

Эволюция и коллапс квазистационарных состояний электрона в плоских симметричных трехбарьерных резонансно-туннельных структурах

Н.В. Ткач, Ю.А. Сети

*Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича
ул. Коцюбинского, 2, г. Черновцы, 58012, Украина*

E-mail: ktf@chnu.edu.ua

Статья поступила в редакцию 11 марта 2009 г.

В модели эффективных масс и симметричных прямоугольных потенциальных барьеров для электрона в плоской трехбарьерной структуре развита теория эволюции и коллапса пар резонансов из-за изменения мощности (толщины) внутреннего барьера. Аналитический и численный расчеты спектральных параметров (резонансных энергий и ширин) выполняются методом коэффициента прозрачности и функции распределения вероятности с использованием трансфер-матрицы и S -матрицы рассеяния. Показано, что в симметричной трехбарьерной структуре коллапс резонансных энергий и ширин всех квазистационарных состояний происходит практически при одинаковых значениях толщин внутренних барьеров, несколько превышающих суммарную толщину внешних. Установлено, что по отношению к модели прямоугольных барьеров δ -модель завышает значения резонансных энергий на десятки процентов, а резонансные ширины почти в два раза.

У моделі ефективних мас і симетричних прямокутних потенційних бар'єрів для електрона в плоскій трибар'єрній структурі розвинено теорію еволюції та колапсу пар резонансів через зміну потужності (товщини) внутрішнього бар'єра. Аналітичний та чисельний розрахунки спектральних параметрів (резонансних енергій та ширин) виконуються методом коефіцієнта прозорості та функції розподілу ймовірності з використанням трансфер-матриці та S -матриці розсіювання. Показано, що в симетричній трибар'єрній структурі колапс резонансних енергій та ширин всіх квазістаціонарних станів відбувається практично при однакових значеннях товщин внутрішніх бар'єрів, що трохи перевищують сумарну товщину зовнішніх. Встановлено, що по відношенню до моделі прямокутних бар'єрів δ -модель завищує значення резонансних енергій на десятки відсотків, а резонансні ширини майже у два рази.

PACS: 73.21.Fg Квантовые ямы;

73.90.+f Другие темы в электронной структуре и электрических свойствах поверхностей, поверхностей раздела, тонких пленок и низкоразмерных структур.

Ключевые слова: коллапс, резонансно-туннельная структура, электрон.

1. Введение

Открытые наносистемы, как резонансно-туннельные структуры (РТС) разных размерностей и форм (квантовые пленки, проволоки и точки), изучаются очень активно [1–6]. Интерес к ним усилился после того, как в работах Феиста и Капассо с коллегами [7,8] впервые были продемонстрированы квантовые когерентные лазеры, работающие на двух- и трехбарьерных РТС в терагерцевом диапазоне при низких температурах. Уникальные физические характеристики квантовых каскадных лазе-

ров (малые токи возбуждения, большие мощности, стабильные актуальные частоты излучения) стимулировали экспериментальные [9–13] и теоретические [4–18] исследования многослойных РТС.

Несмотря на довольно длительный период развития, теория квантовых каскадных лазеров еще далека от хорошего количественного согласия с экспериментом. Причина не только в том, что в исходной теоретической модели необходимо учитывать сложные взаимодействия электронов с другими квазичастицами и полями, но и в том, что в открытых наносистемах

электроны находятся в квазистационарных состояниях (КСС), теория которых в низкоразмерных системах продолжает развиваться [19–23].

В отличие от теории рассеяния частиц на достаточно мощных потенциальных барьерах трехмерных систем, где спектральные параметры — резонансные энергии (РЭ) и ширины (РШ) — хорошо определяются непосредственно комплексными полюсами S -матрицы, в нано-РТС потенциальные барьеры для квазичастиц не всегда могут считаться достаточно мощными и тогда возникает вопрос: «Как адекватно определить спектральные параметры КСС, поскольку величины мнимых частей полюсов S -матрицы становятся сравнимыми с действительными, из-за чего они непосредственно уже не определяют РЭ и РШ?»

На примере КСС электрона в открытой сферической квантовой точке в работе [24] было показано, что в системе со слабыми потенциальными барьерами комплексные полюса S -матрицы некорректно определяют РЭ и РШ, тогда как функция распределения вероятности нахождения электрона внутри квантовой точки адекватно определяет эти параметры независимо от мощности потенциального барьера.

В процессе развития теории квантовых каскадных лазеров появились задачи оптимизации их физических параметров путем изменения геометрических размеров элементов РТС. Оказалось, что именно увеличение мощности внутреннего барьера трехбарьерной системы (ТБС) вызывает такую эволюция КСС, при которой пары соседних резонансов сближаются между собой и коллапсируют. В этом случае возникают известные затруднения в определении спектральных параметров КСС.

Чтобы избежать громоздких математических выкладок, в подавляющем большинстве теоретических работ исследования КСС электронов выполняются в модели δ -образных потенциалов РТС, так как предполагается, что эта модель существенно не влияет на точность результатов. Так недавно авторами работы [22] в δ -барьерной модели методом коэффициента прозрачности D изучался коллапс РЭ пары близких резонансов в ТБС. Было показано, что РЭ, определяемые непосредственно полюсами S -матрицы рассеяния, не описывают коллапс, а выражение для коэффици-

циента прозрачности в самой точке коллапса имеет существенно не брейт-вигнеровский вид.

Поскольку наноприборы (лазеры, сенсоры и т.п.) чрезвычайно чувствительны к спектральным параметрам, а особенно к РШ электронных состояний в РТС, то ясно, что эволюцию и коллапс спектральных параметров необходимо детально изучить в более реалистической модели прямоугольных потенциальных барьеров. Кроме того что эта модель не содержит математических особенностей δ -аппроксимации, в отличие от δ -барьерной модели, она учитывает существенную разницу эффективных масс в разных элементах наносистемы.

В предлагаемой работе исследованы эволюция и коллапс РЭ и РШ КСС электронов в ТБС не только методом коэффициента прозрачности D , но и методом функции распределения вероятности нахождения электрона в системе W .

Показано, при каких геометрических параметрах ТБС комплексные полюса S -матрицы и обе функции (D , W) практически одинаково определяют величины РЭ и РШ. Выяснено, при каких условиях и почему спектральные параметры резонансов, определяемые функциями D и W , различаются между собой, а непосредственно комплексные полюса S -матрицы вообще не определяют эти параметры. Показано, что, подобно формуле Брейта–Вигнера, для каждой пары резонансов существует приближенная функция распределения вероятности $W_n^s(E)$, которая определяет их спектральные параметры через полюса S -матрицы при любых геометрических параметрах наносистемы.

2. S -матрица, коэффициент прохождения и функция распределения вероятности

Рассмотрена плоская открытая ТБС с геометрическими параметрами, приведенными на рис. 1. Учитывая, что величины постоянных решеток (a_0, a_1) составляющих слоев наносистемы различаются мало, для построения теории резонансных энергий и ширин КСС электрона в такой РТС будем использовать модель эффективных масс и прямоугольных потенциалов.

В декартовой системе координат с началом по середине наносистемы (рис. 1) эффективная масса и потенциальная энергия электрона имеют вид

$$m(z) = \begin{cases} m_0, & 0 \leq |z| \leq \Delta/2, \\ m_1, & \Delta/2 \leq |z| \leq z_0, \end{cases} \quad U(z) = \begin{cases} U_0, & 0 \leq |z| \leq \Delta/2, \\ 0, & \Delta/2 \leq |z| \leq z_0, \end{cases} \quad z_0 \leq |z| \leq z_1 \quad (1)$$

Решение стационарного уравнения Шредингера для электрона в РТС

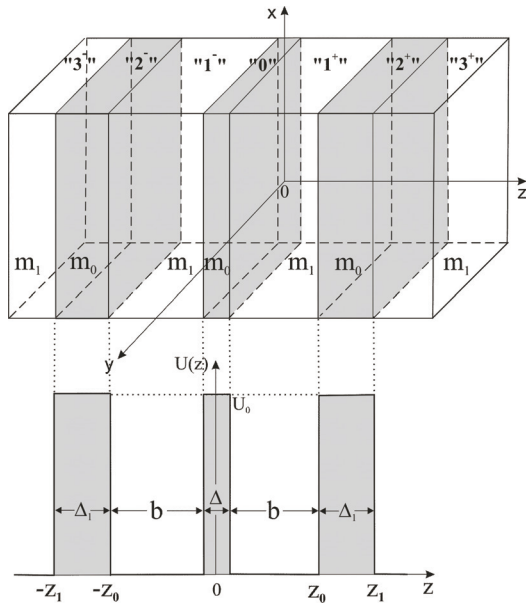


Рис. 1. Геометрическая и энергетическая схемы ТБС.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{m(z)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right) + U(z) \right) \times \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (2)$$

найдено в виде

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(z)\Psi_{k_{\parallel}}(x, y) = \frac{1}{L} \Psi(z) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}(x\mathbf{n}_x + y\mathbf{n}_y)), \quad (3)$$

здесь \mathbf{k}_{\parallel} — квазиимпульс электрона, L — длина основной области в плоскости XOY .

Для функции $\Psi(z)$, с учетом (2) и (3), получено уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U_{k_{\parallel}}(z) \right) \Psi(z) = E\Psi(z), \quad (4)$$

где величина

$$U_{k_{\parallel}}(z) = U(z) + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m(z)} = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_1}, & \Delta/2 \leq |z| \leq z_0, \quad z_1 \leq |z| \leq \infty, \\ \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} + U_0, & 0 \leq |z| \leq \Delta/2, \quad z_0 \leq |z| \leq z_1 \end{cases} \quad (5)$$

играет роль эффективной потенциальной энергии, зависящей от k_{\parallel} .

Учитывая, что волновая функция в S -матричном варианте, определяющем функцию распределения W , и в варианте, определяющем коэффициент D , отлича-

ется только во внешней области системы (3), запишем ее в таком компактном виде:

$$\Psi_{\left\{ \begin{matrix} S \\ D \end{matrix} \right\} k_{\perp}}(z) = \begin{cases} \Psi_0(z) = A_0 e^{\chi z} + B_0 e^{-\chi z}, & 0 \leq |z| \leq \Delta/2, \\ \Psi_1^{\pm}(z) = A_1^{\pm} e^{ik_{\perp}z} + B_1^{\pm} e^{-ik_{\perp}z}, & \Delta/2 \leq |z| \leq z_0, \\ \Psi_2^{\pm}(z) = A_2^{\pm} e^{\chi z} + B_2^{\pm} e^{-\chi z}, & z_0 \leq |z| \leq z_1, \\ \Psi_{\left\{ \begin{matrix} S \\ D \end{matrix} \right\} 3}^{\pm}(z) = \begin{cases} B_3^{\pm} (e^{-ik_{\perp}z} + S e^{ik_{\perp}z}), \\ A_3^{\pm} e^{ik_{\perp}z} + F_3^{\pm} e^{-ik_{\perp}z}, \end{cases} & z_1 \leq |z| \leq \infty, \end{cases} \quad (6)$$

где

$$k_{\perp} = \sqrt{\frac{2m_1 E}{\hbar^2} - k_{\parallel}^2},$$

$$\chi = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E) + k_{\parallel}^2} = \sqrt{\frac{2m_0 U_0}{\hbar^2} + \frac{m_1 - m_0}{m_1} k_{\parallel}^2 - \frac{m_0}{m_1} k_{\perp}^2}. \quad (7)$$

Граничные условия непрерывности волновых функций и потоков плотности вероятности на границах слоев структуры

$$\Psi_i(\pm z_i) = \Psi_{i+1}(\pm z_i);$$

$$\frac{1}{m_i} \frac{d\Psi_i(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_i} = \frac{1}{m_{i+1}} \frac{d\Psi_{i+1}(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_i} \quad (i=0, \pm 1, \pm 2) \quad (8)$$

вместе с условием нормировки (при фиксированном значении k_{\parallel})

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{k'_{\perp}}^*(z) \Psi_{k_{\perp}}(z) dz = \delta(k_{\perp} - k'_{\perp}) \quad (9)$$

однозначно определяют неизвестные коэффициенты $A_i^{\pm}, B_i^{\pm}, F_3^{\pm}$ ($i=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$) и S -матрицу рассеяния через трансфер-матрицу системы [25].

Для рассматриваемой ТБС трансфер-матрица T представлена произведением

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} = (T_-^{01} T_-^{12} T_-^{23})^{-1} T_+^{01} T_+^{12} T_+^{23}, \quad (10)$$

где

$$T_{\pm}^{ii+1} = \begin{pmatrix} t_{\pm 11}^{ii+1} & t_{\pm 12}^{ii+1} \\ t_{\pm 21}^{ii+1} & t_{\pm 22}^{ii+1} \end{pmatrix} \quad (i=0,1,2). \quad (11)$$

Аналитические выражения для матричных элементов T_{\pm}^{ii+1} -матриц имеют вид

$$t_{\pm 11}^{01}(\chi, k_{\perp}) = (t_{\pm 12}^{01}(\chi, k_{\perp}))^* = t_{\pm 21}^{01}(-\chi, k_{\perp}) = \\ = (t_{\pm 22}^{01}(-\chi, k_{\perp}))^* = \frac{1}{2} \left(1 \pm i \frac{m_0 k_{\perp}}{m_1 \chi} \right) e^{\mp \chi \Delta / 2}, \quad (12)$$

$$t_{\pm 11}^{12}(\chi, k_{\perp}) = (t_{\pm 12}^{12}(\chi, k_{\perp}))^* = t_{\pm 21}^{12}(-\chi, k_{\perp}) = \\ = (t_{\pm 22}^{12}(-\chi, k_{\perp}))^* = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{m_1 \chi}{m_0 k_{\perp}} \right) e^{-ik_{\perp} b}, \quad (13)$$

$$t_{\pm 11}^{23}(\chi, k_{\perp}) = (t_{\pm 12}^{23}(\chi, k_{\perp}))^* = t_{\pm 21}^{23}(-\chi, k_{\perp}) = \\ = (t_{\pm 22}^{23}(-\chi, k_{\perp}))^* = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{m_0 k_{\perp}}{m_1 \chi} \right) e^{-\chi \Delta_1}. \quad (14)$$

Согласно квантово-механическому определению [26], для коэффициента прозрачности D получаем выражение

$$D(k_{\perp}) = \left| A_3^+ \right|^2 \left| A_3^- \right|^{-2} = |t_{21}|^{-2}, \quad (15)$$

содержащее лишь один элемент T -матрицы, тогда как для определения аналитического вида S -матрицы из условий (8) получается квадратное уравнение, имеющее два решения

$$S^{(1,2)}(k_{\perp}) = e^{-2ik_{\perp} z_1} \frac{1 + iZ^{(1,2)}(k_{\perp})}{1 - iZ^{(1,2)}(k_{\perp})}, \quad (16)$$

содержащие действительные функции

$$Z^{(1,2)}(k_{\perp}) = \frac{\operatorname{Re}(t_{12}) \left(\operatorname{Im}(t_{21}) + \operatorname{Im} \left(t_{11} e^{-2ik_{\perp} z_1} \right) \right)}{|t_{12}|^2 + \operatorname{Im}(t_{21}) \operatorname{Im} \left(t_{11} e^{-2ik_{\perp} z_1} \right) \mp \operatorname{Re}(t_{12}) \sqrt{|t_{12}|^2 - \left(\operatorname{Im} \left(t_{11} e^{-2ik_{\perp} z_1} \right) \right)^2}}, \quad (17)$$

которые, согласно формуле (7), определяются всеми четырьмя элементами трансфер-матрицы, зависящими, в конечном счете, от k_{\perp} в силу однозначной связи χ и k_{\perp} .

Исходя из принципов квантовой механики [26,27], волновая функция электрона вне системы представлена в виде линейной комбинации:

$$\Psi_3^{\pm}(z) = B^{\pm} (e^{-ik_{\perp} z} + S e^{ik_{\perp} z}), \quad (18)$$

с соответствующими коэффициентами B^{\pm} и S -матрицей рассеяния

$$B^{\pm} = B_3^{\pm(1)} + B_3^{\pm(2)}, \quad S = \frac{B_3^{\pm(1)} S^{(1)} + B_3^{\pm(2)} S^{(2)}}{B^{\pm}}. \quad (19)$$

Таким образом, коэффициенты в волновых функциях (6) однозначно определены известными элементами трансфер-матрицы (10).

Поскольку, согласно (7), $E_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_1} = E - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_1}$, то при фиксированном значении k_{\parallel} , осуществив аналитическое продолжение S -матрицы в комплексную плоскость квазиимпульсов $k_{\perp} = k'_{\perp} - ik''_{\perp}$ или энергий $E_{\perp} = E'_{\perp} - iE''_{\perp}$, для определения РЭ и РШ КСС электрона получим уравнения

$$\operatorname{Re}(S(E_{\perp}))^{-1} = 0, \quad \operatorname{Im}(S(E_{\perp}))^{-1} = 0. \quad (20)$$

Волновая функция (6) позволяет, при заданном значении k_{\parallel} , выполнить точный аналитический расчет функции распределения плотности вероятности нахождения электрона в ТБС в зависимости от k_{\perp} (или же от энергии)

$$W(k_{\perp}) = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} |\Psi_{k_{\perp}}(z)|^2 dz = \frac{1}{\pi d} \left[\frac{(dZ^{(1)}(k_{\perp})/dk_{\perp}) - (Z^{(1)}(k_{\perp})/k_{\perp})}{1 + (Z^{(1)}(k_{\perp}))^2} + \frac{(dZ^{(2)}(k_{\perp})/dk_{\perp}) - (Z^{(2)}(k_{\perp})/k_{\perp})}{1 + (Z^{(2)}(k_{\perp}))^2} \right], \quad (d = 2z_1). \quad (21)$$

Как уже отмечалось, с целью упрощения довольно громоздких аналитических выражений в реалистической модели прямоугольных потенциалов в большин-

стве теоретических работ [14–19] эти барьеры аппроксимируются δ -образными той же мощности.

В δ -барьерной модели потенциальная энергия электрона в симметричной ТБС упрощается

$$U(z) = U_0 [\Delta\delta(z) + \Delta_1(\delta(z - z_0) + \delta(z + z_0))], \quad (22)$$

вследствие чего упрощается и уравнение для волновой функции $\Psi_\delta(z)$

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + k_\perp^2 - \frac{2m_1U_0}{\hbar^2} (\Delta\delta(z) + \Delta_1(\delta(z - z_0) + \delta(z + z_0))) \right] \times \Psi_\delta(z) = 0, \quad (23)$$

и граничные условия ($\varepsilon \rightarrow +0$)

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\pm 2}^\delta(\pm(z_0 + \varepsilon)) &= \Psi_{\pm 1}^\delta(\pm(z_0 - \varepsilon)); & \frac{d\Psi_{\pm 2}^\delta(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_0} - \frac{d\Psi_{\pm 1}^\delta(z)}{dz} \Big|_{z=\pm z_0} &= \frac{2m_1U_0}{\hbar^2} \Psi^\delta(\pm z_0) \\ \Psi_{-1}^\delta(-\varepsilon) &= \Psi_{+1}^\delta(+\varepsilon); & \frac{d\Psi_{-1}^\delta(z)}{dz} \Big|_{z=-\varepsilon} - \frac{d\Psi_{+1}^\delta(z)}{dz} \Big|_{z=+\varepsilon} &= \frac{2m_1U_0}{\hbar^2} \Psi^\delta(0) \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

Заметим, что уже из уравнений непрерывности для потоков вероятностей на границах РТС видно, что в δ -барьерной модели полностью теряется информация о разности эффективных масс электрона в ямах и барьерах. Это обстоятельство оказывается главной причиной значительного завышения величин РЭ и РШ.

Дальнейший расчет функций S , D и W в δ -барьерной модели выполняется так же, как и в модели прямоугольных потенциалов.

3. Эволюция и коллапс квазистационарных состояний электрона в симметричных трехбарьерных системах

Эволюцию КСС и их спектральных параметров (резонансных энергий и ширин) в зависимости от геометрических параметров наносистемы будем изучать на примере ТБС $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ с физическими параметрами: $m_0 = 0,089 m_e$, $m_1 = 0,046 m_e$, $a_0 = 5,867 \text{ \AA}$, $a_1 = 5,868 \text{ \AA}$, $U_0 = 516 \text{ мэВ}$. Выбор наносистемы обусловлен тем, что она интенсивно исследуется теоретически [14–18] и экспериментально [10–13], а ее физические параметры удовлетворяют условиям теоретической модели. Далее будем изучать электронные состояния, полагая, что поток перпендикулярен плоскости РТС, т. е. $k_{\parallel} = 0$ и, следовательно, $k = k_{\perp}$, $E = E_{\perp}$.

Прежде чем приступить к анализу эволюции КСС, заметим, что, кроме определенных в предыдущем параграфе коэффициента прозрачности $D(E)$ и функции распределения вероятности $W(E)$ по всему интервалу энергий, был выполнен также расчет функций распределения вероятности $W_n^s(E)$ n -пары резонансов, определенных нормированной суммой двух функций Лоренца

$$W_n^s(E) = \gamma_n \left(\frac{\Gamma_{n\ell}^s/2}{(E - E_{n\ell}^s)^2 + (\Gamma_{n\ell}^s/2)^2} + \frac{\Gamma_{no}^s/2}{(E - E_{no}^s)^2 + (\Gamma_{no}^s/2)^2} \right), \quad (25)$$

где резонансные энергии ($E_{n\ell}^s$ — нижняя, E_{no}^s — верхняя) и ширины ($\Gamma_{n\ell}^s$ — нижняя, Γ_{no}^s — верхняя) определяются действительными и мнимыми частями n -пары комплексных полюсов S -матрицы рассеяния, а коэффициенты γ_n находятся из естественного условия нормировки, заключающегося в следующем. Согласно определению функции распределения $W(k)$, интеграл от нее по квазиимпульсу в интервале между двумя минимумами, содержащем N -пиков, должен равняться числу КСС (N) в этом интервале. Следовательно, и функция распределения $W_n^s(E)$ n -пары резонансов должна удовлетворять этому же требованию

$$\int_{K_{n\min}}^{K_{n\max}} W_n^s(E = E_0 K^2) dK = 2,$$

где

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2md^2}, \quad K_{n\min} = \sqrt{\frac{E_{n-1o}^s + E_{n\ell}^s}{2E_0}},$$

$$K_{n\max} = \sqrt{\frac{E_{n+1\ell}^s + E_{no}^s}{2E_0}}, \quad K_{1\min} = 0.$$

Откуда

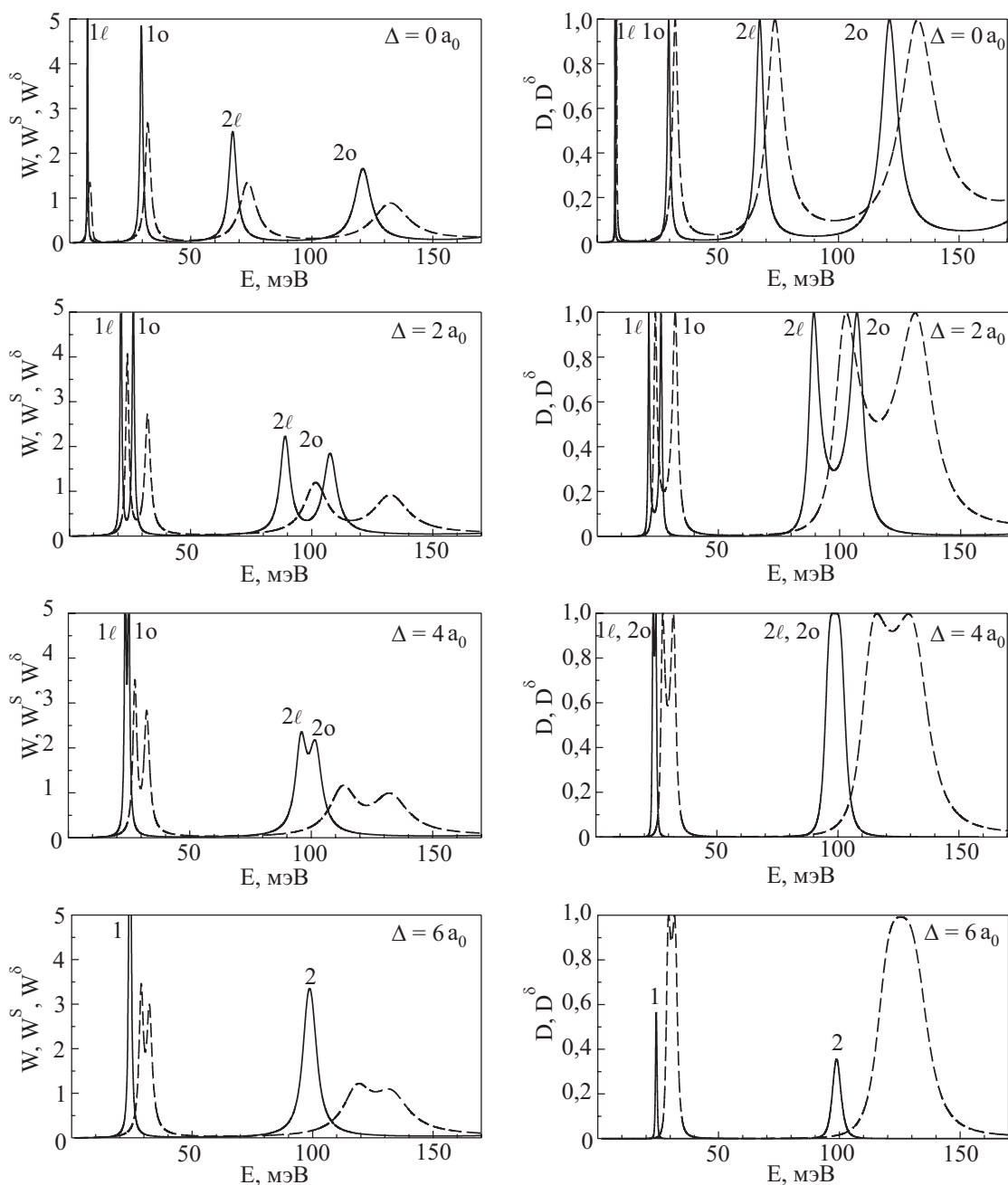


Рис. 2. Эволюция и коллапс первых двух пар КСС электрона при изменении толщины внутреннего барьера Δ в модели прямоугольных (сплошная линия) и δ -образных (штриховая линия) потенциалов симметричной ГБС.

$$\gamma_n = 2 \left[\int_{K_{n\min}}^{K_{n\max}} \left(\frac{\Gamma_{n\ell}^s/2}{(E_0 K^2 - E_{n\ell}^s)^2 + (\Gamma_{n\ell}^s/2)^2} + \frac{\Gamma_{no}^s/2}{(E_0 K^2 - E_{no}^s)^2 + (\Gamma_{no}^s/2)^2} \right) dK \right]^{-1}. \quad (26)$$

Далее будет видно, что для n -пары КСС в двухъямной РТС функция $W_n^s(E)$ по отношению к функции $W(E)$ играет ту же роль, что и функция, определяемая формулой Брейта–Вигнера, по отношению к функции $D(E)$ в одноямной РТС.

На рис. 2 приведены результаты расчетов функций $W(E)$, $W_n^s(E)$ и $D(E)$, выполненные в модели прямоугольных барьеров (сплошные линии) и δ -образных барьеров (штриховые линии). Расчет сделан на при-

мере системы с одинаковыми ширинами обеих ям ($b = 25a_0$) и толщинами внешних барьеров ($\Delta_1 = 2a_0$).

Заметим, что функции $W(E)$ и $W_n^s(E)$ во всей области изменения энергии и геометрических параметров РТС настолько хорошо совпадают между собой, что на рис. 2, 3 не видно разницы между ними. Все три функции ($W(E)$, $W_n^s(E)$ и $D(E)$) характерны тем, что имеют четко выраженные пики, соответствующие квазистационарным состояниям, которые попарно (из-за двухъямности системы) эволюционируют с изменением толщины внутреннего барьера Δ . Эволюция функций в обеих моделях потенциалов качественно одинакова, но по сравнению с прямоугольной в модели δ -образного потенциала соответствующие пики смещены в область больших энергий тем больше, чем выше они расположены в шкале энергий. Согласно принятой терминологии [2,3,14–19], пики на кривых $D(E)$ называют резонансными или просто резонансами. Им однозначно соответствуют резонансные пики функций $W(E)$ и $W_n^s(E)$.

С увеличением толщины внутреннего барьера Δ от нуля до бесконечности при фиксированных размерах ям (b) и толщин внешних барьеров (Δ_1) РТС постепенно превращается из прозрачной одноямной (размером $2b$) в две непрозрачные (размерами b), разделенные непроницаемым барьером ($\Delta \rightarrow \infty$). При этом

происходит сложная эволюция резонансов на кривых $W(E)$, $W_n^s(E)$ и $D(E)$. Чтобы ее исследовать, целесообразно ввести индекс $n = 1, 2, 3, \dots$, нумерующий последовательно пары резонансных комплексов на кривых. Пока толщина внутреннего барьера Δ такова, что оба пика (нижний ℓ и верхний o) в n -паре разделены, эти индексы фигурируют рядом с индексом пары ($n\ell, no$; рис. 2 при $\Delta = 0a_0; 2a_0; 4a_0$). При больших значениях Δ , когда оба резонанса из n -пары уже слились в один (рис. 2 при $\Delta = 6a_0$) — фигурирует только индекс n , нумерующий сколлапсировавшую пару.

На рис. 2 видно, что с увеличением Δ оба пика в каждой паре на кривых $D(E), W(E), W^s(E)$ сближаются между собой, постепенно образуя двойной резонансный комплекс сложной формы.

Характер зависимости всех резонансных комплексов от Δ одинаков, поэтому на графиках функций $D(E), W(E), W^s(E)$ (рис. 3) детально показана эволюция лишь первого из них. Поскольку в масштабе рисунка разница между функциями $W(E)$ и $W^s(E)$ практически не видна, то для примера там приведена зависимость от энергии обеих слагаемых функции $W^s(E)$ (штриховые линии) при двух значениях толщины $\Delta = 4a_0; 6a_0$. На рисунке хорошо видны главные черты образования и развития двойных резонансных комплексов с увеличением толщины барьера Δ . При

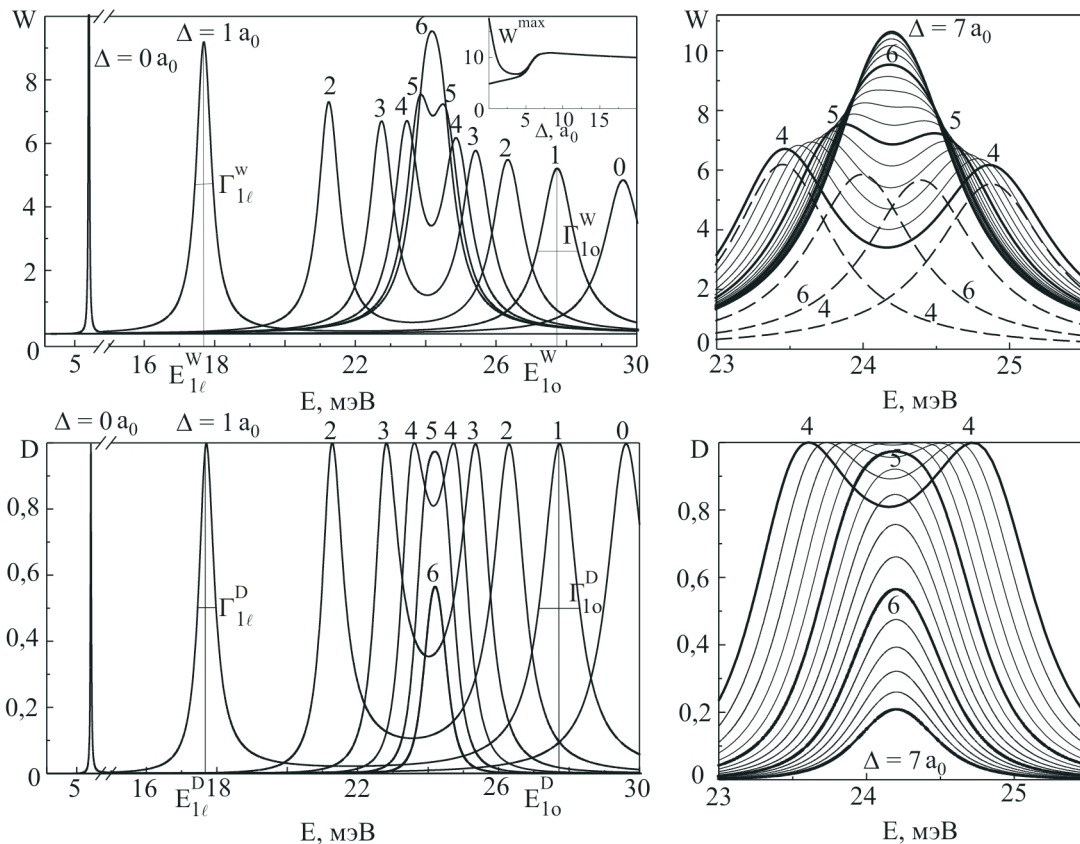


Рис. 3. Детальная картина эволюции и коллапса первой пары электронных резонансов в ТБС.

малых значениях толщины $\Delta \approx 0-2a_0$ оба пика ($1\ell, 1o$) функций $D(E)$ и $W(E)$ имеют форму кривых лоренцевого типа. В связи с этим для каждого из двух пиков комплекса на кривой $D(E)$ вводятся два спектральных параметра, которые однозначно характеризуют КСС, соответствующие этим пикам: резонансные энергии ($E_{1\ell}^D, E_{1o}^D$), определяемые положениями их максимумов в шкале энергий (точнее точек касания линии касательной к этой же паре пиков); резонансные ширины ($\Gamma_{1\ell}^D, \Gamma_{1o}^D$) — интервалы энергий между точками, возникающими на каждом из пиков при пересечении их горизонтальной линией, проходящей через середины высот пиков.

С дальнейшим увеличением толщины ($\Delta \approx 2-4,8 a_0$) оба пика функции $D(E)$, сближаясь все больше, перекрываются, образуя двугорбую кривую сложной формы. При критической толщине барьера $\Delta_k^D \geq 4,8a_0$ происходит коллапс: величины резонансных энергий первой пары совпадают ($E_{1\ell}^D = E_{1o}^D$), образуется один пик не лоренцевой формы с одним максимумом функции $D(E_{1\ell}^D = E_{1o}^D = E_{1o}^D) = 1$. Дальнейшее увеличение толщины ($\Delta > \Delta_k^D$) приводит к тому, что величина $\max D$ постепенно уменьшается, соответствующее этому максимуму значение резонансной энергии E_1^D практически не меняется в шкале энергий, а резонансная ширина Γ_1^D , характеризующая размер пика комплекса, осуществляет эволюцию, которая будет детально проанализирована далее.

На рис. 3 видно, что при изменении толщины барьера в интервале $0 \leq \Delta \leq \Delta_k^D$, в отличие от функции D , оба пика которой имеют равные значения максимумов ($\max D_{1\ell} = \max D_{1o} = 1$), пики функции W имеют разные значения максимумов ($\max W_{1\ell} > \max W_{1o}$). В связи с этим для однозначности определения спектральных параметров электрона через функцию W в интервале $0 \leq \Delta \leq \Delta_k^W$ (Δ_k^W — точка коллапса по W) необходимо использовать две точки касания касательной прямой к обоим пикам комплекса, определяемые функцией W . Ясно, что, кроме малой окрестности Δ_k^W , обе точки касания практически совпадают с соответствующими им точками максимумов W . Но начиная со значения Δ , при котором максимум верхнего пика ($\max W_{1o}$) исчезает из-за его поглощения правым крылом нижнего пика, правая точка касательной к W остается вполне определенной вплоть до критического значения Δ_k^W , при котором обе точки касания сходятся в одну — происходит коллапс по спектральным параметрам W (рис. 3).

Таким образом, способ нахождения спектральных параметров n -пары двойного резонансного комплекса по функции W вполне определен. Положения пары касательных точек в шкале энергий определяют значения резонансных энергий нижнего $E_{n\ell}^W$ и верхнего E_{no}^W состояния n -пары до коллапса. По положению в шкале

энергий n -максимума W можно найти резонансную энергию (E_n^W) после коллапса ($\Delta_k < \Delta$). Интервал энергии между $E_{n\ell}^W$ и положением в шкале энергий левой точки пересечения функции $W_n(E)$ с прямой, параллельной оси абсцисс, проходящей от нее на расстоянии половины $\max W_{n\ell}$, определяет резонансную полуширину $\Gamma_{n\ell}^W/2$ нижнего КСС, а интервал энергий между E_{no}^W и положением в шкале энергий правой точки пересечения функции $W_n(E)$ с такой же прямой на расстоянии половины $\max W_{no}$ — резонансную полуширину ($\Gamma_{no}^W/2$) верхнего КСС n -пары до коллапса. После коллапса ($\Delta \geq \Delta_k$) резонансная ширина (Γ_n^W) n -комплекса, как и должно быть, автоматически совпадает с удвоенной полушириной нижнего КСС.

Определенные таким образом резонансные энергии и ширины позволили выполнить расчет этих параметров в обеих моделях потенциалов (прямоугольных и δ -образных) и изучить их эволюцию при изменении толщин барьеров ТБС.

На рис. 4 приведены результаты расчета РЭ и РШ первых двух пар резонансов при двух разных толщинах внешних барьеров ($\Delta_1 = 1a_0; 2a_0$), рассчитанные в модели прямоугольных барьеров и, для сравнения, в модели δ -образных потенциалов при одной толщине внешних барьеров ($\Delta_1 = 1a_0$) при $b = 25a_0$. Там же приведены РЭ (E_n^S) и РШ (Γ_n^S), найденные из комплексных полюсов S -матрицы. На рис. 4 хорошо видны как свойства эволюции спектральных параметров, которые частично уже упоминались нами раньше, так и другие, более тонкие особенности. Прежде чем их проанализировать, заметим, что приведенная на рис. 4 эволюция РЭ ($E_{n\ell}^D, E_{no}^D, E_n^D$) в δ -барьерной модели точно соответствует результатам, впервые полученным в работе [22] в такой же модели. Сравнить же результаты эволюции РШ невозможно, так как в цитируемой работе этот параметр не определялся.

На рис. 4 видно, что δ -барьерная модель качественно верно описывает эволюцию спектральных параметров РТС, но по отношению к более реалистичной модели прямоугольных барьеров она завышает значения РЭ до 20%, а РШ — в два раза. Таким образом, поскольку физические характеристики ТБС (например, обобщенная проводимость) очень чувствительны к спектральным параметрам [14–18], то ясно, что δ -барьерная модель не может быть надежной основой теории, претендующей на числовое сравнение с экспериментом.

Возвращаясь к анализу зависимости спектральных параметров от толщины Δ в модели прямоугольных потенциалов, заметим, что эволюция резонансных энергий и ширин, определяемых функциями D и W , не только качественно подобна, но и величины соответствующих спектральных параметров близки между собой. Однако, поскольку $\Delta_{nk}^D < \Delta_{nk}^W$, то картина коллапса спектральных параметров W несколько смеще-

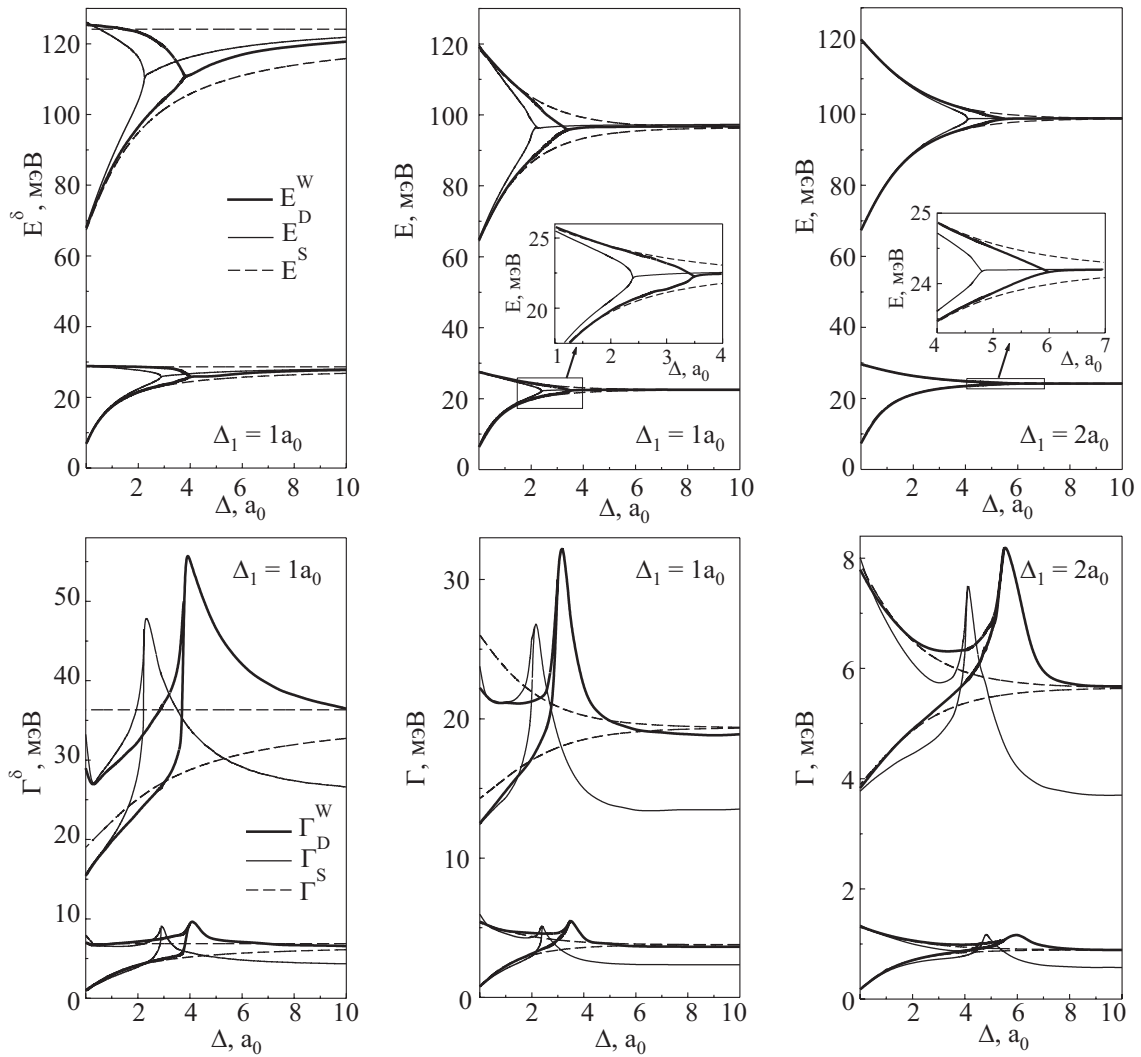


Рис. 4. Эволюция и коллапс спектральных параметров первых двух пар КСС электрона в ТБС.

на в область больших значений Δ по отношению к картине коллапса тех же параметров D .

С увеличением Δ от нуля до Δ_{nk}^D соответствующие величины E_{nl}^D и E_n^w ; E_{no}^D и E_n^w ; Γ_{nl}^D и Γ_n^w ; Γ_{no}^D и Γ_n^w сначала близки между собой, а затем разница между ними увеличивается, достигая максимального значения при Δ_{nk}^D (см. рис. 4). Величины РЭ n -пары в обеих моделях потенциалов и в обоих методах расчета (D и W) всегда находятся между нижними и верхними значениями РЭ той же пары, определяемых действительными полюсами S -матрицы. При этом значения РШ при $\Delta < \Delta_k$ в моделях потенциала и в методах расчета сначала несколько меньше, чем соответствующие им S -матричные РШ. В окрестности критической толщины внутреннего барьера Γ_{nl}^w , Γ_{no}^w и Γ_{nl}^D , Γ_{no}^D превышают Γ_{nl}^s , Γ_{no}^s . Если же толщина Δ значительно превышает критическую ($\Delta \gg \Delta_k$), то Γ_{nl}^s , Γ_{no}^s асимптотически совпадают с Γ_n^w , а $\Gamma_n^D < \Gamma_n^w$. На рис. 4 видно, что в отличие от прямоугольной, в δ -барьерной модели с увеличением толщины Δ резонансные энергии E_n^D и E_n^w после кол-

лапса стремятся к E_{no}^s , резонансная ширина Γ_n^w к Γ_{no}^s , а величина Γ_n^D уменьшается.

Сходство и различие эволюции и коллапса спектральных параметров, определяемых функциями $D(E)$ и $W(E)$, понятны как с математических, так и с физических соображений. Математически функция $D(E)$ определяется только одним элементом трансфер-матрицы T , тогда как функция $W(E)$ — всеми элементами этой матрицы. Поэтому при таких геометрических параметрах РТС (например, при $\Delta \ll \Delta_k$), когда все элементы T -матрицы, кроме входящего в D , малы — спектральные параметры $D(E)$ и $W(E)$ близки. В общем случае все элементы T -матрицы соразмерны, поэтому функции $D(E)$ и $W(E)$ различны, а значит, и их спектральные параметры могут иметь достаточно различные величины.

С физической точки зрения ясно, что резонансные энергии и ширины КСС электрона в открытой РТС, подобно спектру энергий в закрытой наносистеме, должны формироваться только ее внутренними физи-

ческими и геометрическими параметрами. Этому требованию удовлетворяют спектральные параметры функции $W(E)$ распределения вероятности нахождения квазичастицы в пределах РТС, так как эта величина зависит только от внутренних характеристик системы в отличие, например, от сечения рассеяния σ или коэффициента прохождения D , которые кроме внутренних характеристик зависят и от характера физического воздействия на РТС. В частности, коэффициент $D(E)$ зависит от плотности вероятности внешнего потока квазичастиц, проникающих сквозь систему. Разница эволюции спектральных параметров двойного резонансного комплекса до и после коллапса объясняется [19,22] фазовым переходом второго рода, по параметру асимметрии, который характеризует относительную разницу интегральной вероятности обнаружения туннелирующего электрона в первой и второй ямах.

Наконец отметим следующее. Вывод авторов работы [22] о том, что «коллапс резонансов не может быть описан на языке полюсов матрицы рассеяния» несомненно справедлив в том смысле, что действительные и мнимые полюса S -матрицы непосредственно не совпадают с РЭ и РШ при любых значениях параметров РТС. Однако с учетом того, что найденная в работе приближенная функция W^S распределения вероятности пребывания электрона в РТС, определенная нормированной суммой двух функций Лоренца с РЭ и РШ, равными действительным и мнимым величинам комплексных полюсов S -матрицы, хорошо описывает эволюцию и коллапс спектральных параметров пар резонансов при любых толщинах Δ , можно считать, что в этом (расширенном) смысле язык полюсов S -матрицы может быть применим как для исследования двойных комплексов, так, по-видимому, и для комплексов большей мультиплетности в многослойных РТС.

Заключение

На основе двух моделей (прямоугольных и δ -образных потенциальных барьеров) симметричной ТБС с использованием трансфер-матрицы и матрицы рассеяния предложена теория спектральных параметров (резонансных энергий и ширин) электронов, определяемых функцией распределения вероятности $W(E)$ и коэффициентом прозрачности $D(E)$.

На примере ТБС $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ показано, что в обеих моделях с увеличением толщины внутреннего барьера Δ происходит качественно одинаковая эволюция и коллапс РЭ ($E_{nl}^D, E_{nl}^W; E_{no}^D, E_{no}^W$) и РШ ($\Gamma_{nl}^D, \Gamma_{nl}^W; \Gamma_{no}^D, \Gamma_{no}^W$) n -пар КСС. Критические толщины внутренних барьеров, при которых происходит коллапс спектральных параметров, определяемых функциями $D(E)$ и $W(E)$, хотя и близки между собой, но всегда $\Delta_{nk}^W \geq \Delta_{nk}^D$. Коллапс спектральных параметров в модели прямоугольных барьеров происходит

при критических толщинах Δ_{nk} , незначительно превышающих суммарную толщину внешних барьеров, а в модели δ -барьеров величина Δ_{nk} может значительно превышать суммарную толщину внешних барьеров (тем больше, чем больше их толщина).

Поскольку по отношению к более адекватной модели прямоугольных барьеров, δ -модель завышает значение РЭ на десятки процентов, а РШ — почти в два раза, то она не может служить достаточной базой для количественной теории физических параметров, чувствительных к величинам РЭ и РШ. Это обстоятельство необходимо учитывать, например, в теории электромагнитного излучения квантовых когерентных лазеров при оценке мощности излучения, пороговых токов и других физических величин.

Показано, что найденная приближенная функция $W^S(E)$ распределения вероятности пребывания электрона в РТС, определенная нормированной суммой двух лоренцевых функций с РЭ и РШ, которые равны действительным и мнимым величинам комплексных полюсов S -матрицы, хорошо описывает эволюцию и коллапс спектральных параметров электрона во всех интервалах изменения геометрических параметров ТБС.

Решение нестационарного уравнения Шредингера для электрона в исследованной модели РТС позволяет рассчитать измеряемую величину — динамическую проводимость системы, что предполагается выполнить в следующей работе.

1. I.V. Tokatly, A.G. Tsibizov, and A.A. Gorbatsevich, *Phys. Rev.* **B65**, 165328 (2002).
2. В.Ф. Елесин, Ю.В. Копаев, *ЖЭТФ* **123**, 1308 (2003).
3. Е.И. Голант, А.Б. Пашковский, *ФТП* **36**, 330 (2002).
4. М. Tkach, V. Holovatsky, and O. Voitsekivska, *Physica* **E11**, 17 (2001).
5. Н. Ткач, А. Маханец, Г. Зегря, *ФТП* **36**, 543 (2002).
6. Н. Ткач, А. Маханец, *ФТП* **47**, 550 (2005).
7. J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho, *Science* **264**, 553 (1994).
8. J. Faist, F. Capasso, and C. Sirtori, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 538 (1995).
9. C. Gmachl, F. Capasso, E.E. Narimanov, J.U. Nockel, A.D. Stone, J. Faist, D.L. Sivco, and A.Y. Cho, *Science* **280**, 1556 (1998).
10. S. Blaser, M. Rochat, and M. Beck, J. Faist, *Phys. Rev. Lett.* **B61**, 8369 (2000).
11. C. Gmachl, F. Capasso, D.L. Sivco, and A.Y. Cho, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 1533 (2001).
12. A. Orihashi, B. Suzuki, and C. Asada, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 233501 (2005).
13. S. Haas, T. Stroucken, M. Hьbner, J. Kuhl, B. Grote, A. Knorr, F. Jahnke, S. W. Koch, R. Hey, and K. Ploog, *Phys. Rev.* **B57**, 14860 (1998).
14. В.Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **127**, 131 (2005).
15. В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, *ФТП* **39**, 1106 (2005).
16. В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, *ФТП* **42**, 586 (2008).
17. А.Б. Пашковский, *Письма ЖЭТФ* **82**, 228 (2005).

18. Э.А. Гельвич, Е.И. Голант, А.Б. Пашковский, *Письма ЖТФ* **32**, 13 (2006).
19. Wim Vanroose, *Phys. Rev.* **A64**, 062708 (2001).
20. Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, Г.Г. Зегря, *Письма ЖТФ* **33**, 70 (2007).
21. Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, *ФТП* **43**, 357 (2009).
22. А.А. Горбачевич, М.Н. Журавлев, В.В. Капаев, *ЖЭТФ* **134**, 338 (2008).
23. В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, М.А. Ремнев, *ФТП* **43**, 269 (2009).
24. Н.В. Ткач, Ю.А. Сети, *ФТТ* **51**, 979 (2009).
25. G.H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductor*, Cambridge University Press, Cambridge (1998).
26. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* Физматлит, Москва (2002).
27. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).

Evolution and collapse of electron quasi-stationary states in plane symmetric three-barrier resonance-tunnel structures

N.V. Tkach and Ju.A. Seti

A theory of evolution and collapse of resonance pairs due to variations in inner barrier strength (thickness) is developed by using the model of effective masses and symmetric rectangular potential barriers for an electron in the plane three-barrier structure. The analytical and numerical calculations of spectral parameters (resonance energy and width) are performed with the use of transparent coefficient and probability distribution function within the transfer matrix and scattering S -matrix. It is shown that the collapse of resonance energies and widths of all quasi-stationary states in the symmetric three-barrier structure happens almost at the same values of inner barrier width, which are somewhat larger than the sum of outer thicknesses. It is found that the δ -model as compared to the rectangular barrier one, gives much higher values of resonance energies (by the order of percents) and resonance widths (almost twice).

PACS: 73.21.Fg Quantum wells;
73.90.+f Other topics in electronic structure and electrical properties of surfaces, interfaces, thin films, and lowdimensional structures.

Keywords: collapse, resonance-tunnel structure, electron.