуют резонатор. На собственных частотах, соответствующих резонансному прохождению, в резонаторе формируется стоячая волна. Резонатор со стоячей волной представляет собой собственный по отношению к барьеру (к волновой структуре в общем случае) источник волн. На собственных частотах резонатора волна, отражаемая барьером, скомпенсирована противофазной волной, излучаемой этим источником. Таким образом, при резонансном прохождении компенсация неоднородностей волновых возмущений падающей волны на границах сред обусловлена возмущениями стоячей волны, так что падающая волна проходит эти границы как однородную среду без отражений.

По-другому можно сказать, что скачки свойств на границах сред действуют как внутренние источники волн — отраженных волн. При резонансном прохождении действие (излучение) внутренних источников скомпенсировано действием (излучением) собственного источника (или источников). Этот вывод универсален для волновых структур различной природы. Резонансное туннелирование, рассмотренное ниже, также объясняется такой самокомпенсацией.

В случае барьера с разной высотой оснований (рис. 1в) с учетом (2) имеем

$$R = \frac{Z_1 - Z_1}{Z_1 + Z_1} = \frac{Z_1 - 1 - (Z_1/Z - Z)A}{Z_1 + 1 - (Z_1/Z + Z)A}. \quad (5)$$

Полученное решение обобщает частные решения, зависящие от соотношения энергии электрона и высот оснований и барьера. В [4], где используется традиционный метод, эти решения имеют громоздкую форму, получены в результате громоздких преобразований и справедливы лишь для одинаковых эффективных масс электрона в различающихся областях. При этом остались незамеченными условия резонансного надбарьерного прохождения электронов.

Несимметричность барьера в общем случае нарушает условия резонансного прохождения. Коэффициент отражения от одной из границ меньше по сравнению с другой границей. Вследствие такого уменьшения добротность собственного источника недостаточна для компенсации возмущений падающей волны на границе с большим коэффициентом отражения. Из выражения (5) видно, что в общем случае коэффициент отражения не может быть нулевым, поскольку в числителе слагаемое  $Z_1 - 1$  — действительное, а следующее слагаемое — мнимое.

В двух частных случаях резонансное прохождение возможно лишь для одного в каждом из случаев значения энергии. При этом эффективная масса электрона слева от барьера должна быть меньше, чем справа, и необходимо выполнение условий:  $Z_1 = 1$ ;  $A = 0$  либо  $Z = Z_1 = 1$ . Последние условия предполагают, что эффективная масса электрона в области барьера меньше, чем слева от барьера.

Резонансное прохождение несимметричного барьера имеет одномодовый (с одним значением энергии) характер в отличие от многомодового характера такого прохождения для симметричного барьера. Одномодовый характер резонансного прохождения позволяет реализовать однополосную характеристику пропускания в практических приложениях.

### 3.2. Двухбарьерная структура

#### с резонансным туннелированием электронов

Симметричная двухбарьерная структура — базовая для понимания физических основ формирования зонных диаграмм, принципов работы наноэлектронных устройств и их конструирования. В этой структуре наблюдается необычное явление — резонансное туннелирование, при котором коэффициент прохождения равен единице. При туннелировании сквозь одиночный барьер коэффициент прохождения чрезвычайно мал, например порядка  $10^{-6}$ . Казалось бы, добавление еще одного барьера только уменьшит коэффициент прохождения. Однако при определенных значениях энергии коэффициент прохождения сквозь двухбарьерную структуру равен единице. В учебной литературе рассмотрен лишь частный случай такой структуры с  $\delta$ -барьерами [3]. Импедансная модель позволяет получить новые результаты — аналитические выражения для коэффициента отражения и собственных значений двухбарьерной структуры.

Для двухбарьерной структуры (рис. 1г) необходимо последовательно находить нормированные входные импедансы  $Z_1 - Z_{III}$  на границах барьеров. Выполнив преобразования, получим

$$Z_{III} = Z \frac{Z^3 A^2 B - Z^2 AB + 2Z^2 A - ZA^2 + ZB - Z - AB}{-Z^3 AB - Z^2 A^2 + Z^2 B - Z^2 - ZAB + 2ZA + A^2 B},$$

где  $B = i \tan kb$ ,  $b$  — ширина потенциальной ямы.

Коэффициент отражения

$$R = \frac{1 - Z_{III}}{1 + Z_{III}} = \frac{(1 - Z^2)[2Z + (Z^2 + 1)AB]A}{(Z^4 + 1)A^2B + 2Z\{[(Z^2 + 1)A - Z](1 - B) - ZA^2\}} \quad (6)$$

Условие  $R = 0$  определяет выражения для собственных значений:

$$AB = -\frac{2Z}{Z^2 + 1}, \quad E > 0, \quad (7)$$

и  $A = 0$  либо  $Z = 1$ ,  $E > V$ . Последние выражения соответствуют собственным значениям одиночного барьера. Заметим, что при  $E = 0$  коэффициент отражения  $R = 1$ .

Обратим внимание, что (7) преобразуется к виду  $AB = (r^2 - 1)/(r^2 + 1)$ , где  $r = (1 - Z)/(1 + Z)$  — коэффициент отражения от скачка потенциала высотой  $V$ . Таким образом, в рамках импедансной модели собственные значения симметричной двухбарьерной структуры определяются относительным импедансом барьера или коэффициентом отражения от скачка потенциала. Этот вывод иллюстрирует физическую наглядность импедансной модели.

При  $m = m_1$  из (7) имеем

$$\tanh \chi a \tan kb = \frac{2\eta}{1 - \eta^2} = \frac{\sqrt{E(V - E)}}{E - 0,5V}, \quad (8)$$

где  $\eta = \chi/k$ . В диапазоне туннелирования, представляющем наибольший интерес и рассмотренном ниже,  $\chi$  — действительное.

В случае толстых барьеров, когда  $\chi a \geq 1$ , что отвечает  $a \geq \lambda_1/\pi$ ,  $\tanh \chi a \approx 1$  и (8) соответствует известному выражению для потенциальной ямы [5].

В случае тонких барьеров  $\chi a \ll 2$ ,  $\tanh \chi a \approx \chi a$  и (8) преобразуется к виду  $\tan kb = k\hbar^2/[am(2E - V)]$ . Для  $\delta$ -барьеров, описываемых функцией  $\alpha\delta(x)$  (где  $\alpha > 0$  — константа),  $V = \alpha/a$ ,  $a \rightarrow 0$ . При этом  $\tan kb = -k\hbar^2/\alpha m$ , что совпадает с [3].

Перепишем (8) в виде

$$0 = \cosh \chi a \cos kb - \frac{1 - \eta^2}{2\eta} \sinh \chi a \sin kb. \quad (9)$$

Правая часть (9) — дисперсионная характеристика периодической СР, образованной чередующимися барьерами и ямами [6]. Дисперсионная характеристика — зависимость  $E(K)$ , где  $K$  — блоховское волновое число, — представляет собой зонный энергетический спектр СР. В левой части дисперсионной характеристики стоит  $\cos K\Lambda$ , где  $\Lambda = a + b$  — период структуры. На границах запрещенных зон  $|\cos K\Lambda| = 1$  или  $K\Lambda = n\pi$  ( $n_3 = 1, 2, \dots$  — номер запрещенной зоны). Выражение (9) соответствует значениям дисперсионной характеристики вблизи середин разрешенных зон при  $\cos K\Lambda = 0$  или  $K\Lambda = (2n_p - 1)\pi/2$  ( $n_p = 1, 2, \dots$  — номер разрешенной зоны). Приведенные условия для  $K\Lambda$  в запрещенных и разрешенных зонах отвечают синфазной и противофазной интерференции отраженных волн. Противофазная интерференция соответствует РТЭ. Таким образом, полученное выражение для собственных значений двухбарьерной структуры — базовой ячейки СР — имеет

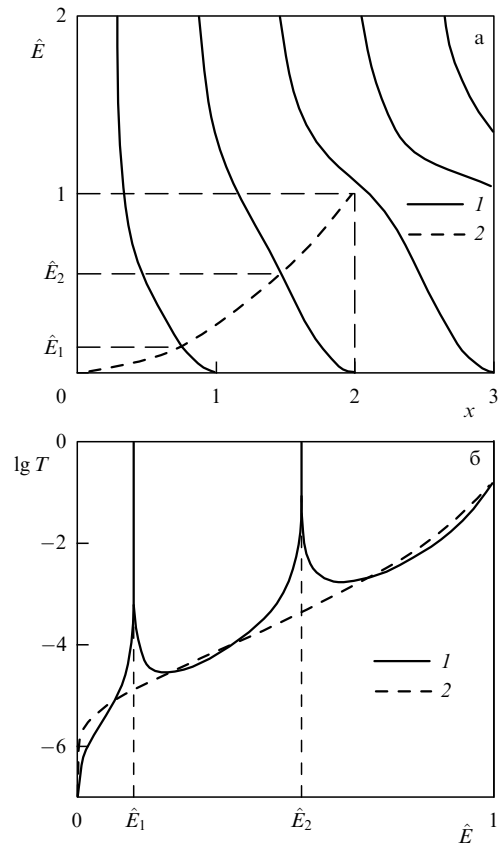


Рис. 2. Характеристики симметричной двухбарьерной структуры. (а) Зависимости нормированных собственных значений (кривые 1) и зависимости  $x(\hat{E})$  (кривая 2). (б) Зависимости коэффициента прохождения двухбарьерной структуры от нормированной энергии электрона (кривая 1) и потенциального барьера удвоенной толщины (кривая 2).

непосредственную связь с дисперсионной характеристикой СР.

Преобразуем (8) к виду

$$\text{thg } p\pi x \tan \pi x = \frac{\sqrt{\hat{E}|\hat{E} - 1|}}{\hat{E} - 0,5}, \quad (10)$$

где

$$\text{thg } x = \begin{cases} \tanh x, & \hat{E} < 1, \\ \tan x, & \hat{E} \geq 1. \end{cases}$$

Здесь  $x = kb/\pi$ ;  $p = |\hat{E}^{-1} - 1|^{1/2} a/b$ . Поскольку  $x = 2b/\lambda$  ( $\lambda$  — длина волны электрона в области потенциальной ямы), то  $x = 1, 2, \dots$  — число полуволн электрона, укладываемых в потенциальной яме. С учетом зависимости  $k$  от  $E$  имеем  $x(\hat{E}) = x(V)\hat{E}^{1/2}$ , где  $x(V) = \sqrt{2mV}b/\pi\hbar$ .

На рисунке 2а приведены зависимости нормированных собственных значений двухбарьерной структуры согласно (10) при  $a = b$ , а также зависимость  $x(\hat{E})$  для  $x(V) = 2$ . Во всем диапазоне собственные значения изменяются от величин, приблизительно равных собственным значениям потенциальной ямы структуры, до величин, определяемых условием взаимной компенсации четырех волн, отраженных от каждого из скачков потенциала структуры:  $x = n/4$ ,  $n = 1, 3, \dots$ . Диапазон  $\hat{E} < 1$  соответствует РТЭ. Полный спектр собственных значе-

ний двухбарьерной структуры включает также собственные значения одиночного барьера в виде вертикальных линий, расположенных в точках  $x = 1, 2, \dots$  в диапазоне  $\hat{E} > 1$ .

Точки пересечения зависимостей 1 и 2 определяют собственные значения, равные  $\hat{E}_1 = 0,14$  и  $\hat{E}_2 = 0,54$ , при  $x(V) = 2$ . Такому значению  $x(V)$  отвечают, например, следующие параметры:  $V = 0,24$  эВ,  $a = b = 25$  Å,  $m = m_1 = m_0$ .

Рисунок 2б иллюстрирует зависимости коэффициента прохождения двухбарьерной структуры при  $x(V) = 2$ , а также одиночного потенциального барьера от нормированной энергии электрона. Значения  $\hat{E}_1$  и  $\hat{E}_2$  отвечают рис. 2а. Одиночный барьер по сравнению с барьером структуры имеет удвоенную толщину и соответствует двухбарьерной структуре без потенциальной ямы. Зависимость 2 рассчитана из приближенного выражения (4). Результаты расчетов по точному и приближенному выражениям совпадают. Как и следовало ожидать, из сравнения зависимостей видно, что вдалеке от собственных значений двухбарьерной структуры потенциальная яма практически не влияет на проходящую волну.

#### 4. Однобарьерные структуры с резонансным туннелированием электронов

Анализ особенностей РТЭ в двухбарьерной структуре позволяет предложить новые простые структуры с РТЭ — симметричные однобарьерные.

Резонансное туннелирование волн, как и резонансное прохождение, обусловлено компенсацией отраженных волн в результате формирования собственного компенсирующего источника волны — резонансной области со стоячей волной. В двухбарьерной структуре резонатор, формирующий стоячую волну, помещен внутри барьера, так что образованы два барьера с потенциальной ямой между ними. Обозначим такую структуру ТРТ, где Т — туннельный барьер; Р — резонатор, соответствующий потенциальной яме. Другое решение — поместить барьер в поле стоячей волны резонатора. В результате получим симметричные однобарьерные структуры с потенциальными ямами — РТР<sub>я</sub> и со ступеньками — РТР<sub>с</sub> (рис. 1д, е).

Для РТР-структуры имеем

$$R = \left\{ [(Z_1^2 - Z^4)A^2 + Z^2(1 - Z_1^2)]B - 2ZZ_1(Z^2 - 1)A \right\} \times \\ \times \left\{ [(Z^4 + Z_1^2)A^2 - 2Z(Z^2 + Z_1^2)A + Z^2(Z_1^2 + 1)]B + \right. \\ \left. + 2ZZ_1[(Z^2 - ZA + 1)A - Z] \right\}^{-1}. \quad (11)$$

Аналогично ТРТ-структуре внешним областям соответствуют импеданс  $Z$ , множитель  $A$  и толщина  $a$ , внутренней области —  $Z_1$ ,  $B$  и  $b$ . Как и следовало ожидать, при  $Z_1 = 1$  (11) совпадает с (6). Собственные значения определяются выражением

$$B = \frac{2ZZ_1(Z^2 - 1)A}{(Z_1^2 - Z^4)A^2 + Z^2(1 - Z_1^2)}. \quad (12)$$

Преобразуем (12) для случая одинаковых эффективных масс в различающихся областях. Для РТР<sub>я</sub>-структуры при выполнении условия  $V = V_я$ , где  $V$  — высота барьера, отсчитываемая от потолка ямы;  $V_я$  — глубина

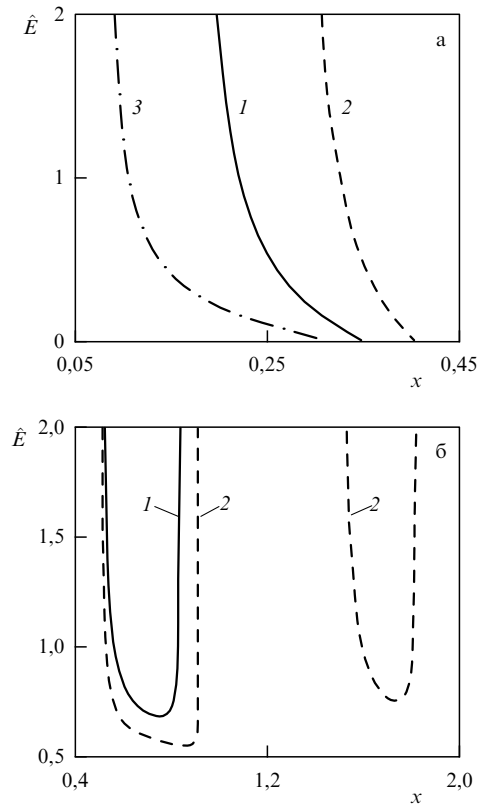


Рис. 3. Зависимости нормированных собственных значений РТР-структур. (а) РТР<sub>я</sub>-структура;  $a/b = 1; 2; 0,6$  (соответственно кривые 1, 2, 3). (б) РТР<sub>с</sub>-структура;  $a/b = 5; 10$  (соответственно кривые 1, 2).

ямы, имеем

$$\text{thg } p\pi x = \frac{\sqrt{|\hat{E}^{-2} - 1|} \sin 2\pi x}{2 - \cos 2\pi x + \hat{E}^{-1}}, \quad (13)$$

где

$$p = \sqrt{\frac{|\hat{E} - 1| b}{\hat{E} + 1} \frac{1}{a}}.$$

Для РТР<sub>с</sub>-структуры в случае, если высота ступенек  $V_с = 0,5V$ , получим

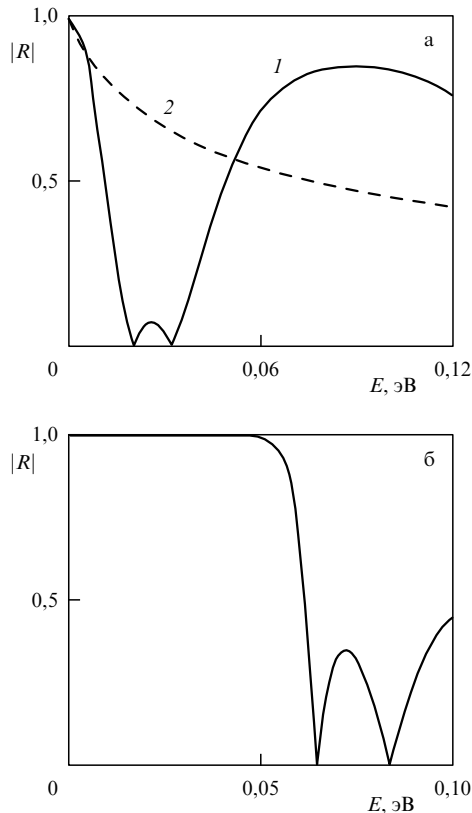
$$\text{thg } p\pi x = \frac{2\sqrt{2|\hat{E}^{-2} - 3\hat{E}^{-1} + 2|} \tan \pi x}{4 - \hat{E}^{-1} \tan^2 \pi x + 2\hat{E}^{-1}}, \quad (14)$$

где

$$p = \sqrt{\frac{|\hat{E} - 1| b}{\hat{E} - 0,5} \frac{1}{a}}.$$

На рисунке 3 приведены зависимости собственных значений РТР-структур согласно (13) и (14), позволяющие определить собственные значения структуры аналогично рис. 2а. Эти зависимости могут быть использованы и для синтеза структур с заданными собственными значениями.

На рисунке 4 показаны зависимости коэффициента отражения РТР-структур. Потенциальные ямы и барьеры образованы слоями GaAs и Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As соответственно. Эффективная масса электрона в GaAs  $m = 0,0665m_0$ , в Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As  $m_1 = (0,0665 + 0,0835)xm_0$  [8].



**Рис. 4.** Зависимости коэффициента отражения RTP-структур от энергии электрона. (а) RTP<sub>a</sub>-структура (кривая 1) и потенциальный барьер (кривая 2);  $a = 48d$ ,  $b = 6d$ , где  $d$  — толщина монослоя GaAs в направлении [100] ( $d = 2,82665 \text{ \AA}$  [7]),  $V = V_a = 0,12 \text{ эВ}$ . (б) RTP<sub>c</sub>-структура;  $a = 40d$ ,  $b = 4d$ ,  $V = 2V_c = 0,1 \text{ эВ}$ .

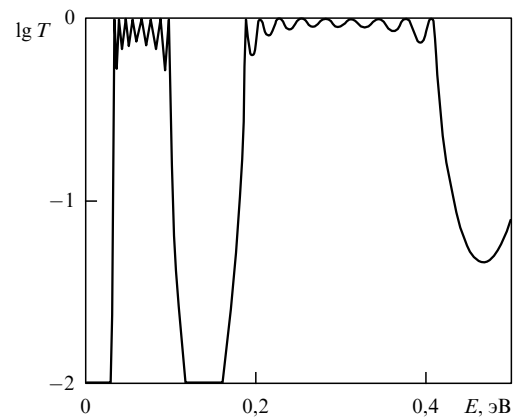
Значения  $V$  и  $x$  связаны соотношением  $V = 0,7731x$  [9]. Для сравнения на рис. 4а приведена зависимость коэффициента отражения потенциального барьера с параметрами барьера RTP<sub>a</sub>-структуры. В каждой из RTP-структур два уровня РТЭ.

Симметричные однобарьерные структуры с резонансным туннелированием представляют интерес как возможные базовые для устройств обработки сигналов на различных волнах. Идея селективных устройств на этой основе заключается в следующем. Полоса пропускания соответствует резонансному туннелированию. Коэффициент прохождения на резонансной частоте равен единице. Вне полосы пропускания туннельный барьер обладает чрезвычайно низкой прозрачностью, что обеспечивает значительное затухание сигнала.

## 5. Моделирование кристаллов и полупроводниковых сверхрешеток

Современная теория металлов, полупроводников и диэлектриков основана на зонной теории. Изучение физических основ и моделирование зонных диаграмм имеет большое значение в физико-техническом образовании специалиста. Такие знания особенно важны в связи с интенсивными разработками и исследованиями новейших нанoeлектронных устройств обработки сигналов.

Глубокое понимание и усвоение этого материала, формирование продуктивных физических аналогий обеспечивают волновой интерференционный подход [10]. Важен акцент на аналогию кристаллов и волновых



**Рис. 5.** Зависимость коэффициента прохождения СР, образованной слоями GaAs и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , от энергии электрона. Число барьеров — 10,  $a = 5d$ ,  $b = 20d$ ,  $V = 0,2 \text{ эВ}$ .

фильтров [11]. В [6] на основе матричной модели развита теория распространения электронов в периодических структурах, образованных потенциальными барьерами и ямами. Исходя из этой модели, в [12] с учебными целями разработана программа на языке ФОРТРАН для моделирования формирования зонных диаграмм кристаллов и характеристик полупроводниковых СР. Импедансная модель позволяет сократить программу с пяти страниц до одной на языке ФОРТРАН и до половины страницы в среде Mathcad. При этом в отличие от [12] учитывается и режим надбарьерного прохождения электронов. Матричная и импедансная модели дают идентичные результаты, что позволяет выполнить тестовые проверки.

На рисунке 5 представлена рассчитанная по импедансной модели зависимость коэффициента прохождения СР, иллюстрирующая формирование зонной диаграммы. Участки с коэффициентом прохождения, приблизительно равным единице, соответствуют разрешенным зонам, с малыми значениями — запрещенным. Первая разрешенная зона со значениями  $E < V$  сформирована за счет РТЭ, вторая — в результате резонансного надбарьерного прохождения электронов.

Приведенная характеристика — типовая для учебных целей. В лабораторных работах по исследованию зонных диаграмм кристаллов и полупроводниковых СР студенты изучают резонансное туннелирование и надбарьерное прохождение электронов, а также особенности характеристик прохождения и отражения в зависимости от параметров структур.

Необходимо учесть, что резонансные эффекты узкополосные, поэтому плотность точек при расчете должна быть достаточной. Вследствие недостаточной плотности точек в зависимости, приведенной в [12] на рис. 2, максимум коэффициента прохождения, несмотря на РТЭ, заметно меньше единицы.

Для формирования требуемых характеристик СР необходима аподизация — изменение параметров потенциальных ям и барьеров. В [13] рассмотрена амплитудная аподизация СР, в [14] — фазовая, в [15] — краевая.

## 6. Заключение

Импедансная модель дает новый взгляд на "барьерные" задачи квантовой механики, заметно приближает пони-

мание особенностей формирования зонных диаграмм кристаллов и характеристик кристаллоподобных структур, упрощает моделирование. На основе этой модели доступна индивидуальная разработка студентом программы с последующим моделированием и анализом результатов. В среде Mathcad программирование упрощено: за счет автоматического преобразования мнимых аргументов нет необходимости отдельно рассматривать туннелирование и надбарьерное прохождение электронов. Задачи моделирования аподизованных СР и других кристаллоподобных структур, а также устройств на их основе составляют тематику выпускных работ студентов.

### Список литературы

1. Khondker A N, Khan M R, Anwar A F M *J. Appl. Phys.* **63** 5191 (1988)
2. Anwar A F M, Khondker A N, Khan M R *J. Appl. Phys.* **65** 2761 (1989)
3. Галицкий В М, Карнаков Б М, Коган В И *Задачи по квантовой механике* (М.: Наука, 1981)
4. Fromhold A T (Jr.), in *Encyclopedia of Physical Science and Technology* Vol. 13 (San Diego: Academic Press, 2001) p. 359
5. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика: Нерелятивистская теория* (М.: Физматлит, 2002)
6. Ярив А *Введение в теорию и приложения квантовой механики* (М.: Мир, 1984)
7. Gaylord T K, Glytsis E N, Brennan K F *J. Appl. Phys.* **65** 2535 (1989)
8. Nakamura K et al. *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-28** 1670 (1992)
9. Wilson D W, Glytsis E N, Gaylord T X *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-29** 1364 (1993)
10. Киттель Ч *Элементарная физика твердого тела* (М.: Наука, 1965)
11. Спроул Р Л *Современная физика. Квантовая физика атомов, твердого тела и ядер* 2-е изд. (М.: Наука, 1974)
12. Brennan K F *IEEE Trans. Education* **E-35** 60 (1992)
13. Нелин Е А *Изв. вузов. Радиоэлектроника* **38** (5) 33 (1995)
14. Нелин Е А *Изв. вузов. Радиоэлектроника* **47** (7) 87 (2004)
15. Нелин Е А *ЖТФ* **75** (11) 120 (2005)

### Impedance model for quantum mechanical barrier problems

**E.A. Nelin**

*National Technical University of Ukraine "Kiev Polytechnic Institute",  
prosp. Pobedy 37, 03056 Kiev, Ukraine  
Tel. (38-044) 241-86 87  
E-mail: ye\_nelin@rtf.ntu-kpi.kiev.ua*

Application of the impedance model to typical quantum mechanical barrier problems, including those for resonant tunneling structures, is discussed. The efficiency of the approach is illustrated. The clarity and compactness of the model and its potential as a teaching and learning tool is discussed.

PACS number: 03.65.Ge

Bibliography — 15 references

*Received 24 March 2006, revised 15 December 2006*

*Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **177** (3) 307–313 (2007)

*Physics – Uspekhi* **50** (3) (2007)