

8.1.1. Узагальнення методу ефективної маси

Рух електронів в гетероструктурах можна описати багаточастинковим рівнянням Шредінгера, яке рядом апроксимацій зводиться до системи *незалежних* між собою рівнянь для кожного з електронів [8.6, с. 25]:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (8.1)$$

де ψ – одноелектронна хвильова функція, E – енергія електрона, \hat{H} – оператор Гамільтона в одноелектронному наближенні,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad (8.2)$$

в якому m – маса спокою електрона, \hbar – стала Планка, $V(\mathbf{r})$ – потенціальна енергія електрона в полі всіх інших електронів та іонів, що не змінюється при зміщенні на вектор трансляції \mathbf{a} : $V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$ – неперіодична¹ частина потенціальної енергії електрона, яка обумовлена зовнішніми полями, зокрема розривами екстремумів зон у гетероструктурах, прикладеною напругою та об'ємним зарядом.

Для розв'язання рівняння Шредінгера в *масивному* напівпровіднику існує простий метод, який дозволяє позбавитися розгляду члену $V(\mathbf{r})$. Це так званий *метод ефективної маси*. Він базується на тому, що поблизу екстремумів зон рівняння (8.1) з Гімільтоніаном (8.2) можна представити рівнянням (8.1) з Гімільтоніаном:

¹ В окремому випадку $U(\mathbf{r})$ може містити періодичну складову. Цей випадок відповідає надрешітці.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}), \quad (8.3)$$

Функції, що є розв'язком рівняння Шредінгера з Гамільтоніаном (8.3), коректно називати «огинаючими хвильової функції», а не просто «хвильовими функціями». Така назва обумовлена тим, що при $U(\mathbf{r}) = \text{const}$ розв'язком (8.1) є функції Блоха: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, де функція $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ повторює періодичність решітки та суттєво змінюється протягом періоду решітки. Множник $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ поблизу екстремумів зон змінюється на періоді решітки повільно, тому він фактично є огинаючою всієї хвильової функції. Якщо $U(\mathbf{r})$ повільно змінюється на періоді решітки, то можна показати, що це практично не вплине на $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$; натомість зміна відобразиться на другому члені [8.7, р. 123]. Скажімо, в $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ можна ввести залежність хвильового вектору від координати $\mathbf{k}(\mathbf{r})$ або ж замінити $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на $\chi(\mathbf{r})$, що повільно змінюється: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r})\mathbf{r}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$. Функція $\chi(\mathbf{r})$ фактично і є шуканою в рівнянні (8.1) з Гамільтоніаном (8.3); природно, що її теж називають «огинаючою». Далі, однак, будемо позначати огинаючу хвильової функції через $\psi(\mathbf{r})$, якщо не буде вказано інше.

Метод ефективної маси використовується в традиційній електроніці зокрема для розрахунку локалізованих станів електрона в кристалі [6, с. 66]. Його з деякими модифікаціями використовують і для розв'язання рівняння Шредінгера в гетероструктурах, про що йтиметься далі.

Якщо вважати, що $U(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді:

$$U(\mathbf{r}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z),$$

то рівняння (8.3) розпадеться на три незалежних рівняння:

$$\hat{H}_x \psi_x = E_x \psi_x, \quad (8.4)$$

$$\hat{H}_y \psi_y = E_y \psi_y, \quad (8.5)$$

$$\hat{H}_z \psi_z = E_z \psi_z, \quad (8.6)$$

а його розв'язок можна буде шукати у вигляді: $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$; $E = E_x + E_y + E_z$ [8.8, с. 87]. Тут $\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z)$; аналогічно визначаються \hat{H}_x та \hat{H}_y .

Розглянемо структуру з поперечним транспортом, що містить гетерограниці, які задані рівняннями $z = \text{const}$. Згідно поданого визначення структури з поперечним транспортом складові $U_x(x)$, та $U_y(y)$ можна відповідним вибором початку відліку потенціальної енергії прирівняти до нуля. Тому рівняння (8.4) та (8.5) будуть мати тривіальні розв'язки у вигляді плоских хвиль:

$$\psi_{\parallel} \sim \psi_x \psi_y e^{i(k_x x + k_y y)} \equiv e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r})}.$$

Натомість, у напрямку $0z$ слід розв'язувати рівняння Шредінгера (8.6), яке у розкритому вигляді записується:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + U(z) = E_z \psi_z, \quad (8.7)$$

В подальшому нас цікавитиме лише складова огинаючої ψ_z , яку ми будемо називати, опускаючи індекс, через ψ .

8.2.2. Граничні умови

Найпростішим компонентом гетероструктури є гетерограниця. Розглянемо процеси, що відбуваються поблизу границі двох

матеріалів А та Б, що знаходиться в площині $z = a$. Відомо, що потенціальна енергія електрона зони провідності зазнає різкої зміни на гетерограниці, у першому наближенні – стрибкоподібної. Різні приклади гетерограниць зображені на рис. 8.1. Крім того, стрибкоподібної зміни зазнає також ефективна маса, яка у матеріалах А та Б в загальному випадку різна.

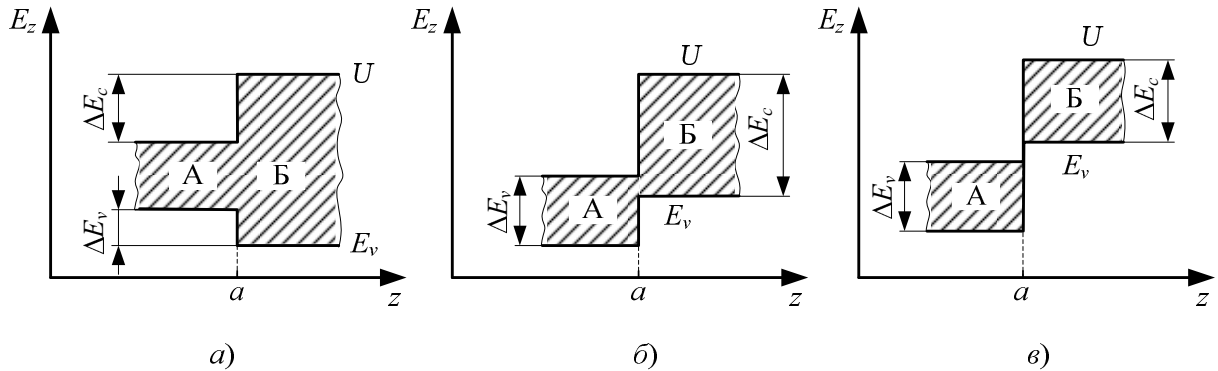


Рис. 8.1. Типи гетеропереходів: **а)** перехід I типу (А-Б = GaAs-AlGaAs; GaSb-AlSb; GaAs-GaP; InGaAs-InAlAs; InGaAs-InP); **б)** перехід II типу (А-Б = InP-Al_{0.48}In_{0.52}As; InP-InSb; BeTe-ZnSe; GaInP-GaAsP; Si-SiGe); **в)** перехід III типу (А-Б = InAs-GaSb).

Розглянемо електрон у зоні провідності (ЗП) поблизу гетерограниці GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As, що знаходиться в площині $z = a$. На границі цієї гетеропари відбувається рух електронів провідності в рамках Γ -долини, яка є найнижчою для обох сполук. Саме для такого випадку подаються подальші викладки.

Запишемо рівняння Шредінгера для огинаючої хвильової функції в околиці площини $z = a$ ліворуч та праворуч:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_A = E_z \psi \quad (z = a^+) \quad (8.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_B = E_z \psi \quad (z = a^-), \quad (8.9)$$

де індексами «А» та «Б» позначені відповідні величини в сполуках «А» та «Б».

Позначимо розв'язки рівнянь (8.8) та (8.9) через ψ_A та ψ_B відповідно. Вважається, що на гетерограниці періодична складова хвильової функції $u_{nk}(\mathbf{r})$ та її похідна неперервні [8.9, р. 67]. Тоді з вимоги до неперервності хвильової функції слідує неперервність її огинаючої, і мусимо покласти:

$$\psi_A(a) = \psi_B(a). \quad (8.10)$$

Зі звичайного рівняння Шредінгера можна отримати закон збереження густини потоку ймовірності, який визначається за формулою: $\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$ [8.8, с. 81]. Запишемо вирази для z -проекцій потоків густини ймовірності в огинаючій хвильової функції у площинах $z = a^+$ та $z = a^-$, J_A та J_B відповідно:

$$J_A = \frac{i\hbar}{2m_A} \left(\psi_A^* \frac{d\psi_A}{dz} - \psi_A \frac{d\psi_A^*}{dz} \right), \quad (8.11)$$

$$J_B = \frac{i\hbar}{2m_B} \left(\psi_B^* \frac{d\psi_B}{dz} - \psi_B \frac{d\psi_B^*}{dz} \right). \quad (8.12)$$

Виконання фундаментального закону збереження густини потоку ймовірності в квантовій механіці слідує зі звичайного рівняння Шредінгера. Цей закон автоматично виконується для рівняння Шредінгера зі звичайною, сталою масою електрона. Але у площині точці $z = a$, відповідно до прийнятої моделі, ефективна маса зазнає стрибкоподібної зміни. Тому для виконання закону збереження необхідно примусово накласти умову:

$$J_A = J_B, \quad (8.13)$$

з чого слідує, що

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\psi_A}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\psi_A}{dz}. \quad (8.14)$$

Рівняння (8.10) та (8.14) являють собою загальні вимоги до огинаючої хвильової функції та її похідної на гетерограниці, і є хорошими наближеннями для більшості гетерограниць. Їх можна записати в неявному, однак компактному вигляді, внівши під першу похідну в (8.7) ефективну масу:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d^2\psi_z}{dz^2} + U(z) = E_z \psi_z. \quad (8.15)$$

Рівняння (8.15) широко застосовується при моделюванні електронного транспорту в гетероструктурах; його також застосовують, коли ефективна маса змінюється плавно. Останнього ефекту можна досягти, наприклад, змінюючи молярну долю x в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ від нуля до 33% протягом кількох нанометрів. Такі структури називаються «варізонними». Їх дозволяють виготовляти сучасні технології:

- молекулярно-променевої епітаксії (англ. абревіатура – *MBE*);
- хімічне випаровування металоорганічних сполук з газової фази (*MOCVD*).

Рівняння (8.15) часто називають *рівнянням Шредінгера з ефективною масою*². Воно є ключовим компонентом так званого „методу огинаючої хвильової функції”, що застосовується для моделювання гетероструктур. Назва цього методу є синонімом

² англ.: *effective mass Schrodinger equation*

методу ефективної маси. У вітчизняній літературі часто опускають слово «огинача» та говорять просто «метод хвильових функцій».

8.2. ПРИНЦИПИ ПОБУДОВИ МОДЕЛЕЙ

8.2.1. Структурні складові напівпровідникового компоненту з вертикальним транспортом

Для визначеності розглянемо топологію резонансно-тунельного діоду (рис. 2, а), гетерошари якого виготовленого з $\text{Al}_{0.33}\text{GaAs}_{0.77}/\text{GaAs}$. РТД є однією з найпростіших структур з поперечним транспортом.

У площині гетерограниць його розміри мають значення від одиниць до кількох десятків мікрометрів, що значно більше за період решітки (який для GaAs складає ≈ 0.56 нм), а також характерні розміри $\lambda_{\text{ф}}$ та $L_{\text{ф}}$, і є величиною одного порядку з довжиною вільного пробігу, L_p .

Як видно з рис. 8.2, а у структурі можна виділити три підсистеми: макроскопічні області, що прилягають до контактних площадок, а також мікроскопічну область, що знаходиться поміж ними. Релевантна частина мікроскопічної області досить сильно легується домішками n -типу (зазвичай не менше за 10^{23} м^{-3}), у той час як мікроскопічну область лишають чистою від домішок. Ці області мають усталені в літературі імена:

- *лівий резервуар* – це нижня високолегована область на рис. 8.1, а, б. Лівий резервуар безпосередньо з'єднаний з електродом емітера (рис. 8.2, а);

- *правий резервуар* – це верхня високолегована область. Він з'єднаний з колекторним електродом;
- *квантова (активна) область* – нелегована область між двома резервуарами, частина якої показана у збільшеному масштабі на рис. 8.2, б.

Такий поділ, як буде показано нижче, дає можливість створювати так звані «комбіновані» моделі [8.10], які зветься так тому, що при їх побудові для різних ділянок одного пристрою використовуються різні способи опису електронного колективу: для резервуарів – напівкласичний, а для квантової області – різноманітні квантово-механічні формалізми, в тому числі *метод хвильових функцій*. Створення комбінованих моделей є альтернативою опису в рамках єдиного квантово-механічного формалізму усього пристрою, який призводить до невиправдано високої інтенсивності використання математичних та чисельних ресурсів без суттєвої підвищення точності моделі.

Зауважимо, що відомі на сьогодні пристрої наноелектроніки, включаючи нанотрубки, одноелектронні транзистори та інші перспективні компоненти, неодмінно містять класичні області. Нам здається, що будь-який компонент чи система наноелектроніки мусить містити на якомусь рівні своєї ієрархії «класичну» область, якщо він претендує на корисність квантова теорія не є самостійною теорією та потребує у якості свого граничного випадку класичну механіку [8.8, с. 15]. Зокрема, класична область необхідна для виконання вимірювання [8.11, с. 77].

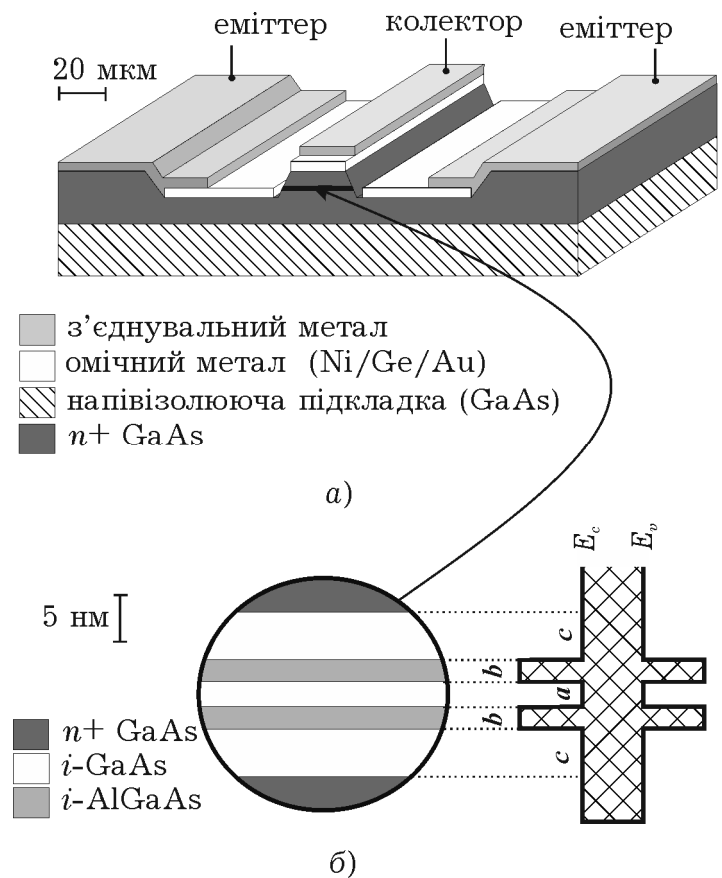


Рис. 8.2. Структура резонансно-тунельного діоду (а) та активної області та зона діаграма (б)

8.2.2. Методика розрахунку струму

Підхід до розрахунку струму через структури з поперечним електронним транспортом є подібним до того, що був розглянутий у розд. 1.5: мікроскопічна система, яку ми, користуючись загальноприйнятою термінологією, називаємо тут «квантова область» описується, фактично, як центр розсіювання. Останній може бути охарактеризований, зокрема, матрицею розсіювання або матрицею передачі електронних хвиль, а також компонентами згаданих матриць: коефіцієнтами проходження та відбивання. Оскільки кінцевою метою будь-якого моделювання статичних характеристик є вольт-амперна характеристика, почнемо з опису методики розрахунку струму через РТД.

Найпростіше припущення, що впливає з прийнятої в комбінованих моделях квазікласичності електронного колективу в резервуарах, є припущення про те, що електронний газ у них знаходиться у стані локальної термодинамічної рівноваги – кожен зі своїм резервуаром. Тож електронний газ може бути охарактеризований статистикою Фермі-Дірака з параметрами $E_{\Phi 1}$ та $E_{\Phi 2}$. Причому, якщо прикладена напруга дорівнює V , то $E_{\Phi 2} = E_{\Phi 1} - eV$. Вважається, як і у формалізмі Ландауера-Буттікера (розд. 1.5), що резервуари поглинають усі електрони, що потрапляють до них.

Оскільки квантова область є нелегованою (для GaAs концентрація електронів у ній $n_i = 2.1 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$ за температури 300 К), а резервуари – сильнолеговані ($N_d \sim 10^{24} \text{ м}^{-3}$), то більш ніж виправданим є припущення про те, що *основна частина заряду, що потрапляє у квантову область, потрапляє туди з лівого чи правого резервуарів*. Цей процес нагадує процес термоелектронної емісії, що має місце у вакуумних діодах [8.12, с. 194], однак в даному випадку електрони емітуються не лише з «катоду», але й «анода». Аналогія є, звичайно, обмеженою, і простежується тому, що механізмом руху електронів в обох випадках балістичний, а не дрейфовий.

Сумарний струм, який протікає через квантову область, можна розрахувати як суперпозиція струмів, які створюються електронами, що потрапляють туди з лівого та правого резервуару

(в англійській літературі застосовуються терміни „*left-going electrons*” та „*right-going electrons*”). Густини останніх позначимо, відповідно, через \mathbf{J}_{12} та \mathbf{J}_{21} , а сумарну густину струму – через \mathbf{J} :

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{12} + \mathbf{J}_{21}.$$

Вважається, що потоки електронів, які походять з лівого та правого резервуарів, між собою не взаємодіють, як і окремі електрони у потоці. Взаємодія, однак, може бути врахована ефективно, якщо вважати, що кожен електрон рухається у полі кристалічної решітки та полі, що його створюють решта електронів – так зване наближення Хартрі [8.8, с. 311], [8.13, с. 71]. Вважається, що площа шарів гетероструктури настільки велика, що струм силою I розподіляється рівномірно по поперечному (відносно осі Oz) перерізу S , тобто густина струму $\mathbf{J} = \mathbf{e}_s \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta I}{\Delta S} = \mathbf{e}_s \lim_{\forall \Delta S} \frac{\Delta I}{\Delta S} = \mathbf{e}_z \frac{I}{S} \equiv \mathbf{e}_z J_z$, де \mathbf{e}_s та \mathbf{e}_z – одиничний вектор, що перпендикулярний елементу поверхні ΔS та орт осі Oz відповідно. Надалі єдину ненульову складову густини струму будемо позначати J : $J \equiv J_z$.

Оскільки потоки електронів з лівого та правого резервуару не зміщуються між собою, то для кожного потоку окремо має виконуватися закон неперервності струму, який виражається в тому, що густина струму у кожній точці є сталою: $dJ_{12(21)}/dz = 0$.

Виходячи з прийнятих припущень, густину струму через РТД можна розраховувати зокрема так:

$$J = J_{12}(z_R) + J_{21}(z_L), \quad (8.16)$$

z_R та z_L – права та ліва границя квантової області. Тобто для електронів з лівого резервуару розрахувати струм в одній точці, а для електронів з правого – в іншій. Зауважимо, що в точках z_L та z_R електрон можна вважати квазікласичною частинкою (це граничні точки класичної області), тому йому властиве детерміноване значення швидкості \mathbf{v}

Розглянемо рух одного окремого електрона, що знаходиться в точці z_R . Електрон зі швидкістю v створює елементарний струм $j = ev_z$. Густина струму, що його створюють електрони, які мають швидкості в межах від $v_z = \frac{\hbar k_z}{m^*}$ до $v_z + dv_z$ (або, що те ж саме, електрони, значення хвильового вектора яких лежать в межах від k_z до $k_z + dk_z$):

$$dj_{12} = e v_z dn(z_R) = e \frac{\hbar k_z}{m^*} dn(z_R), \quad (8.17)$$

де $dn(z_R)$ – концентрація електронів в точці z_R , що мають швидкості у вищезазначених межах.

Концентрація $dn(z_R)$ визначається як $dn(z_L)$ (далі просто dn), помножена на коефіцієнт проходження електрона через квантову систему T , тому що тільки $dn \cdot T$ електронів досягає правого резервуара³. Умовно це зображено на рис. 8.3. Зауважимо, що коефіцієнт проходження залежить від поперечної енергії електронів, що емітують з того чи іншого резервуару: $T = T(E_z)$.

Саме знаходження коефіцієнту проходження T є головною проблематикою моделювання структур з вертикальним транспортом, оскільки перший визначає електричні властивості мікроскопічної системи. При виведенні формули для густини струму будемо вважати, що коефіцієнт проходження нам відомий.

³ більш коректно вважати, що досягають правого резервуару $dn \cdot T \cdot (1 - f_2)$ електронів, де f_2 – ймовірність заповнення електронного стану в лівому резервуарі. Подальші розрахунки передбачають, що $f_2 \ll 1$

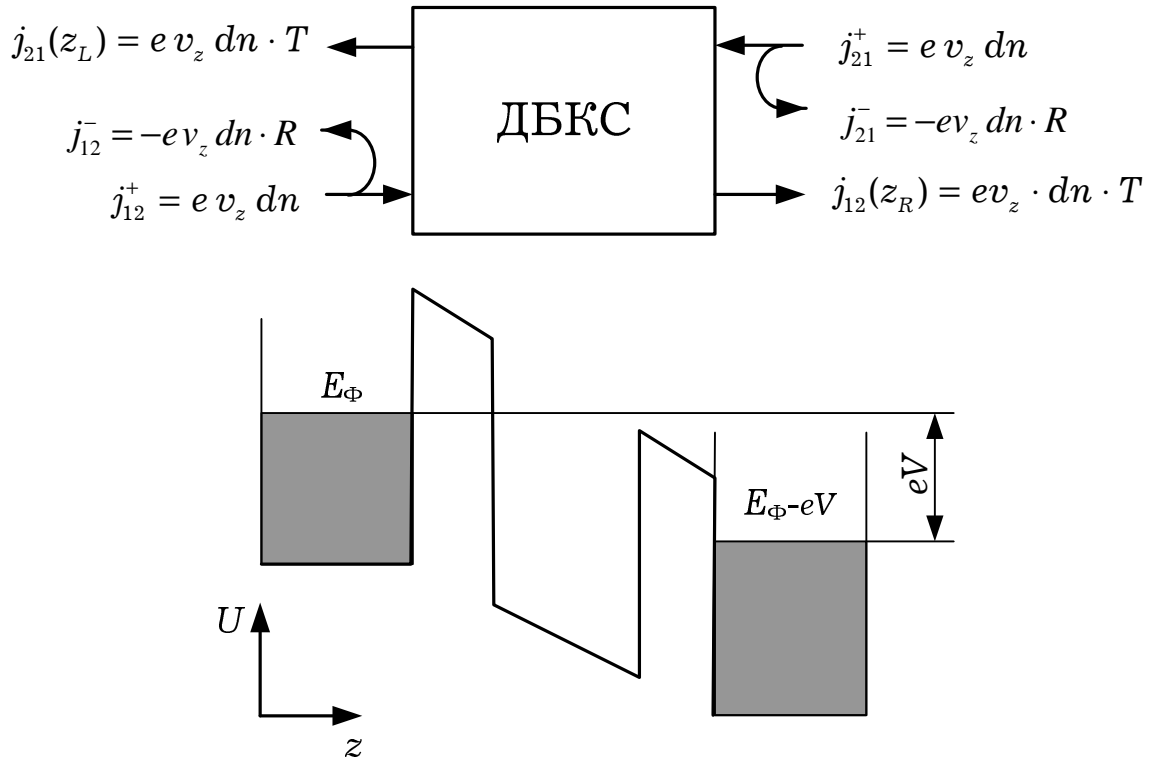


Рис. 8.3. Складові струму через двобар'єрну квантову систему та її зонна діаграма

Для знаходження сумарного струму j_{12} , що його створюють електрони, які потрапили в точку z_R з лівого резервуару, скористаємося тим, що концентрація електронів dn в елементарному об'ємі хвильових чисел $dV_k = dk_x dk_y dk_z$ дорівнює:

$$dn = g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})dV_k, \quad (8.18)$$

де $g(\mathbf{k})$ та $f(\mathbf{k})$ – відповідно густина станів та функція розподілу електронів в k -просторі в лівому резервуарі; $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^3$; $f(\mathbf{k}) = 1/(1 + e^\varepsilon)$, де, в свою чергу,

$$\varepsilon(E_\Phi, \mathbf{k}) \equiv (E - E_{\Phi 1}) / k_B T = \left(\underbrace{\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}}_{\equiv E_x} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}}_{\equiv E_y} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}}_{\equiv E_z} - eV - E_\Phi \right) / k_B T.$$

З урахуванням (8.18) рівняння (8.17) у розкритому вигляді переписеться таким чином:

$$dJ_{12} = \frac{e\hbar k}{m^*} g(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) T(E(\mathbf{k})) dV_k = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{k_z T(E(\mathbf{k}))}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_{\Phi 1})\}} dV_k \quad (8.19)$$

Легко показати (нижче це буде обґрунтовано), що принаймні за відсутності процесів розсіювання в активній області коефіцієнт проходження для структур з поперечним транспортом буде залежати лише від z -складової енергії (імпульсу): $T(E(\mathbf{k})) = T(E_z(k_z))$. Це припущення дозволяє провести інтегрування у формулі (8.19) по поперечним значенням хвильового вектору (k_x та k_y). У той же час вид коефіцієнту проходження $T(E_z)$ навіть для найпростіших форм квантової області зазвичай не дозволяє провести інтегрування по z -складовій аналітично.

При інтегруванні по k_z в (8.19) будемо враховувати той факт, що лише електрони, що рухаються з лівого резервуару в напрямку до правого резервуару (тобто електрони з додатною z -складовою швидкості (і, відповідно, хвильового вектора)) можуть його досягти, тобто інтегрування в (8.16) проводиться по інтервалу $k_z \in (0; \infty)$. Решта проєкцій швидкості (хвильового вектору) можуть приймати довільне значення. Враховуючи сказане, отримаємо вираз для розрахунку складової густини струму, що його створюють електрони з лівого резервуару:

$$J_{12} = \frac{e\hbar}{m^*} \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty T(E_z) \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{k_z}{1 + \exp\{\varepsilon(\mathbf{k}, E_{\Phi 1})\}} dk_z dk_x dk_y \quad (20)$$

Інтегруючи (8.20) по k_x та k_y та переходячи до інтегрування по енергії, отримаємо (див. [додаток д. 8.1.1](#)):

$$J_{12} = \frac{2m^* ek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^{\infty} T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi} - eV}{k_B T} \right) \right) dE_z. \quad (8.21)$$

де нижня границя інтегрування враховує відсутність у лівому резервуарі електронів з енергією, меншою за eV .

Проводячи аналогічні судження для знаходження J_{21} , знайдемо (див. [додаток 8.1.2](#)):

$$J_{21} = \frac{2m^* ek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} T(E_z) \cdot \ln \left(1 + \exp \left(-\frac{E_z - E_{\Phi}}{k_B T} \right) \right) dE_z, \quad (8.22)$$

Підсумовуючи (8.21) та (8.22) у відповідності з (8.16), отримаємо відому формулу Цу-Есакі:

$$J = \frac{2m^* ek_B T}{(2\pi)^2 \hbar^3} \int_{eV}^{\infty} T(E_z) D(E_z) dE_z, \quad (8.23)$$

де $D(E_z)$ – так звана функція постачання електронів (англ. «*supply function*»):

$$D(E) \equiv \ln \left(\frac{1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_1)}{k_B T} \right)}{1 + \exp \left(-\frac{E_z - (E_{\Phi} + U_N)}{k_B T} \right)} \right).$$

З двох нижніх границь 0 та eV була вибрана найбільша, бо для станів з $E_z < eV$ $T(E_z) = 0$, що слідує з елементарних квантово-механічних уявлень.

Спосіб, що був продемонстрований вище, близький до того, що використовували Цу та Есакі для розрахунку струму через РТД у своїй піонерській роботі [8.1] і не є достатньо строгим. Більш строгий спосіб, з якого слідує неперервність струму у всій квантовій області, розглядається у розд. 8.4.2.

З формули Цу-Есакі видно, що задача по знаходженню вольт-амперної характеристики зводиться до визначення коефіцієнту проходження $T(E_z)$, яка при відомому потенціальному рельєфові схожа на класичну квантово-механічну задачу про проходження електроном деякого потенціального рельєфу (наприклад, прямокутного потенціального бар'єру).

8.3. УМОВНО-АНАЛІТИЧНІ МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ КОЕФІЦІЕНТУ ПЕРЕДАЧІ

З часів формування перших уявлень про функціонування напівпровідникових структур з вертикальним транспортом було розроблено та використовуються багато методів для обчислення коефіцієнту проходження електроном квантової структури, які є по суті аналітичними. Однак, складність виразів зазвичай не дозволяє використовувати їх для математичного аналізу без подальших спрощень. Здебільшого вони використовуються для побудови чисельних моделей. З цієї причини ми використали приставку «умовно-» у їх назві, хоча використання *лоренцевої модельної функції* (розд. 8.3.2) є цілком придатним для аналізу, однак застосовність методу обмежена виключно резонансно-тунельним діодом за умови малих зміщень.

Загальний підхід усіх методів полягає в тому, що завдання по знаходженню коефіцієнту проходження квантової системи зводиться до знаходження матриці передачі усієї системи, тобто матриці, що пов'язує падаючі та відбиті електронні хвилі з обох боків системи.

Як вводиться ця матриця? Згідно з прийнятими припущеннями, за межами квантової системи падіння прикладеної напруги відсутнє, тому електрон знаходиться виключно у полі кристалічної решітки, і огинаюча його хвильової функції – це суперпозиція падаючих та відбитих плоских хвиль. Тому розв'язок

рівняння (8.15) для лівого та правого резервуару (на рис. 8.5, а це I та V ділянки) запишеться так:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}, \quad (8.24)$$

$$\psi_5 = A_5 e^{ik_5 x} + B_5 e^{-ik_5 x}, \quad (8.25)$$

де A_1, B_1, A_5, B_5 – деякі сталі, що виникають при інтегруванні рівняння (8.15); $k_{1(5)} = \sqrt{2m_{1(5)}^*(E_z - U_{1(5)})}/\hbar$, де $m_{1(5)}^*$ – ефективна маса електрона в I(V) області, $U_{1(5)}$ – потенціальна енергія електрона („потенціальний рельєф”) в I(V) області. Введемо позначення для членів рівнянь (8.24), (8.25):

$$\psi_1^{\rightarrow} \equiv A_1 e^{ik_1 z}, \quad \psi_1^{\leftarrow} \equiv B_1 e^{-ik_1 z}, \quad \psi_5^{\rightarrow} \equiv A_5 e^{ik_5 z}, \quad \psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 e^{-ik_5 z},$$

які традиційно зветься, відповідно, падаючими та відбитими хвилями у першій та п'ятій області. Ці хвилі описують електрон, що налітає чи відбивається від квантової області зліва чи справа.

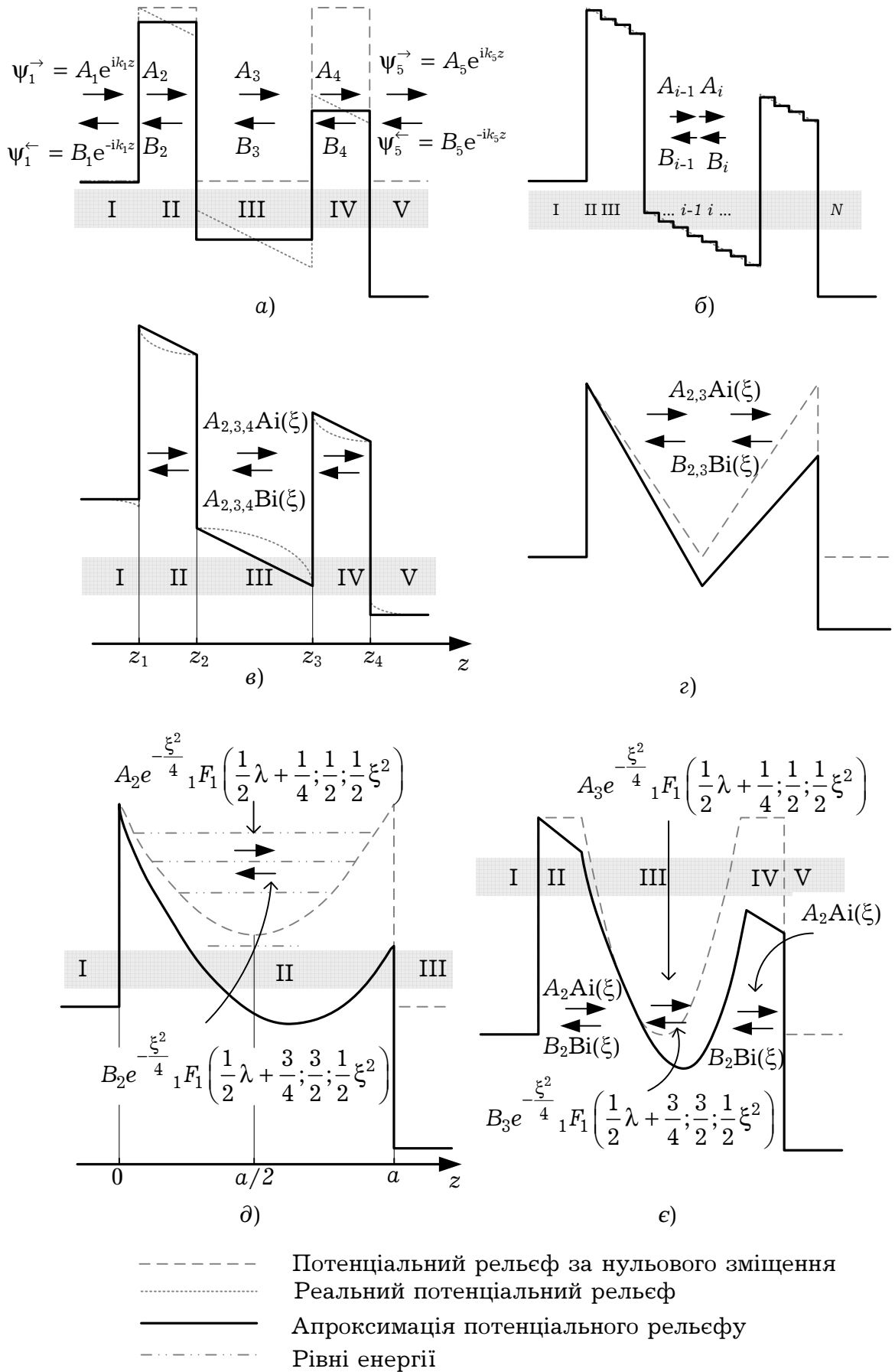


Рис. 8.5. Різні форми потенціальних бар'єрів та їх апроксимації при використанні умовно-аналітичних методів розрахунку коефіцієнту передачі

Матриця передачі усієї квантової системи \mathbf{M} вводиться так:

$$\begin{bmatrix} A_5 \\ B_5 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \quad (8.26)$$

Описані нижче методи дозволяють знайти саму матрицю \mathbf{M} . Припустимо, ми її вже знайшли, тобто відомі її компоненти m_{11} , m_{12} , m_{21} , m_{22} . Як, знаючи \mathbf{M} , відшукати коефіцієнт проходження? Відповідь однакова для усіх розглядуваних методів; її подано нижче.

За визначенням коефіцієнту проходження T [8.11, с. 419]:

$$T = \frac{|j_5^{\rightarrow}|}{|j_1^{\rightarrow}|}, \quad (8.27)$$

де j_5^{\rightarrow} – потік густини ймовірності у електронній хвилі, що пройшла у п'яту область; j_1^{\rightarrow} – потік густини ймовірності у падаючій хвилі в першій області. Згідно з визначенням густини потоку ймовірності:

$$j_{5(1)}^{\rightarrow} = \frac{i\hbar}{2m_{5(1)}^*} \left(\{\psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^* \frac{d\psi_{5(1)}^{\rightarrow}}{dz} - \psi_{5(1)}^{\rightarrow} \frac{d\{\psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^*}{dz} \right).$$

Прості обчислення дають:

$$|j_5^{\rightarrow}| = |A_5|^2 \frac{\hbar |k_5|}{m_5^*}, \quad |j_1^{\rightarrow}| = |A_1|^2 \frac{\hbar |k_1|}{m_1^*}.$$

Підставляючи ці значення у формулу (8.27), отримаємо:

$$T = \frac{|A_5|^2}{|A_1|^2} \frac{|k_5|}{|k_1|} \frac{m_1^*}{m_5^*}. \quad (8.28)$$

З формули (8.28) слідує: якщо потенціальна енергія електрона у лівому чи правому резервуарі менша за повну енергію електрона (один із хвильових векторів приймає чисто уявне значення), то такий електрон не вносить вклад в струм, про що згадувалося при виведенні формули Цу-Есакі.

Коефіцієнт відбивання від квантової системи визначається як [11, с. 419]:

$$R = \frac{|j_1^{\leftarrow}|}{|j_1^{\rightarrow}|}, \quad (8.29)$$

де $j_1^{\leftarrow} = \frac{i\hbar}{2m_1^*} \left(\{\psi_1^{\leftarrow}\}^* \frac{d\psi_1^{\leftarrow}}{dz} - \psi_1^{\leftarrow} \frac{d\{\psi_1^{\leftarrow}\}^*}{dz} \right)$ – потік густини ймовірності у відбитій у першу область електронній хвилі.

Прості обчислення дають:

$$|j_1^{\leftarrow}| = |B_1|^2 \frac{\hbar |k_1|}{m_1^*}.$$

Підставляючи це значення в (8.29), маємо:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \quad (8.30)$$

Фізичний зміст мають задачі, де електрон налітає на квантову систему зліва (з першої області) або справа (з п'ятої області).

Розглянемо задачу про знаходження коефіцієнту проходження для електрона, що налітає на квантову систему з лівого резервуару. За умовою задачі хвиля, що відбита від квантової системи справа $\psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 e^{-ik_5 z}$ буде відсутня (оскільки резервуари є ідеально-адсорбуючими). Без втрати загальності можна нормувати хвильову функцію у лівому резервуарі так, що $A_1 = 1$. Тоді амплітуди A_5 та B_1 набудуть смислу, подібного до того, що мають, комплексні коефіцієнти проходження та відбивання електромагнітних хвиль. Щоб підкреслити цю аналогію та поліпшити сприйняття їх фізичного смислу введемо позначення $t \equiv A_5$, $r \equiv B_1$. Таким чином, для випадку електрона, що налітає на квантову систему зліва, (8.28) та (8.30) перепишуться так:

$$T = |t|^2 \frac{|k_5|}{|k_1|} \frac{m_1^*}{m_5^*}, \quad (8.31)$$

$$R = |r|^2. \quad (8.32)$$

Повернемося до матриці передачі та перепишемо формулу (8.26) у щойно введених позначеннях:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}. \quad (8.33)$$

Тут невідомими є коефіцієнти t та r , знайшовши які, матимемо змогу обчислити T та R згідно (8.31) та (8.32). Провівши елементарні обчислення, з (8.33) отримаємо:

$$t = m_{11} + m_{12} m_{21} / m_{22}; \quad (8.34)$$

$$r = -m_{21}/m_{22}. \quad (8.35)$$

Отже, якщо матриця передачі квантової системи відома, формули (8.31), (8.32), (8.34), (8.35) дозволяють обчислити коефіцієнти проходження та відбивання.

Наостанок відмітимо, що закон збереження густини потоку ймовірності в огинаючій хвильовій функції, як і для звичайної хвильової функції [8.11, с. 419] диктує виконання умови:

$$T + R = 1;$$

крім того, в [8.8, с. 108] показано, що для електронів, що налітають справа чи зліва коефіцієнти відбивання та проходження однакові: $T_{12} = T_{21}$, $R_{12} = R_{21}$. З цих причин у формулі Цу-Есакі (8.23) фігурує один коефіцієнт проходження, T $T_{12} = T_{21}$. Системи, що задовольняють вказаним умовам називаються оборотними системами без втрат і зустрічаються (як модель) також в електродинаміці. Для компонентів матриці \mathbf{M} , що описує вказані системи, справедливі зокрема рівності: $m_{11} = m_{22}^*$, $m_{12} = m_{21}^*$ [8.14, р. 250].

У електродинаміці матрицю передачі \mathbf{M}' вводять трохи інакше, ніж було показано нами, а саме [8.15, р. 246]:

$$\begin{bmatrix} \Psi_1^{\rightarrow} \\ \Psi_1^{\leftarrow} \end{bmatrix} = \mathbf{M}' \begin{bmatrix} \Psi_2^{\rightarrow} \\ \Psi_2^{\leftarrow} \end{bmatrix}.$$

Легко віднайти зв'язок між цими матрицями:

$$\mathbf{M}' = \begin{bmatrix} e^{ik_5 z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_5 z} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{M} \begin{bmatrix} e^{ik_1 z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 z} \end{bmatrix},$$

а також переконалися, що значення T та R , знайдені за формулами (8.31), (8.32) з використанням M' замість M виявляються однаковими.

Нижче будуть розглянуті деякі методи розрахунку коефіцієнту проходження.

8.3.1. Метод матриць передачі⁴

Метод матриць передачі застосовується для знаходження коефіцієнту проходження через квантові системи, потенціальна енергія електрона в яких є або може бути апроксимована кусково-сталою функцією (рис. 8.4, а, б). Апроксимація, що показана на рис. 8.4, а є виправданою, коли до системи прикладається невелике зміщення, а впливом просторового заряду можна знехтувати.

У будь-яких двох суміжних ділянках зі сталим потенціальним рельєфом, скажімо, i -й та $(i + 1)$ -й області, розв'язком рівняння Шредінгера буде суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}, \quad (8.36)$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} z} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} z}, \quad (8.37)$$

де $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E_z)} / \hbar$, де m_i^* – ефективна маса електрона в i -му шарі, U_i – потенціальна енергія електрона в зоні провідності i -го шару.

На границі між i -ю та $i+1$ -ю областями, в точці $z_{i, i+1}$ хвильова функція та потік ймовірності в ній мають бути неперервними, тобто необхідно забезпечити виконання рівнянь (8.13) та (8.14), які у нашому випадку переписуться:

⁴ англ. *transfer matrix method*

$$\Psi_i(z_{i,i+1}) = \Psi_{i+1}(z_{i,i+1}), \quad (8.38)$$

$$1/m_i^* \cdot \Psi_i'(z_{i,i+1}) = 1/m_{i+1}^* \cdot \Psi_{i+1}'(z_{i,i+1}), \quad (8.39)$$

де штрихом позначено диференціювання по z .

З урахуванням (8.36) та (8.37) рівняння (8.38) та (8.39) можна записати у матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_i z} & e^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*} e^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*} e^{-ik_i z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}. \quad (8.40)$$

Помноживши обидві частини (8.40) на $\begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1}$

справа, отримаємо:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (8.41)$$

де $\mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*} e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_i z} & e^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*} e^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*} e^{-ik_i z} \end{bmatrix}$ – матриця

передачі електронних хвиль (або просто \mathbf{M} -матриця), що виражає амплітуди електронних хвиль у $(i+1)$ -му шарі через амплітуди у i -му шарі.

На відміну від матриці передачі електромагнітних хвиль ця матриця пов'язує *амплітуди* падаючих та відбитих хвиль ($A_{i(i+1)}$, $B_{i(i+1)}$), а не *самі* хвилі ($\Psi_{i(i+1)}^{\rightarrow}$, $\Psi_{i(i+1)}^{\leftarrow}$). Однак \mathbf{M} -матриці можна ввести і у спосіб, властивий для електродинаміки і це не вплине на кінцевий

результат; ми ж користуємося загальноприйнятим способом, який до того ж вводиться природно.

Аналогічно можна отримати рівняння, що пов'язує відповідні амплітуди в $(i - 1)$ -му та i -му шарі:

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix} \quad (8.42).$$

Користуючись (8.41) та (8.42), можна виразити $[A_{i+1}, B_{i+1}]^T$ через $[A_{i-1}, B_{i-1}]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \times \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix},$$

що є виразом властивості \mathbf{M} -матриць, що зветься «мультиплікативність». Легко переконатися, що вказана властивість \mathbf{T} -матриць дозволяє виразити амплітуди падаючих та відбитих хвиль у лівому резервуарі через аналогічні величини правого резервуару:

$$\begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{N,N-1} \times \mathbf{M}_{N-1,N-2} \times \dots \times \mathbf{M}_{2,1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

Матриця $\mathbf{M} = \prod_{i=2}^N \mathbf{M}_{i,i-1}$ є шуканою матрицею передачі усєї квантової системи.

За допомогою вказаного методу для резонансно-тунельного діоду (рис. 8.6) розраховано коефіцієнт передачі через його двобар'єрну квантову систему (ДБКС) та його ВАХ – рис. 8.7 та рис. 8.8, а також коефіцієнт передачі через багатобар'єрні квантові системи – рис. 8.9.

Модельний РТД складається з бар'єрів шириною $b = 1.7$ нм та ями шириною $a = 4.5$ нм.

Бар'єри складаються з чистого AlAs, яма – з чистого GaAs. Вважалось, що відносні ефективні маси мають значення: $m_{\text{AlAs}} = 0.15$, $m_{\text{GaAs}} = 0.067$. Розрив зони провідності у місці контакту $U_0 = 1$ еВ. Концентрація донорних домішок у резервуарах $N_d = 2.5 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$. Залежність показана для кількох значень напруги; при цьому реальне падіння напруги апроксимувалося у відповідності з рис. 8.5, а.

На рис. 8.7 показана залежність $T(E_z)$ для одно- дво- три- та чотирибар'єрної квантової системи за відсутності зміщення. При цьому ширина ям та бар'єрів бралася такою ж, як і для попереднього прикладу.

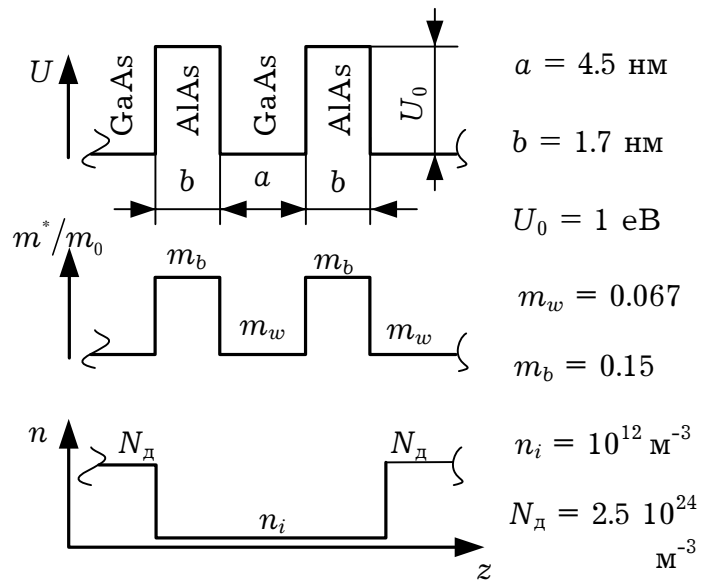


Рис. 8.6. Параметри модельного РТД

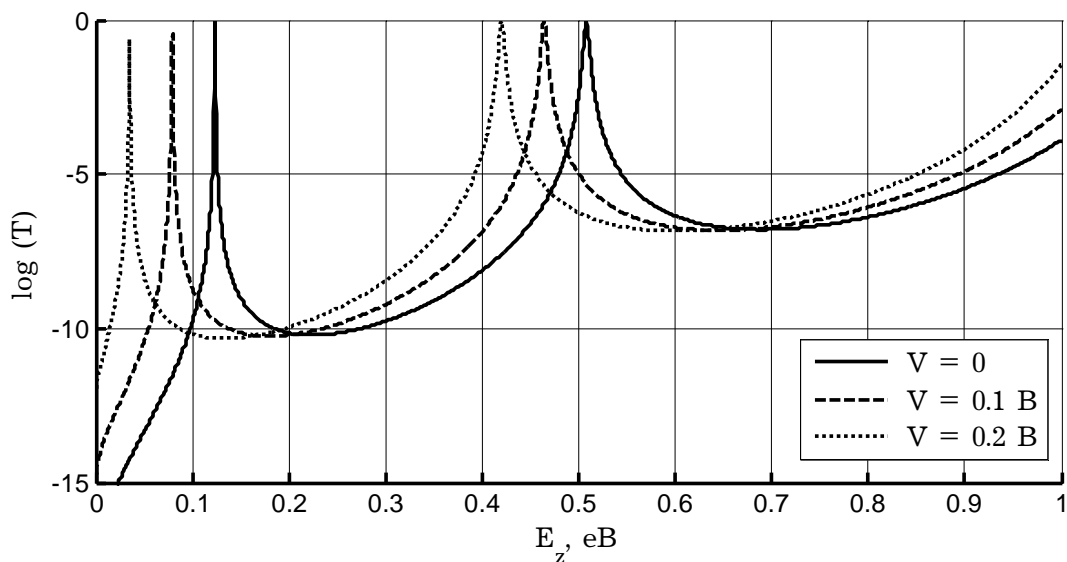


Рис. 8.7. Коефіцієнт передачі РТД, розрахований методом матриць передачі

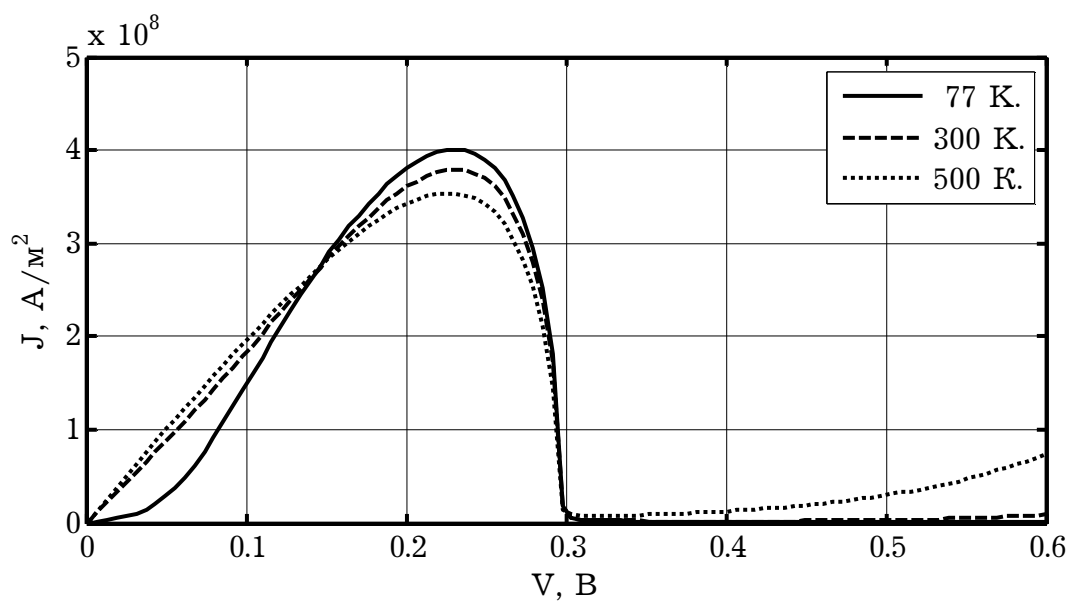


Рис. 8.8. Вольт-амперна характеристика РТД для різних температур, розрахована за формулою Цу-Есакі з використанням методу матриць передачі

8.3.2. Використання лоренцевої модельної функції (лише РТД)

Як уже зазначалося, використання матриць передачі на практиці потребує чисельної реалізації, а множення п'яти матриць передачі призводить до складного з точки зору можливості

математичного аналізу виразу для коефіцієнту передачі, хоча такі спроби здійснювалися [8.15].

Як пояснити резонансний характер залежності коефіцієнта проходження для резонансно-тунельного діоду (рис. 8.7)? Виявляється, що спеціально для РТД можна користуватися функціями, суперпозиція яких задовільно апроксимує резонансний характер залежності $T(E_z)$. Називаються вони функціями *лоренцового типу*, і описуються формулою:

$$T_i(E_z) = \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}. \quad (8.43)$$

де Γ_i – це величина розширення резонансного рівня, яке обумовлене принципом невизначеності Гейзенберга для енергії; E_i – положення i -го метастабільного резонансного рівня в квантовій ямі. Легко бачити, що $T_i(E_i) = 1$, а при $|E_z - E_i| \gg \Gamma_i$ $T_i(E_i) \rightarrow 0$, тобто ця функція описує деяку резонансну залежність.

Іноді формулу (8.43) також називають формулою Брейта-Вігнера; вона вперше була отримана та використана для опису процесів резонансного розсіювання нейтронів на атомних ядрах. Для тривимірного сферичного потенціального бар'єру одна з форм цієї формули виводиться, наприклад, у [8.11, с. 426]

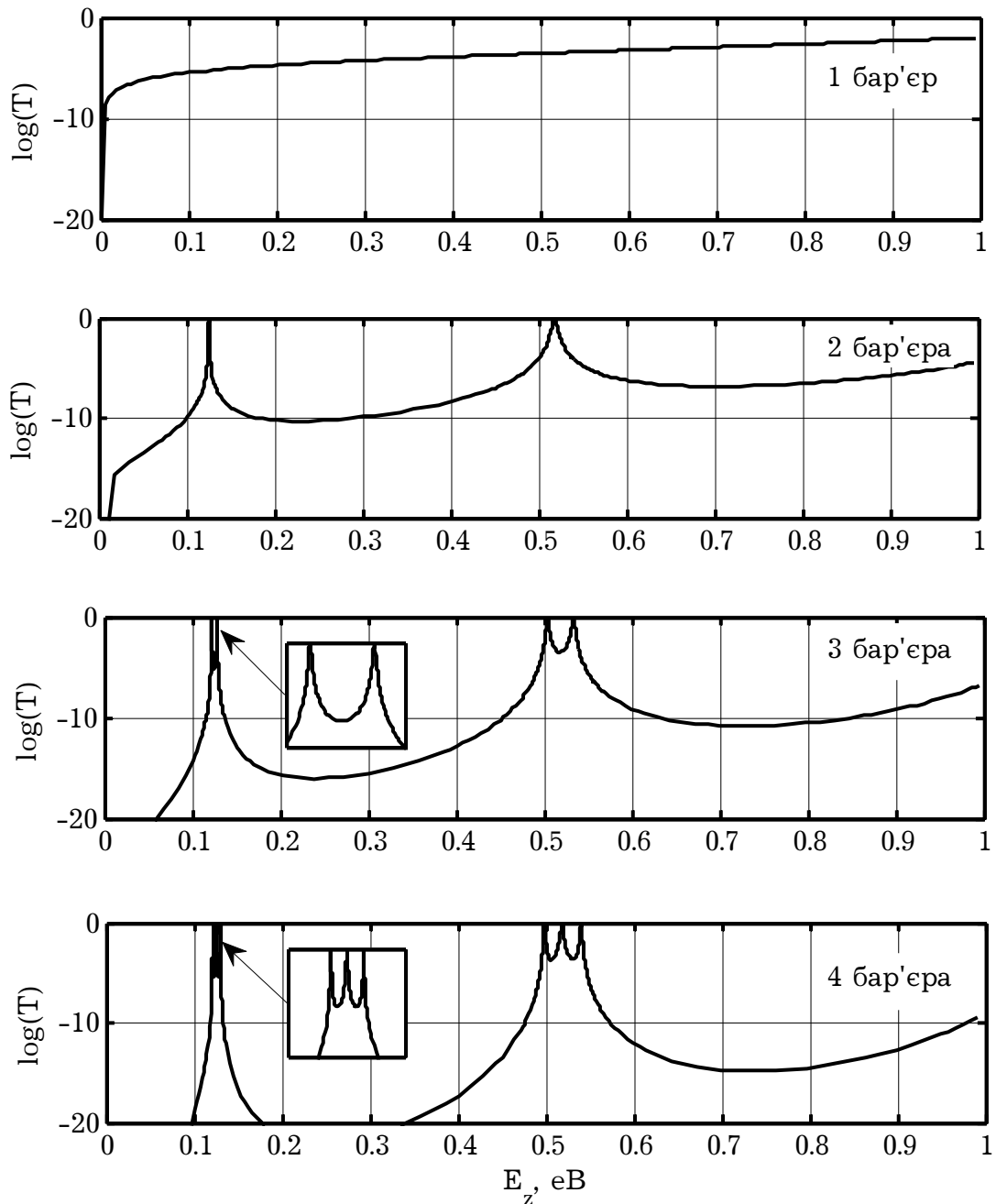


Рис. 8.9. Графіки залежності коефіцієнту проходження для одно-, дво-, три- та чотирибар'єрної квантової системи за відсутності зміщення, розраховані методом матриць передачі

У квантовій теорії збурень особливе місце займає задача, коли збурення мале, однак його вид такий, що спектр квантової системи з дискретного стає неперервним [8.8, с. 202], [8.11, с. 284]. Така задача виникає, коли в якості незбуреної системи розглядається яма, оточена нескінченно широкими потенціальними бар'єрами

(рис. 8.8, а), а у якості збуреної – система, яка оточена достатньо широкими бар'єрами скінченної ширини⁵ (рис. 8.8, б).

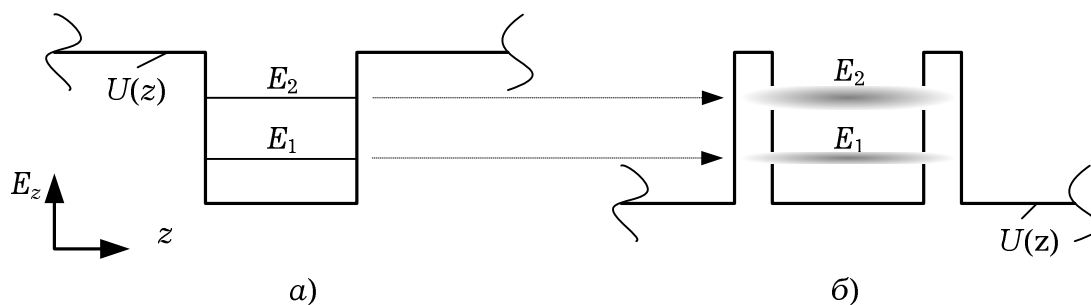


Рис. 8.10. Теорія збурень для двобар'єрної квантової системи: *а)* незбурена система (ширина бар'єрів нескінченна); *б)* збурена система (ширина бар'єрів скінченна)

У системі, що зображена на рис. 8.8, а при енергії, що менша за висоту бар'єра, спектр енергії електрона дискретний. Говорять, що в такій ситуації електрон *локалізований* у квантовій ямі; тому ймовірність знайти його на нескінченості дорівнює нулю; електрони мають фіксовану енергію згідно з принципом невизначеності Гейзенберга для енергії [8.8, с. 202]:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar, \quad (8.44)$$

оскільки електрон перебуває в квантовій ямі нескінченно довго ($\Delta t = \infty$).

Ситуація принципово змінюється, якщо бар'єри мають скінченну ширину. Якщо електрон в момент часу $t = 0$ знаходився у квантовій ямі на одному з дискретних рівнів E_i (рис. 8.7,б), то з часом ймовірність його знайти в ній зменшується, оскільки за рахунок тунельного ефекту він може пройти через один з бар'єрів та, як говорять, піти на нескінченність. А при $t \rightarrow \infty$ ця ймовірність

⁵ настільки широкими, щоб збурення можна було вважати малим. Для резонансно-тунельних діодів, що мають більш-менш якісні електричні характеристики, це завжди виконується.

буде нульовою. Такі майже стабільні рівні енергії називають *метастабільними*, а середній час знаходження електрона у квантовій ямі Δt називають часом життя даного *метастабільного* стану. Цей час і можна наближено вважати тією невизначеністю, що існує при визначенні енергії електрона, яка згідно (8.40) становить:

$$\Delta E \sim \hbar / \Delta t.$$

Це означає, що дискретний рівень енергії «розмивається». Проте якщо величина ΔE значно менша за відстань між дискретними рівнями, то ймовірність знайти електрон у квантовій ямі поблизу рівнів з енергією $E_i \pm \Delta E$ значно більша за ймовірність знайти його там за інших енергій.

Параметр E_i в формулі (8.43) – це положення *дискретних* рівнів, і вони співпадають з центрами відповідних *метастабільних* рівнів. Таким чином, для знаходження E_i необхідно розв'язати задачу на власні енергії для *незбуреної* системи (рис. 8.7, а) в області дискретного спектру.

При $E_z = E_i$ проходження електроном двобар'єрної потенціальної ями – це достовірна подія (ймовірність 100%). Таким чином, максимуми коефіцієнту проходження співпадають з центрами метастабільних рівнів. Наведена рівність називається умовою резонансу, та може бути витлумачена на традиційний лад наступним чином. Резонанс – це явище, що спостерігається, коли власна частота коливання квантової системи $\omega_0 = E_i / \hbar$ співпадає з частотою хвилі де Бройля $\omega_{\text{зовн}} = E_z / \hbar$. Коли максимальна кількість електронів мають поперечну складову енергії E_z , що близькі до резонансної, на вольт-амперній характеристиці спостерігається максимум – пік (див. рис. 8.6). Значення напруги та струму, що відповідають вказаній умові, називається *піковими*. Якщо електронний колектив в емітері вироджений, то піковою є приблизно та напруга, за якої рівень Фермі в емітері співпадає з положенням резонансного рівня в квантовій ямі. При подальшому збільшенні напруги резонансний рівень опускається нижче дна зони провідності так, що поперечна складова енергії основної частини електронів віддаляється від умови резонансу; струм різко зменшується.

Оскільки в квантовій ямі можуть бути вищі рівні, а також можливе надбар'єрне проходження, то за піком слідує мінімальне значення струму – долина, а потім струм знову починає зростати. Кількість піків на ВАХ РТД, як легко здогадатися, рівна кількості рівнів у квантовій ямі.

Величина Γ_i – це так звана ширина i -го метастабільного рівня. Її називають «природнім розширенням» відповідного рівня; воно визначається як:

$$\Gamma_i = \frac{\hbar}{\tau_i}, \quad (8.45)$$

де τ_i – це середній час життя даного метастабільного стану.

Величина Γ_i має наступний фізичний зміст. Для системи, коефіцієнт проходження якої описується лоренцевою функцією, частка електронів, що пройшла через систему в діапазоні Γ_i з центом в $E_z = E_i$ буде складати $1 / \sqrt{2} \approx 0.707$ від загальної кількості електронів, що пройшли через ДБКС при будь-яких енергіях (за умови якщо розподіл електронів за енергіями рівномірний). Умовно кажучи «вікно прозорості» квантової системи має порядок Γ_i .

При кожному відбитті від i -го бар'єру частка $T_i = 1 - R_i$ електронної хвилі «витікає» з ями. Частота зіткнень електрона з бар'єрами ν_i приблизно дорівнює: $2a/\nu_i$, де ν_i – це швидкість руху електрона на i -му метастабільному рівні; $\nu_i = \sqrt{2E_i / m^*}$; a – ширина квантової ями. Ймовірність того, що при зіткненні з бар'єром електрон покине квантову яму складає $T_i^{(1)}$ для лівого та $T_i^{(2)}$ для правого бар'єру. Вказані оцінки справедливі за, умови $|T_i^{(1)}| \ll 1$, $|T_i^{(2)}| \ll 1$; тоді величину τ_i можна наближено розрахувати за формулою:

$$\tau_i = \frac{2a}{v_i} \left(\frac{1}{T_i^{(1)} + T_i^{(2)}} \right). \quad (8.46)$$

Якщо в квантовій ямі резонансно-тунельного діоду знаходиться N метастабільних рівнів енергії, то функція $T(E_z)$ може бути апроксимована сумою функцій лоренцевого типу:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_i^2 + 4(E_z - E_i)^2}. \quad (8.47)$$

Якщо в квантовій ямі існують інші механізми, що дозволяють електрону покинути даний енергетичний рівень, наприклад процеси розсіювання, то в рамках лоренцевої апроксимації їх теж можна врахувати. Нехай сумарний час релаксації по всім механізмам релаксації дорівнює τ_p , і визначається звичайним чином:

$$1 / \tau_p = \sum_n \lambda_n,$$

де λ_n – частоти n -го виду розсіювання. З часом τ_p так само, як і з часом τ_i можна пов'язати додаткове розширення метастабільного рівня:

$$\Gamma_p = \frac{\hbar}{\tau_p}, \quad (8.48)$$

яке зветься «релаксаційним».

По аналогії з резонатором Фабрі-Перо [8.16] або слідуючи квантовій теорії можна показати, що при врахуванні розсіювання формулу (8.43) можна уточнити і отримати:

$$T(E_z) = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i^2}{\Gamma_{\Sigma,i}^2 + 4(E_z - E_i)^2}, \quad (8.49)$$

де $\Gamma_{\Sigma,i} = \Gamma_{\Sigma} + \Gamma_p$ – сумарне розширення i -го енергетичного рівня.

8.3.3. Напіваналітична спрощена модель РТД

За допомогою формули (8.49) та формули Цу-Есакі (8.23) можна побудувати спрощену аналітичну модель резонансно-тунельного діоду, як описано в [8.17]⁶. Її перевагами є простота та інтуїтивно зрозумілий зміст величин, що обчислюються на шляху отримання ВАХ, а також часткова аналітичність. Цих рис не мають більш точні чисельні моделі.

Виходячи з розд. 8.3.2, завдання зі знаходження залежності $J(V)$ зводиться до наступних кроків:

1. Пошук сумарної кількості та енергії дискретних рівнів енергії N , повністю нехтуючи можливістю розпаду електронних станів у квантовій ямі (тобто задача на власні енергії для потенціального рельєфу з рис. 8.8, а)
2. Пошук коефіцієнтів проходження для кожного з двох потенціальних бар'єрів, $T^{(1)}$ та $T^{(2)}$.
3. Пошук величин «природного» та «релаксаційного» розширення метастабільних енергетичних рівнів в квантовій ямі за формулами (8.45) та (8.48).
4. Використання розрахованих величин для отримання ВАХ з формули Цу-Есакі (8.23).

Знайти кількість та енергію дискретних рівнів у квантовій ямі, оточеній нескінченно широкими бар'єрами (рис. 8.8, а), можна, розв'язавши відповідну квазіквантовомеханічну задачу, яка лише ненабагато складніша ніж та, що розглянута в [8.8, с. 93].

Розрахунки дозволяють отримати наступні формули [8.18]. Кількість метастабільних рівнів у квантовій ямі:

⁶ У вказаній роботі не враховувалася відмінність ефективних мас у бар'єрі та ямі

$$N = \left[\frac{2\sqrt{m_b}}{\pi\gamma} \right] + 1 = \left[\sqrt{\frac{m_b}{m_0} \cdot \frac{m_w}{m_0} \frac{2}{\pi\gamma_0}} \right] + 1, \quad (8.50)$$

де $[x]$ позначає цілу частину x ;

m_0, m_w, m_b – маса спокою електрона та ефективні маси електрона в ямі та бар'єрі;

$\gamma^2 = \frac{2\hbar^2}{m_w U a^2}$, $\gamma_0^2 = \frac{2\hbar^2}{m_0 U a^2}$; U – висота потенціального бар'єру, a – ширина ями.

Власні енергії електрона в квантовій ямі можуть бути знайдені з трансцендентного рівняння:

$$(-1)^{n+1} \cos\left(\frac{\pi}{2}(n-1) - \xi\right) = (-1)^{n+1} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{m_w}{m_b} \left(\frac{1}{\gamma^2 \xi^2} - 1\right)}}, \quad (8.51)$$

де

$$\xi = ka / 2, \quad k = \sqrt{2m_w E} / \hbar. \quad (8.52)$$

При $m_w = m_b$ права частина рівняння (8.51) є рівнянням прямої: $f(\xi) = \pm\gamma\xi$, (якщо ж $m_w \neq m_b$, то це будуть деякі криві, що виходять з точки (0;0)), ліва – в залежності від парності n – синусом або косинусом. Точки перетину двох згаданих функцій є шуканими ξ_i , яким відповідають шукані E_i згідно (8.52). Один із можливих способів графічного розв'язку (8.51) показано на рис. 8.11.

Коефіцієнт проходження через прямокутні потенціальні бар'єри можна розрахувати, наприклад, користуючись методом

матриць передачі. Формула для електрона, що має енергію $E_z = E_i$ має вигляд:

$$T_i = \frac{4C_i^2}{(C_i + 1)^2 \text{sh}^2 b\chi_i + 4C_i^2},$$

де b – ширина бар'єру,

$$C_i = \frac{k_i}{\chi_i} \cdot \frac{m_2^*}{m_1}, \quad \hbar k_i = \sqrt{2m_b^* E_i}$$

$$, \quad \hbar \chi_i = \sqrt{2m_2^* (U_0 - E_i)}, \quad U_0$$

– висота потенціального бар'єру.

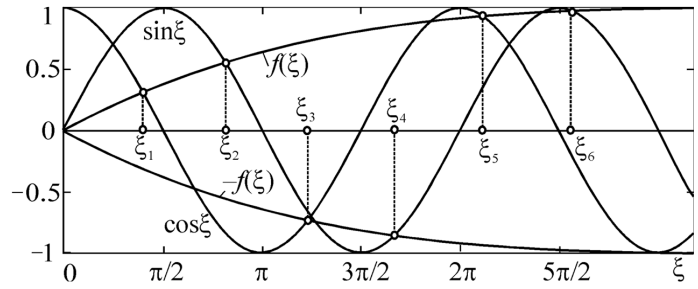


Рис. 8.11. Показані перетину кривих $f(\xi)$ та кривих $\sin(\xi)$ чи $\cos(\xi)$ – корені рівняння (8.46)

В найпростішому випадку можна знехтувати залежністю $T_{1(2)}$ від прикладеної до ДБКС напруги V , і вважати, що під впливом напруги рівні енергії «опускаються» на величину $eV / 2$:

$$E_i(V) = E_i(0) - \frac{eV}{2}.$$

Після того як при енергіях E_i проникності лівого та правого бар'єрів $T_i^{(1)}$ та $T_i^{(2)}$ знайдено, природне розширення i -го резонансного рівня τ_i можна визначити з рівняння (8.45).

Найбільш суттєвим механізмом розсіювання в GaAs за кімнатної температури є полярне оптичне розсіювання. Наближено можна вважати, що час релаксації імпульсу в квантовій ямі співпадає з часом релаксації в тривимірному напівпровіднику, який визначається за формулою [8.19, с. 71]:

$$\frac{1}{\tau_p} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{t^{1/2}}{\text{sh}t} K_0(t), \quad (8.53)$$

де α полярна стала для GaAs; $t = \frac{\hbar\omega_o}{2k_B T}$; K_0 – функція Бесселя нульового порядку другого роду.

За нульового зміщення суперпозиція лоренцевих функцій є хорошою апроксимацією реальної функції проходження особливо для низьких енергетичних рівнів, про що свідчить рис. 8.12, де на одному графіку зображено $T(E_z)$, що розрахована методом матриць передачі (точно), та $T(E_z)$, розраховану у відповідності з (8.47) для все тієї ж структури з рис. 8.6. Для вищих енергетичних рівнів (другий пік на рис. 8.12) апроксимація менш точна, оскільки для значення енергії $E_z = E_2$ умова для проникності бар'єрів $T^{(i)} \ll 1$ виконується гірше.

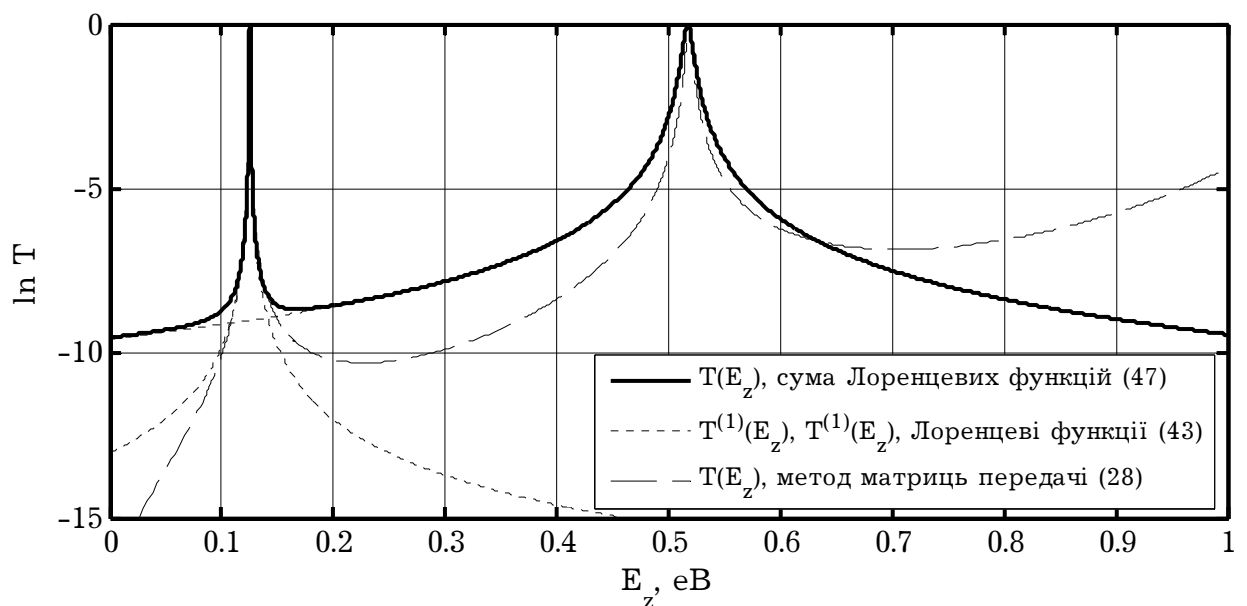


Рис. 8.12. Апроксимація коефіцієнту проходження РТД $T(E_z)$ лоренцевими модельними функціями (8.46)

Одна з проблем, яку доводиться розв'язувати при проектуванні резонансно-тунельних діодів полягає у малій контрастності⁷ вольт-амперних характеристик. За найбільш розповсюдженою точкою зору причина полягає у наявності розсіювання електронів, тому

⁷ контрастність – це величина, що дорівнює відношенню пікового струму до струму в долині РТД

моделювання, яке не враховує розсіювання в ямі, дає значно занижене значення струму в долині РТД.

Непружне розсіювання в ямі резонансно-тунельного діоду призводить до того, що електрон з енергією, що дорівнює резонансній ($E_z = E_i$), має скінченну ймовірність змінити свою енергію за рахунок взаємодії з полярними оптичними фононами, які в GaAs мають енергію $\hbar\omega \approx 36$ меВ. Ширина рівнів модельного РТД (рис. 8.6) складає: $\Gamma_1 \approx 0.37$ меВ, $\Gamma_2 \approx 8.7$ меВ. Таким чином, акт непружного розсіювання в середньому відправляє електрон в діапазон енергій, для якого ймовірність проходження була $T(E_z) \rightarrow 0$, підвищуючи ймовірність тунелювання електронів, що знаходяться досить далеко від резонансу. В той же час ймовірність проходження електроном квантової системи при близькій до резонансної енергії падає, і навіть при $E_z = E_i$ не дорівнює одиниці. Процеси розсіювання призводять до релаксаційного розширення рівня, ширина якого складає Γ_p , на додачу до природного розширення кожного i -го рівня, Γ_i .

Зміну форми $T(E_z)$ по аналогії з затуханням електромагнітної хвилі у резонаторі Фарбі-Перо [8.16] дозволяє врахувати формула (8.49). Відмітимо, що такий підхід є внутрішньо суперечливим, оскільки механізм розсіювання електрона не супроводжується затуханням хвильової функції (що має місце для електромагнітної хвилі). Останнє означало б фактичну анігіляцію частини електронів, яка звичайно ж не спостерігається в квантовій ямі; навпаки – має виконуватися закон неперервності струму.

Також критиці піддають використання для розрахунку Γ_p часу релаксації імпульсу. Згідно квантової статистики є більше підстав використовувати в цій ролі час релаксації фази [8.20, 8.21].

Незважаючи на вказані недоліки формула (8.49) дозволяє максимально просто врахувати розсіювання в ямі РТД. Час релаксації імпульсу, будучи розрахованим за формулою (8.53), збільшується при підвищенні температури, що призводить до збільшення Γ_p , тобто додаткового «розмиття» функції $T(E_z)$ – рис. 8.13, і, зрештою, підвищення струму долини ВАХ – рис. 8.14.

Це корелюється з експериментальними ВАХ, на яких з моменту створення перших РТД (1973 р.) до 1985 р. не вдавалося

отримати ділянки з від'ємною диференціальною провідністю при кімнатній температурі.

Як було згадано вище, для другого енергетичного рівня модельованої структури апроксимація лоренцевими функціями дає сильно завищені значення проникності двобар'єрної квантової системи (рис. 8.12). З цієї причини струм, що зумовлений тунелюванням через другий метастабільний рівень, перевищує точне значення, що розраховане методом матриць передачі⁸ (рис. 8.14). Зростання струму в долині ВАХ дійсно спостерігається на практиці. Однак саме в цьому випадку це зростання пов'язано з похибкою апроксимації функції $T(E_z)$, а не з процесами розсіювання чи хаотизації фази, які ми поки що не враховували.

Вольт-амперна характеристика, що розраховується з залученням лоренцевої апроксимації, демонструє трохи вищі значення струму, аніж розрахована методом матриць передачі. Це пов'язано знову ж таки з більш грубою апроксимацією зміни потенціального рельєфу під дією напруги зміщення V (ми просто вважаємо, що дно потенціальної ями разом з рівнями енергії в ній «опускається» на величину $eV/2$). Також більші значення струму зумовлені похибкою апроксимації $T(E_z)$ у бік підвищення. Значення пікової напруги виявляється меншим за розраховане методом матриць передачі через грубішу апроксимацію потенціального рельєфу. Відзначимо, що для врахування того факту, що потенціальна енергія електрона в лівому та правому резервуарі відрізняється, функція $T(E_z)$, що використовувався для побудови ВАХ (рис. 8.14) домножувалася на так званий «кінематичний

член» [8.22]: $k_2/k_1 = \sqrt{\frac{E_z}{E_z + eV}}$.

ВАХ РТД при врахуванні розсіювання згідно (8.49) демонструє зменшення контрастності з підвищенням температури (рис. 8.15). Це пов'язано зі зменшенням часу релаксації імпульсу τ_p з $2.5 \cdot 10^{-14}$ с при $T = 7$ К до $3.8 \cdot 10^{-15}$ с при кімнатній температурі, що призводить до збільшення ширини релаксаційного розширення першого рівня Γ_p з 0.026 еВ до 0.17 еВ.

⁸ нагадаємо: метод лоренцевої модельної функції не є новим підходом до обчислення функції передачі електронів через ДБКС $T(E_z)$, а лише її апроксимацією. Тому адекватність цього методу в кращому випадку (при абсолютній точності) така ж як адекватність методу матриць передачі

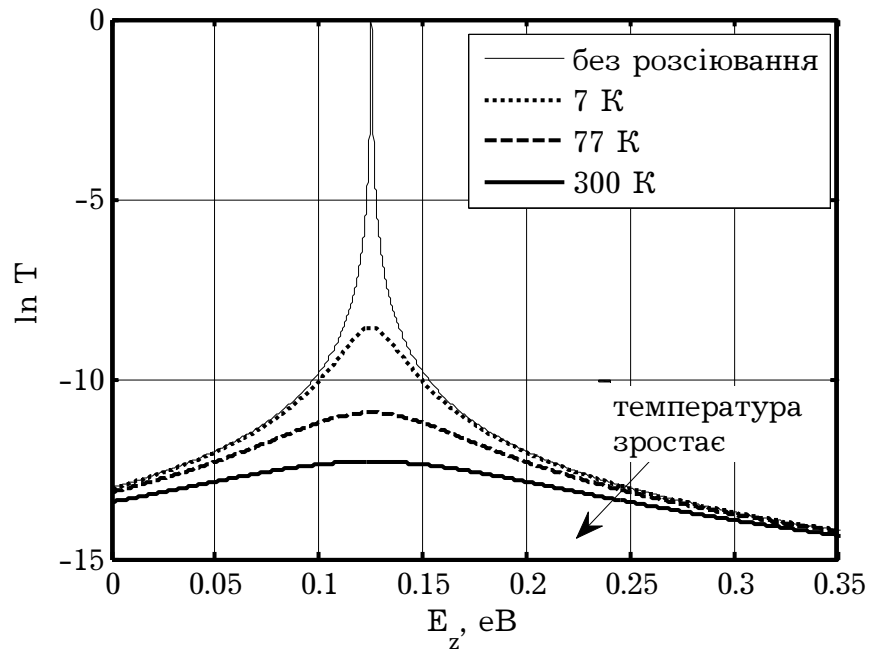


Рис. 8.13. Вплив температури на функцію $T(E_z)$ згідно (8.49) для структури, зображеної на рис. 8.6

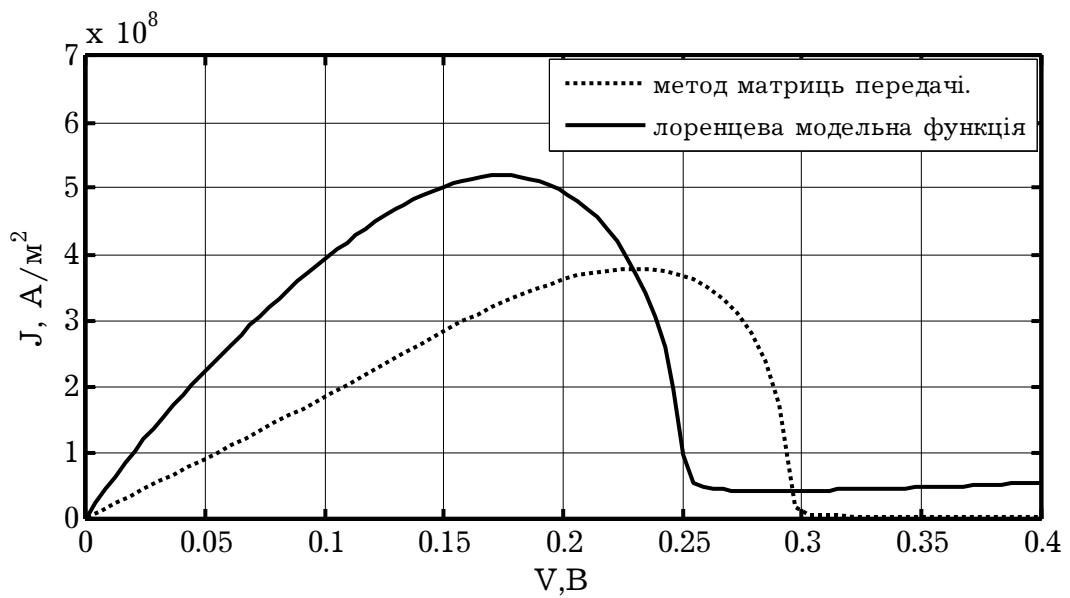


Рис. 8.14. Розрахована вольт-амперна характеристика структури, зображеної на рис. 8.6 за температури 300 К. Розсіювання не враховується

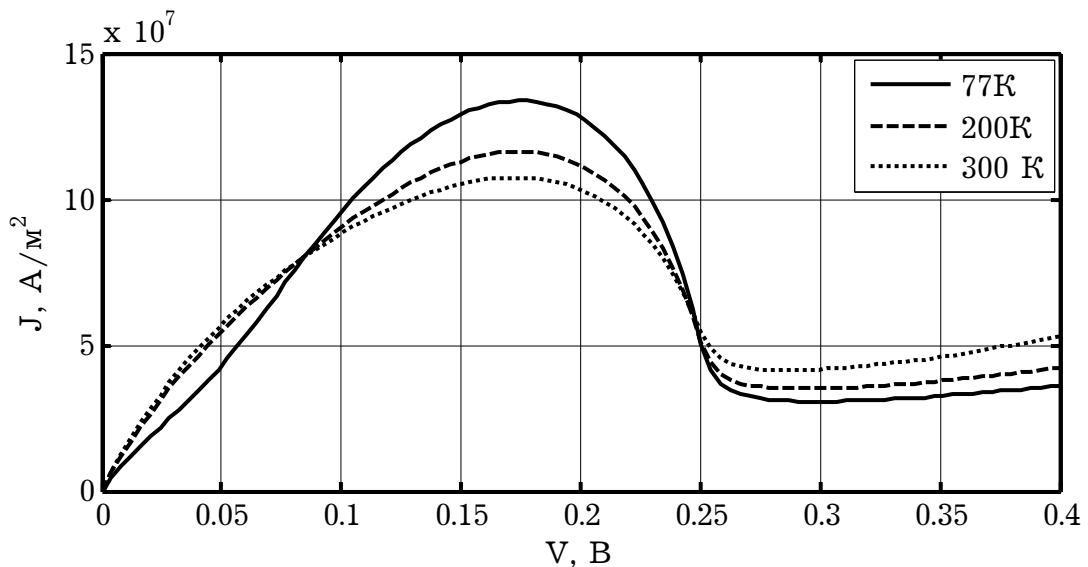


Рис. 8.15. Розрахована вольт-амперна характеристика структури, зображеної на рис. 8.6 за різних температур з врахуванням розсіювання

8.3.4. Метод функцій Ейрі

Описані вище методи дозволяють знаходити коефіцієнт передачі квантової системи в наближенні плоских зон. Більш коректно вважати, що напруга вздовж структури змінюється лінійно, що є найкращим наближенням за умови нехтування просторовим зарядом. За таких умов коефіцієнт передачі можна знайти так званим методом функцій Ейрі [8.23, 8.24]. Цей метод також використовують для тестування чисельних моделей та в якості початкового наближення в процесі пошуку самоузгодженого потенціалу.

Розглянемо його застосування для знаходження матриці передачі квантової системи, що зображена на рис. 8.5, в: таку форму мала б зона провідності РТД, якби перерозподілу заряду в ньому не було.

У першій та п'ятій областях системи – це резервуари – як і раніше розв'язком рівняння Шредінгера з ефективною масою є суперпозиція плоских хвиль – рівняння (8.24) та (8.25).

Вважаючи падіння напруги вздовж всієї квантової області рівномірним, рівняння Шредінгера для i -ї області ($i = 2, 3, 4$) можна записати так:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m_i^*}{\hbar^2} (E_z - U_i(z)) \psi = 0, \quad (8.54)$$

у якому $U_i(z) = \frac{(eV - U_i)}{L} (z - z_1)$, де U_i – потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки в Γ -долині в i -му шарі ($U_{2(4)} = 0$, $U_3 = 1$ еВ для AlAs/GaAs РТД), L – довжина квантової області, V – падіння напруги на квантовій області.

Введемо позначення: $F = -eV/L$ – сила, що діє на електрон в квантовій області, та перепишемо (8.54) в еквівалентній формі:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2m_i^*F}{\hbar^2} \left(z + \frac{E_z - Fz_1 - U_i(z)}{F} \right) \psi = 0. \quad (8.55)$$

За допомогою заміни змінної:

$$\xi_i(z) \equiv - \left(z + \frac{E_z + Fz_1 - U_i}{F} \right) \left(\frac{2m_i^*F}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (8.56)$$

рядом перетворень [8.25, 8.26] рівняння (8.55) може бути зведено до рівняння Ейрі:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi_i^2} - \xi_i \psi = 0, \quad (8.57)$$

лінійно незалежними розв'язками якого є функція Ейрі $Ai(\xi_i)$ та компліментарна функція Ейрі $Bi(\xi_i)$:

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du,$$

$$\text{Bi}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \left[\exp\left(-\frac{u^3}{3} + zu\right) + \sin\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) \right] du.$$

Як і у випадку з плоскими хвилями, розв'язок рівняння Шредінгера (8.55) в i -й області ($i = 2, 3, 4$) запишемо у вигляді їх лінійної суперпозиції в даному випадку функцій Ейрі:

$$\psi_i(z(\xi_i)) = A_i \text{Ai}(z(\xi_i)) + B_i \text{Bi}(z(\xi_i))$$

Таким чином, для кожної з п'яти областей нам відомий вид розв'язку рівняння Шредінгера:

$$\psi_i(z) = A_i g_i(z) + B_i h_i(z),$$

де g_i та h_i – плоскі хвилі, якщо $i \in \{1, 5\}$ або функції Ейрі, якщо $i \in \{2, 3, 4\}$.

Проводячи «зшивання» розв'язків рівняння Шредінгера по обидва боки від гетерограниць z_i ($i = 1, 2, 3, 4$) по формулам (8.38) та (8.39), можна встановити зв'язок між амплітудами відповідних хвиль (функцій Ейрі або плоских хвиль):

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (8.58)$$

де $\mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} g_{i+1} & h_{i+1} \\ \frac{1}{m_{i+1}^*} g_{i+1}' & \frac{1}{m_{i+1}^*} h_{i+1}' \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} g_i & h_i \\ \frac{1}{m_i^*} g_i' & \frac{1}{m_i^*} h_i' \end{bmatrix}$ – відповідна матриця передачі з i в $i+1$ шар. Тут штрихом позначено диференціювання по z .

Кроки, які необхідно надалі провести, щоб отримати коефіцієнт передачі, було описано в розд. 8.3.1 та на початку розд. 8.3. Слід звернути увагу, що у випадку, коли функціями g_i та h_i є функції Ейрі, що залежать від ξ_i , а вже потім від z , то їх, звичайно ж, слід диференціювати по правилам диференціюванням складної функції:

$$f(\xi(z))'_z = \frac{d\xi}{dz} \cdot \frac{df}{d\xi};$$

крім того, зауважимо, що введена змінна $\xi_i(z)$ буде різною для кожної з областей, в якій вона вводиться.

Функції Ейрі та їх похідні зазвичай входять в стандартний набір функцій пакетів моделювання. Зокрема, вони наявні в *MatLab* та *MathCad*. Тому чисельна реалізація методу функцій Ейрі лише трохи більш громіздка за метод матриць передачі.

Результати розрахунку коефіцієнту проходження та ВАХ для ДБКС резонансно-тунельного діоду (рис. 8.6) методом функцій Ейрі показано на рис. 8.16 та 8.17.

Незначним недоліком методу функцій Ейрі є його чисельна нестійкість при низьких напругах V , що слідує з формули (8.56), де наявне ділення на V , що радикально зменшує його точність за вказаних умов. Для модельованого РТД діапазоном нестійкості є $V \in (0; 0.05 \text{ В})$, де струм методом функцій Ейрі розрахувати не вдалося. Однак цей фактор не є суттєвим з двох причин:

- 1) ВАХ РТД для низьких напруг задовільно моделюється методом матриць передачі, що демонструє порівняння на рис. 8.17;
- 2) Діапазон низьких напруг не є релевантним з точки зору функціонування та застосування РТД.

Метод функцій Ейрі можна застосовувати для довільної структури, в рамках кожного шару якої ефективна маса залишається незмінною або ж якщо стехіометричний склад сполук, що формують шари, змінюється так, що потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки змінюється лінійно [8.24, 8.27], наприклад, як це показано на рис. 8.5, з. На жаль, в рамках методу функцій Ейрі неможливо врахувати зміну ефективної маси в варізонних шарах; він може бути врахованим лише в рамках чисельних моделей.

Не дослідженими в літературі залишаються питання про можливість чисельного моделювання РТД, апроксимуючи потенціальний рельєф *кусково-лінійними* функціями таким же чином, як це показано для *кусково-сталих* функцій на рис. 8.5, б.

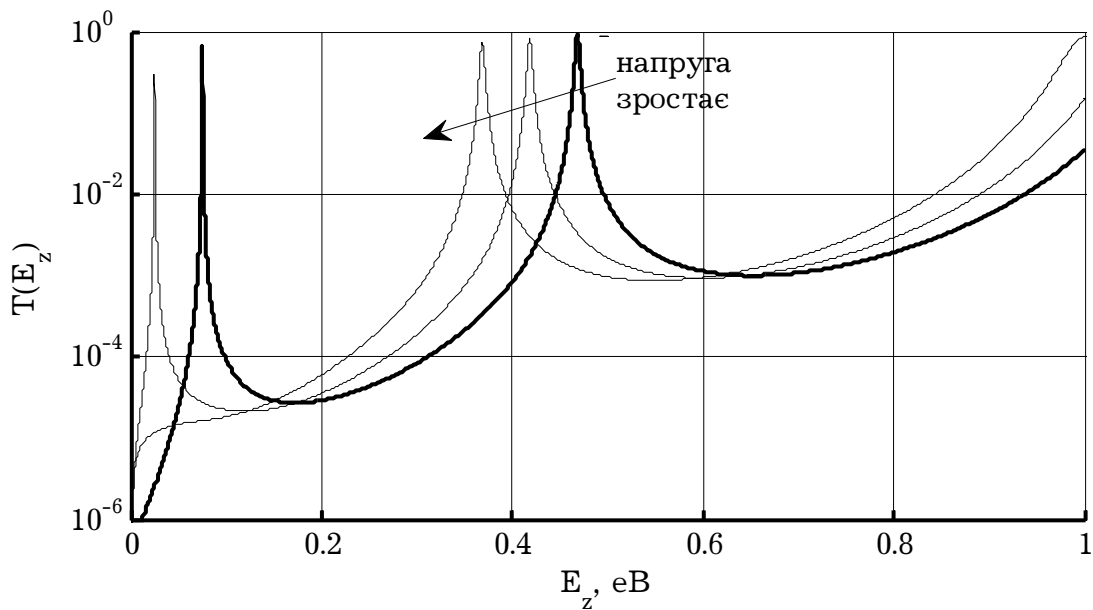


Рис. 8.16. Коефіцієнт передачі за напруги 0.1, 0.2 та 0.3 В, розрахований методом функцій Ейрі для структури, що показана на рис. 8.6

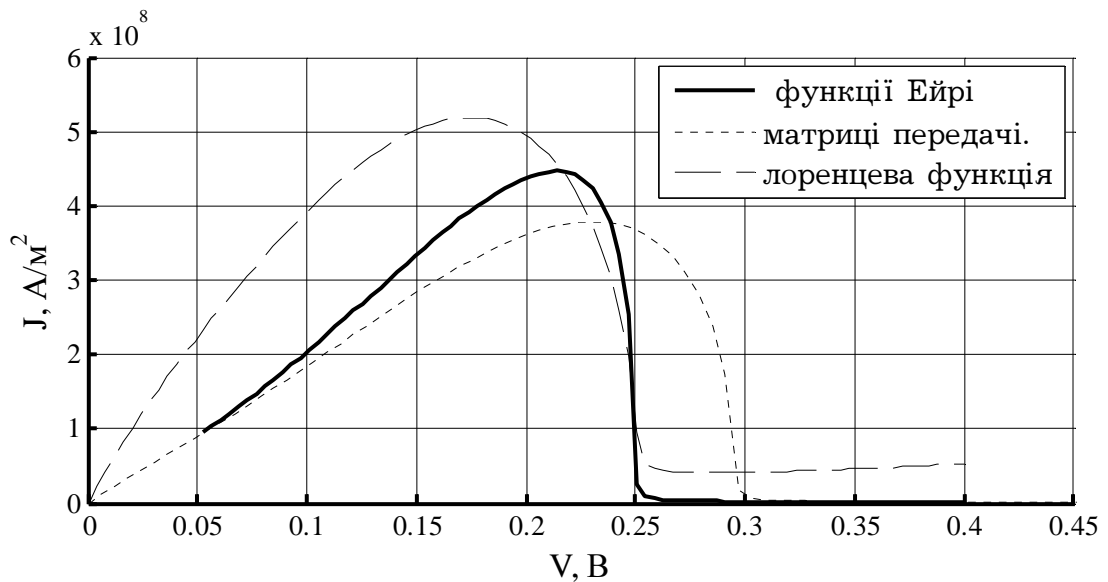


Рис. 8.17. ВАХ РТД, розрахована з залученням методу функцій Ейрі для структури, що показана на рис. 8.6 на фоні характеристик, розрахованих іншими методами

8.3.5. Метод функцій параболічного циліндра

Однією з можливих галузей застосування резонансно-тунельних діодів є їх використання в багатозначній логіці [8.28], оскільки ВАХ РТД принципово може мати стільки ж піків, скільки метастабільних рівнів існує у їх квантовій ямі. Для багатозначної логіки бажано, щоб пікові напруги були рівновіддаленими одне від одного, що, в свою чергу, потребує, щоб рівні енергії в квантовій ямі РТД також були рівновіддаленими одне від одного.

В РТД з прямокутною квантовою ямою відстань між метастабільними рівнями енергії ΔE_i збільшується приблизно пропорційно квадрату номеру рівня: $\Delta E_i \sim n_i^2$, – що створює перешкоди для застосування РТД з прямокутними квантовими ямами в багатозначній логіці. Як буде показано нижче, умові рівновіддаленості піків струму на ВАХ РТД задовольняє така конструкція діоду, в якій зміна стехіометричного складу в ямі обумовлює формування параболічної квантової ями [8.29, р. 6]. Такого ефекту можна досягнути, наприклад змінюючи молярну частку Al сполучі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ від $x = 0$ в центрі ями до $x = 1$ в бар'єрах (якщо вони є) по закону $x(z) \sim z^2$; результируючий

потенціальний рельєф для такого роду варізонної структури з (без) AlAs - бар'єру показано на рис. 8.5, ∂ (e).

Якщо вважати, що падіння напруги $V(z)$ вздовж активної області РТД лінійне, потенціальну енергію електрона в області квантової ями буде визначатися виразом:

$$U(z) = E_c(z) - eV(z), \quad (8.59)$$

де $E_c(z) = \alpha \cdot (z - a/2)^2$ - потенціальна енергія електрона в полі кристалічної решітки ($\alpha = 4\Delta/a^2$), де ΔU - потенціальна енергія електронів по краям ями, a - ширина ями (див. рис. 8.5, ∂). В середині потенціальної ями потенціальна енергія $E_c(a/2) = 0$; $V(z) = -V \cdot z/a$, де через V позначено сумарну напругу, що прикладена до структури.

У вказаних позначеннях рівняння Шредінгера ефективної маси запишеться:

$$\Psi''(z) - \frac{2m^*}{\hbar^2} \left(\frac{4\Delta U}{a^2} \left(z - \frac{a}{2} \right)^2 - \frac{V}{a} z - E_z \right) \Psi(z) = 0, \quad (8.60)$$

Рядом перетворень дане рівняння може бути зведене до рівняння [8.26, p. 504]:

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} - \left(\frac{\xi^2}{4} + \lambda \right) \Psi(\xi) = 0, \quad (8.61)$$

де:

$$\xi = \sqrt[4]{4\sigma}x, \quad x = z - \frac{a}{2} \left(1 + \frac{V}{4\Delta U} \right), \quad \sigma = \frac{8m^* \Delta U}{\hbar^2 a^2};$$

$$\lambda = \frac{2m^*}{\hbar^2 \sqrt{4\sigma}} \tau, \quad \tau = -\Delta U \left[\left(1 + \frac{V}{4\Delta U} \right)^2 - 1 \right] - E_z.$$

Двома лінійно незалежними розв'язками рівняння (8.61) є так звані функції параболічного циліндра:

$$y_1 = e^{-\frac{\xi^2}{4}} M \left(\frac{1}{2} \lambda + \frac{1}{4}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \xi^2 \right), \quad (8.62)$$

$$y_2 = \xi e^{-\frac{\xi^2}{4}} M \left(\frac{1}{2} \lambda + \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \xi^2 \right), \quad (8.63)$$

де $M(a; b; z)$ [8.26, р. 686] – вироджений гіпергеометричний ряд:

$$M(a; b; z) = 1 + \frac{a}{b} z + \frac{a(a+1)z^2}{b(b+1)2!} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k z^k}{(b)_k k!},$$

де $(a)_n$ і $(b)_n$ – ряди, визначені як:

$$(a)_n = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-1),$$

$$(b)_n = b(b+1)(b+2)\dots(b+n-1).$$

Повертаючись до нашої задачі, можна сказати, що в області II рис. 8.5, δ розв'язок рівняння Шредінгера слід шукати у вигляді:

$$\psi_2(z) = A_2 y_1(\xi(x(z))) + B_2 y_2(\xi(x(z))),$$

де y_1 та y_2 визначаються формулами (8.62) та (8.63).

Для знаходження коефіцієнту проходження необхідно повторити дії, аналогічні тим, що вказані при розгляді методу матриць передачі чи функцій Ейрі, звертаючи увагу, що $y_{1(2)}$ слід диференціювати по z як складну функцію. Узагальнення методу на випадок структури, у яких параболічна квантова яма оточена бар'єрами (рис. 8.5, e) детально розглянуто в [8.30].

Цей метод можна застосовувати метод для будь-якого кусково-квадратичного потенціального профілю, або профілю, що може бути ним апроксимовані, однак такі роботи поки що відсутні⁹.

Результати моделювання коефіцієнту проходження для структури, зображеної на рис. 8.18, показують, що відстань між піками коефіцієнту проходження електрона ΔE_z однакова (рис. 8.19); це обумовлює те, що на ВАХ, на відміну від випадку прямокутної потенціальної ями інтервал напруг ΔV між кожним наступним піком не збільшується, а залишається практично сталим (рис. 8.20).

⁹ Наскільки нам відомо, функції параболічного циліндра вперше було застосовано для моделювання коефіцієнту проходження РТД з параболічною потенціальною ямою в бакалаврській роботі студента кафедри фізичної та біомедичної електроніки Мар'єнкова В. В. [7.30]

Слід відмітити, що для параболічної квантової ями коефіцієнт проходження при збільшенні поперечної енергії електрона E_z зростає значно швидше, ніж для прямокутної (оскільки бар'єр стає тоншим і, відповідно, більш «прозорим»). Відтак контрастність ВАХ за решти рівних умов виявляється меншою. Можливо, це створить проблему для застосуванні таких діодів при кімнатній температурі, оскільки неминуче релаксаційне розширення енергетичних рівнів може повністю знищити область від'ємної диференціальної провідності.

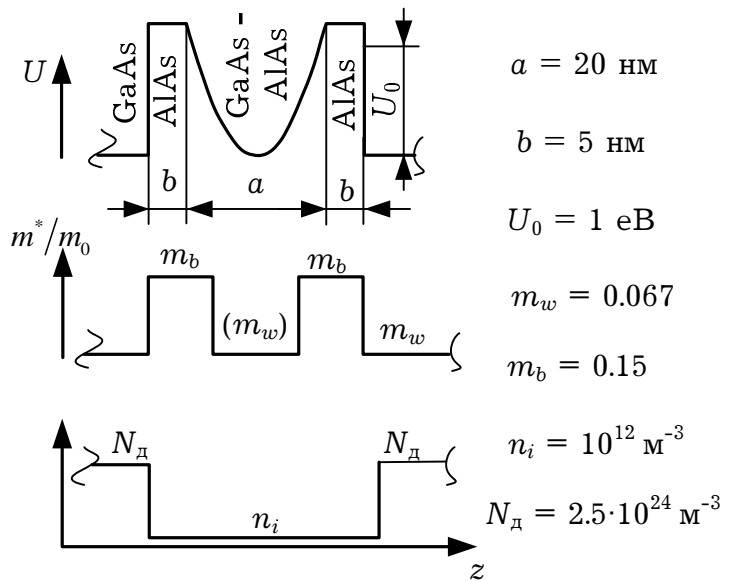


Рис. 8.18. Параметри модельного РТД з параболічною квантовою ямою

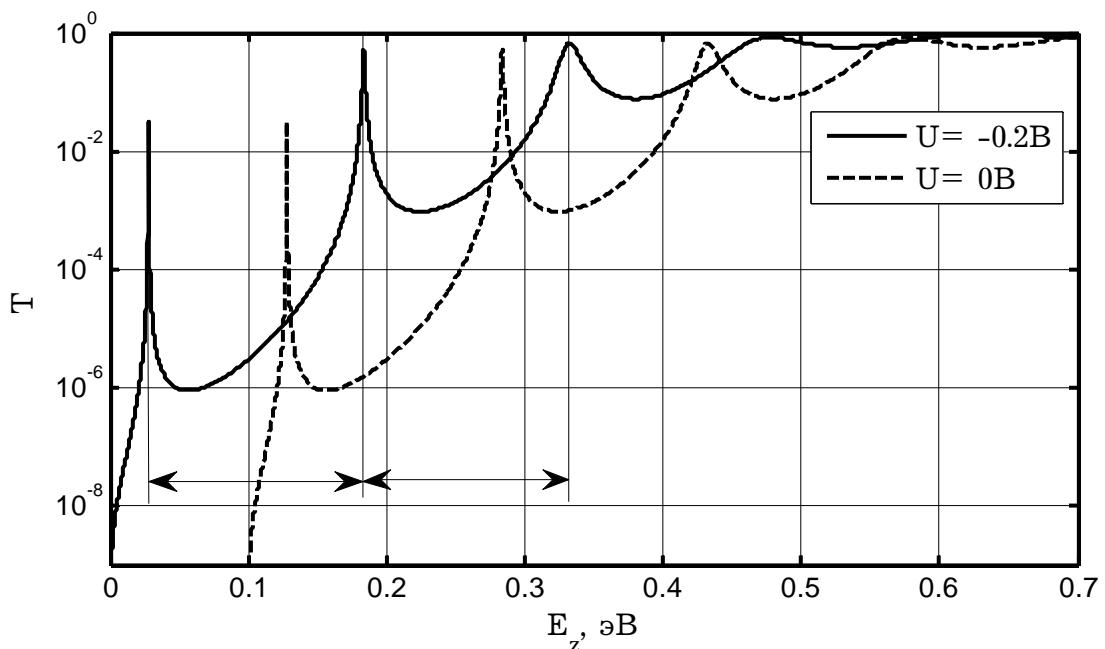


Рис. 8.19. Коефіцієнт проходження квантової системи з параболічною квантовою ямою (рис. 8.18)

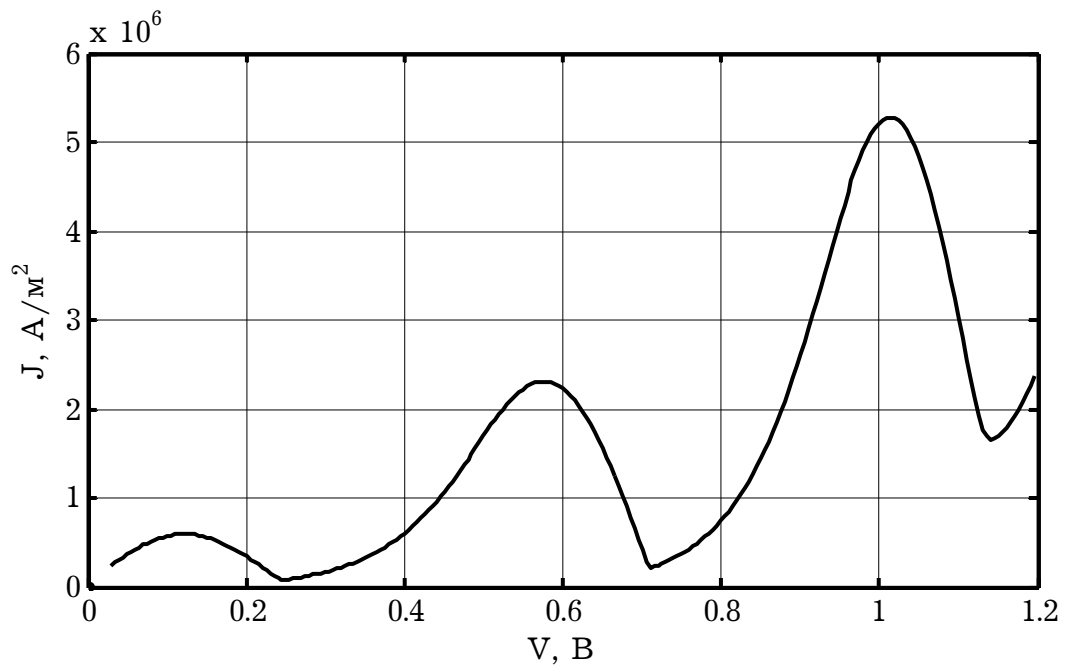


Рис. 8.20. Розрахована ВАХ квантової системи з параболічною квантовою ямою, зображеної на рис. 8.18, при кімнатній температурі.

* * *

Теоретично за допомогою методу матриць та інших умовно-аналітичних методів можна знаходити коефіцієнти проходження через структури з довільним потенціальним рельєфом, якщо апроксимувати останній кусково-сталими, кусково-лінійними чи кусково-квадратичними функціями як це показано на рис. 8.5, в для випадку кусково-сталих функцій. Збільшуючи кількість просторових інтервалів, на які розбивається область моделювання, можна досягти будь-якої точності. Однак значною перепорою на шляху досягнення цієї мети стоїть чисельна нестійкість методів, що залучають матриці передачі. Так, для вже розглянутої структури (рис. 8.6), якщо кількість шарів збільшити до 20 (десятибар'єрна квантова система) і більше, метод втрачає чисельну стійкість за рахунок поганої обумовленості результуючої матриці передачі системи. В результаті значення коефіцієнту проходження для малих енергій можуть досягати нефізичних значень більше одиниці (рис. 8.21).

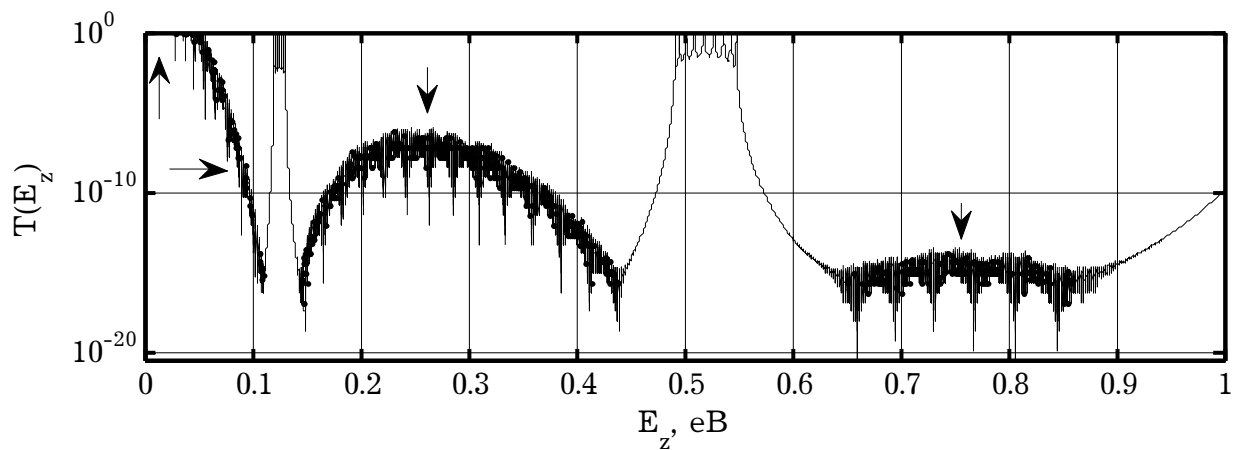


Рис. 8.21. Чисельна нестійкість методу матриць передачі, застосованого для пошуку $T(E_z)$ десятибар'єрної квантової системи, параметри шарів якої взято з рис. 8.5. Області нестійкості показані стрілками

Але навіть якщо процедура множення матриць не призводить до появи погано обумовленої матриці, вона все ж займає не виправдано багато часу на обчислення, якщо кількість просторових інтервалів досить велика. Це буде мати місце, якщо рельєф є сильно нелінійним, що спостерігається, наприклад, при врахуванні просторового заряду.

З окреслених вище причин постає необхідність у створенні інших методів знаходження коефіцієнту передачі. Як буде показано нижче, цього можна досягти, використовуючи чисельні методи для знаходження коефіцієнту передачі.