



УДК 621.315.592

Я. В. Иванова, В. И. Зубков

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)

Численный расчет коэффициента прозрачности легированной гетероструктуры с квантовой ямой методом внутренней задачи

Реализован численный метод определения коэффициента прозрачности гетероструктуры с одиночной квантовой ямой (КЯ), основанный на решении задачи во внутренней области квантового ящика. Анализ результатов расчета позволил интерпретировать данные температурных спектров полной проводимости для образцов с квантовой ямой $In_{0.29}Ga_{0.71}As/GaAs$. Обнаружен эффект резонансного туннелирования, возникающий в верхней области КЯ, которая имеет вид двухбарьерной структуры вследствие одинакового легирования обкладок ямы. Результаты расчета хорошо коррелируют с экспериментальными данными. При увеличении обратного приложенного к структуре смещения вероятность резонансного туннелирования носителей заряда из КЯ резко падала вследствие нарушения симметрии барьеров и соответствующего падения их коэффициента прозрачности.

Квантовая яма, потенциальные барьеры, коэффициент прозрачности, резонансное туннелирование, спектроскопия адмиттанса, эмиссия носителей заряда

На сегодняшний день полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для опто- и наноэлектроники. Наличие эффекта размерного квантования предоставляет множество возможностей по их использованию как при разработке новых приборов, так и при совершенствовании уже существующих. Другой квантово-механический эффект – туннелирование носителей заряда сквозь тонкий потенциальный барьер – также находит широкое практическое применение. Для приборов наноэлектроники важнейшими свойствами эффекта туннелирования носителей заряда являются, в частности, высокая скорость их выброса через барьер и практически полная ее независимость от температуры [1], [2]. В случае многослойных гетероструктур, кроме обычного туннелирования, возможно наблюдать резонансное туннелирование, на основе которого созданы резонансно-туннельные диоды и транзисторы, квантово-каскадные лазеры, логические элементы и др.

Основной характеристикой туннельного эффекта является коэффициент пропускания (прозрачности) потенциального барьера или системы барьеров. Его определение является ключевым при проектировании приборов наноэлектроники. Расчет этого параметра в литературе производится, как правило, на примере системы прямоугольных потенциальных барьеров с/или без КЯ [3], [4] и не учитывает реальный вид потенциала. В настоящей статье представлен численный расчет коэффициента пропускания для реальной легированной гетероструктуры с одиночной КЯ, форма дна зоны проводимости которой сформирована легированием примеси.

Аналитический расчет коэффициента пропускания. Рассмотрим частицу, движущуюся в потенциальном поле $V(x)$, которое отлично от нуля в области пространства $0 < x < L$. Волновая функция частицы $\psi(x)$ подчиняется уравнению Шредингера:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0. \quad (1)$$

Решение (1) есть суперпозиция двух частных решений, соответствующих падающим и отраженным волнам (источник частиц расположен слева):

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + re^{-ikx} \text{ при } x < 0; \\ \psi(x) &= te^{ikx} \text{ при } x > 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ – волновой вектор частицы (E – энергия частицы; m – ее эффективная масса).

Падающие и отраженные волны можно характеризовать потоками вероятностей. Запишем выражения для потоков падающих j_0 , отраженных j_R и прошедших j_T частиц [5]:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_R = \frac{\hbar k}{m}|r|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k}{m}|t|^2.$$

Тогда для коэффициентов прохождения и отражения от барьеров имеем:

$$T(E) = \frac{j_T}{j_0} = |t|^2, \quad R(E) = \frac{j_R}{j_0} = |r|^2.$$

Из квантовой механики известно, что при наличии двух тонких потенциальных барьеров между ними возможна конструктивная интерференция волн, приводящая к формированию квазисвязанного состояния, которое обеспечивает резонансное пропускание [6]. Квазисвязанные состояния приближенно характеризуются двумя параметрами: энергетическим положением резонанса и его шириной. Ширина резонанса зависит от частоты колебания электрона между барьерами и вероятности его туннелирования через барьеры. При этом ширина уровня не может быть бесконечно малой, так как вероятность ухода электрона из ямы в области положительных энергий конечна. Резонансы такого типа называются резонансами Брейта–Вигнера. Вблизи резонанса коэффициент прозрачности как функция энергии должен иметь форму лоренциана, характеризующегося энергией квазисвязанного состояния и шириной резонанса Γ . Чем выше идентичность потенциальных барьеров (соотношение высоты и ширины, обеспечивающее одинаковую прозрачность отдельного барьера), тем выше вероятность резонансного пропускания.

Решение (1) можно выполнить несколькими способами (часто методом матриц переноса и т. д.). Будем использовать метод решения внутренней задачи [7], в котором характеристики рас-

сеяния выражаются через волновую функцию, заданную во внутренней области $0 < x < L$.

Запишем условия сшивки волновой функции (2) и ее производной при $x = 0$:

$$\begin{aligned} \psi(0) &= 1 + r, \\ \psi'(0) &= ik(1 - r). \end{aligned} \quad (3)$$

Исключая r из уравнений (3), получим:

$$\psi'(0) + ik\psi(0) = 2ik.$$

Аналогично найдем из условий сшивки при $x = L$

$$\psi'(L) - ik\psi(L) = 0.$$

Если внутренняя задача решена, то можно найти коэффициенты отражения и прохождения:

$$r = -1 + \psi(0), \quad t = \psi(L).$$

На рис. 1 представлен аналитический расчет коэффициента пропускания: a – для одиночного прямоугольного барьера; b – двухбарьерной структуры. Он демонстрирует принципиальную разницу между туннелированием, под которым понимается конечная вероятность подбарьерного проникновения волновой функции, и резонансным туннелированием с пиковой прозрачностью при энергии частицы, существенно меньшей высоты барьера (в рассматриваемом случае его высота $V = 0.04$ эВ).

Численное решение внутренней задачи. Запишем уравнение Шредингера для волновой функции $\psi_n \equiv \psi(x_n)$ ($n = 0, 1, \dots, N-1, N$), заданной на дискретном множестве точек $x_n = n\Delta$ (в узлах сетки):

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + u_n \psi_n = 0, \quad (4)$$

где

$$u_n = -2 + \frac{2m\Delta^2}{\hbar^2}(E - V_n), \quad V_n \equiv V(x_n).$$

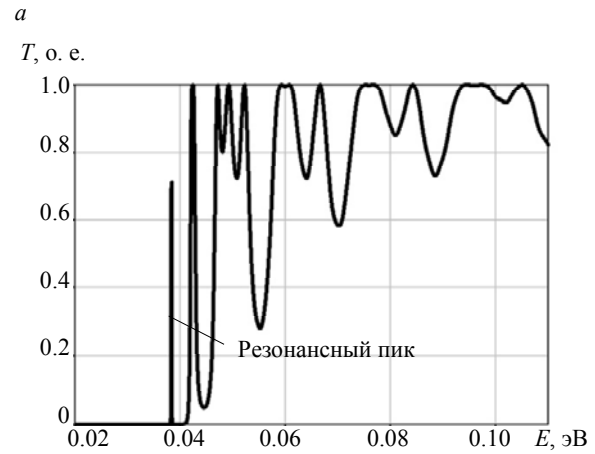
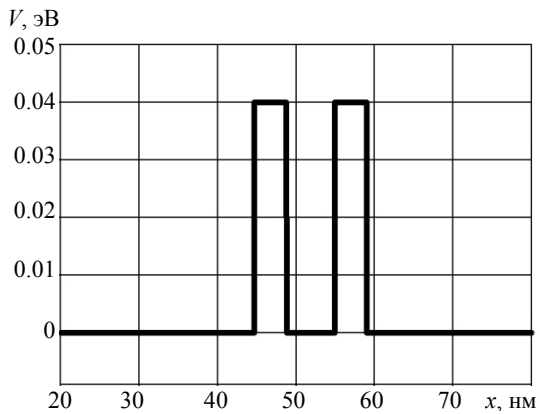
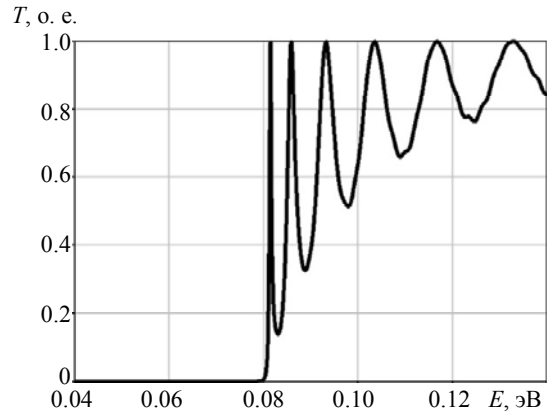
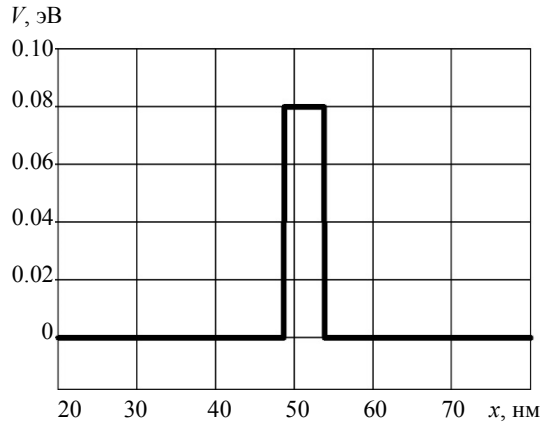
Перепишем граничные условия для дискретной сетки:

$$\psi_1 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)\psi_0 = 2ik\Delta, \quad (5)$$

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + ik\Delta\right)\psi_N = 0. \quad (6)$$

Решение (4) ищем в виде

$$\psi_{n+1} = R_n \psi_n. \quad (7)$$



б
Рис. 1

Подставив решение в (5) и сопоставив с (6), получим рекуррентное соотношение для вспомогательных функций R_n :

$$R_{n-1} = -\frac{1}{u_n + R_n}.$$

Подставив $\psi_N = R_{N-1}\psi_{N-1}$ в (6), найдем:

$$R_{N-1} = -\frac{1}{\frac{u_N}{2} + ik\Delta}. \quad (8)$$

Теперь можно стартовать с R_{N-1} , которое определяется (8), и, двигаясь в обратном направлении, найти все вспомогательные функции: R_{N-2} , R_{N-3} , ..., R_1 , R_0 . Зная R_0 , можем получить начальное условие для волновой функции. Действительно, подставив $\psi_1 = R_0\psi_0$ в (5), получим:

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)}. \quad (9)$$

Таким образом, стартуя с (9) и используя рекуррентное соотношение (7), найдем волновую функцию во всех внутренних узлах сетки. Ам-

плитудные коэффициенты отражения и прохождения находятся согласно

$$r = -1 + \psi_0, \quad t = \psi_N.$$

Данный алгоритм применим не только для системы классических барьеров, но и в комбинированном случае, когда между барьерами имеется яма, дно которой находится при отрицательных значениях потенциала. В качестве такого примера на рис. 2 приведен расчет коэффициента прозрачности по изложенному алгоритму для структуры с двумя прямоугольными барьерами и КЯ посередине. Пик, соответствующий резонансному пропусканию, наблюдается при энергии электрона 47 мэВ. Заметим, что связанное состояние, существующее в яме, не проявляется в спектре пропускания, поскольку вероятность туннелирования с него равна нулю.

Моделирование коэффициента прозрачности легированной структуры с КЯ. Расчет коэффициента прозрачности легированной гетероструктуры осуществлялся для реальной формы дна зоны проводимости полупроводника. С этой целью методом вольт-фарядных характеристик измерялось распределение носителей заряда в гетероструктуре с оди-

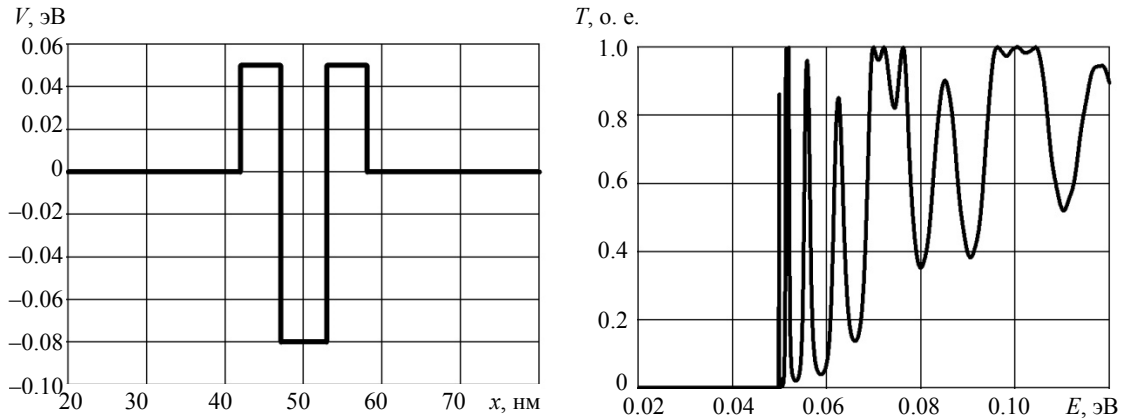


Рис. 2

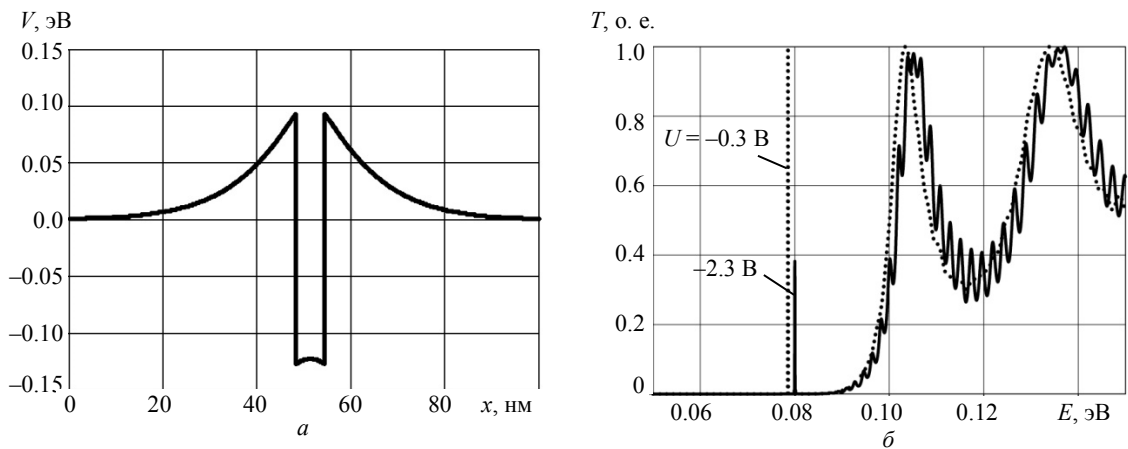


Рис. 3

ночной КЯ $\text{In}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}/\text{GaAs}$. На втором этапе проводилось моделирование распределения носителей заряда в данной структуре путем самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона в одноэлектронном приближении. Процедура подгонки завершалась при совпадении рассчитанного и экспериментально измеренного концентрационных профилей, что давало искомое распределение потенциала. Подробности разработанного метода самосогласованного решения и детальное описание образцов приведено в [8]–[10].

На рис. 3, б представлены результаты численного расчета коэффициента прозрачности гетероструктуры с КЯ $\text{In}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}/\text{GaAs}$ для двух значений приложенного обратного смещения (в области максимума туннельной и термоактивной составляющих высокочастотной проводимости). На рис. 3, а изображен профиль потенциала, для которого осуществлялся расчет (при смещении $U = -0.3$ В; профиль потенциала для $U = -2.3$ В отличается на единицы процента с левой стороны КЯ и не показан на рисунке).

Верхняя область КЯ (соответствующая значениям $V > 0$ В) представляет собой двухбарьер-

ную структуру, барьеры которой формируются вследствие легирования образца. В результирующем спектре пропускания на рис. 3, б отчетливо виден резкий пик, соответствующий подбарьерному резонансному туннелированию. При увеличении обратного смещения электрическое поле достигает области ямы, нарушая симметрию барьеров, и вероятность резонансного туннелирования носителей заряда резко падает (с 1 до 0.39 в рассматриваемом случае). Соответственно, меняется коэффициент прозрачности структуры.

Таким образом, легированную наногетероструктуру с одиночной КЯ следует рассматривать как двухбарьерную структуру с ямой в центре. Наличие квазистационарного уровня (квазирезонанса) и высокая идентичность барьеров при малых обратных смещениях обеспечивают высокую вероятность резонансного туннелирования, т. е. максимальный вклад туннельной составляющей в проводимость, что хорошо подтверждается экспериментальными данными.

Авторами были измерены образцы гетероструктуры с КЯ $\text{In}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}/\text{GaAs}$ методами спектроскопии полной проводимости в диапазоне низких температур. Модулирующий тесто-

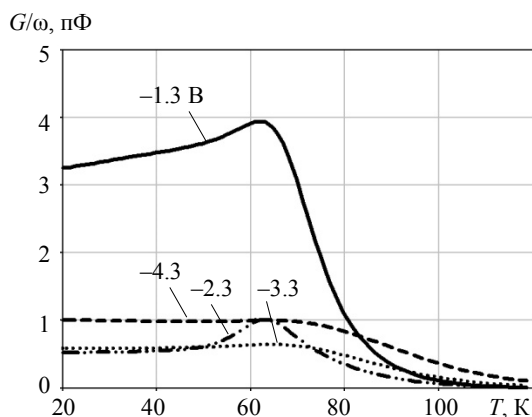


Рис. 4

вый сигнал различной частоты ($10^5 \dots 10^6$ Гц) вызывал перезарядку (эмиссию/захват) носителей заряда в КЯ. Отклик системы регистрировался *RLC*-метром Agilent 4980A [11]. На рис. 4 приведены температурные спектры адмиттанса (зависимость проводимости G , нормированной на частоту, от температуры) при различных приложенных смещениях. Кривые имеют два характерных участка – «полки» с независимой от температуры проводимостью, где превалирует туннелирование из КЯ, и пики, соответствующие термоактивационному выбросу носителей заряда из ямы. Как видно, вклад этих механизмов различен при изменении обратного смещения, приложенного к

образцу. Отчетливо видно, что независимые от температуры участки в спектрах проводимости, соответствующие высокой доле туннельного тока, опускаются по амплитуде с увеличением приложенного смещения.

Реализован алгоритм численного расчета коэффициента пропускания структуры с КЯ. Проведенный анализ для реальных легированных гетероструктур с КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ показал, что в условиях симметричного легирования барьеров доминирует вклад резонансно-туннельной составляющей в эмиссию носителей заряда из КЯ. При нарушении симметрии барьеров эта составляющая резко уменьшается. Далее с увеличением приложенного смещения имеет место обычный туннельный эффект, а при достижении в ходе эксперимента границы области объемного заряда геометрического положения КЯ начинается термополевая эмиссия. Выполненные расчеты подтверждаются экспериментальными результатами, которые указывают на принципиальную роль резонансного туннелирования в эмиссии носителей заряда из КЯ.

Авторы выражают благодарность профессору кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ» д-ру физ.-мат. наук Г. Ф. Глинскому за плодотворную дискуссию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kapteyn C. M. A. Carrier emission and electronic properties of self-organized semiconductor quantum dots: dissertation. Berlin: Mensch&Buch Verlag, 2001. 156 p.
2. Schmalz K., Yassievich I. N. Characterization of $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ quantum wells by space-charge spectroscopy // *Physical Review B*. 1994. Vol. 50, № 1. P. 14287–14301.
3. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники. Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
4. Аладышкин А. Ю. Туннельные явления в нанofизике / Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
6. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
7. Сатанин А. М. Динамика электронов в наноструктурах / ННГУ. Н. Новгород, 2006. 96 с.
8. Зубков В. И. Диагностика гетероструктур с квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ методом вольт-фарадных характеристик: разрывы зон, уровни квантования, волновые функции // *ФТП*. 2007. Т. 41, вып. 3. С. 331–337.
9. Зубков В. И., Петровская А. Н. Моделирование энергетического спектра носителей заряда легированных гетероструктур с одиночными квантовыми ямами в реальном профиле энергетических зон: проводимости и валентной: свид. о регистрации программы для ЭВМ. Рос. Федерация. № 2010615375, выд. 20.08.2010 г.
10. Зубков В. И. Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона // *ФТП*. 2006. Т. 40, вып. 10. С. 1236–1240.
11. Зубков В. И. Диагностика полупроводниковых наногетероструктур методами спектроскопии адмиттанса. СПб.: Элмор, 2007.

Ya. V. Ivanova, V. I. Zubkov
Saint Petersburg Electrotechnical University «LETI»

NUMERICAL CALCULATION OF TRANSPARENCY COEFFICIENT FOR A DOPED HETEROSTRUCTURE WITH QUANTUM WELL BY METHOD OF INTERNAL PROBLEM

The numerical method of determining the transparency coefficient for a heterostructure with a single quantum well, based on solving the problem for the quantum box inner region, is developed. The analysis of calculations has allowed interpreting the data of temperature admittance spectra for samples with quantum well $\text{In}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}/\text{GaAs}$. The effect of resonant tunneling has been revealed, arising in the upper region of the quantum well, which presents a two-barrier structure due to identical doping of quantum well cladding layers. The calculations correlate well with the experimental data. At the increase of applied reverse bias the probability of carriers resonant tunneling from the quantum well drops sharply because of the symmetry violation of potential barriers and the corresponding drop in their transparency coefficient.

Quantum well, potential barriers, transparency coefficient, resonant tunneling, admittance spectroscopy, charge carrier emission

УДК 519.6 + 530.1

Х. Х. Муминов
Академия наук Республики Таджикистан

Ф. Ш. Шокиров
Физико-технический институт им. С. У. Умарова АН РТ

Динамика взаимодействия топологических солитонов в обращенном времени

Приведены результаты численного моделирования взаимодействия топологических солитонов $(2 + 1)$ -мерной $O(3)$ нелинейной сигма-модели в обращенном времени. На первом этапе разработаны модели взаимодействий топологических вихрей, где в зависимости от динамических параметров наблюдаются процессы их распада на локализованные возмущения и поэтапной аннигиляции. Также рассмотрены модели поэтапной аннигиляции топологических вихрей при их взаимодействии с 180° -градусными доменными границами. На основе полученных моделей разработаны начальные условия для проведения численного моделирования процессов взаимодействия в обращенном времени. Получены модели, описывающие полное восстановление исходного топологического поля взаимодействующих солитонов при объединении локализованных возмущений и волн излучений. Также получены модели, описывающие процессы формирования топологических вихрей в плоскости доменной границы и их последующей эмиссии. Таким образом, подтверждено свойство T -инвариантности исследуемой теоретико-полевой модели. Численные расчеты проведены в расслоенном пространстве на основе методов теории конечных разностных схем с использованием свойств стереографической проекции. Эксперименты проведены при различных значениях индекса Хопфа топологических вихрей. Предложен комплексный программный модуль, реализующий специальный алгоритм численного расчета эволюции взаимодействия пространственно-временных топологических структур в обращенном времени.

Сигма-модель, разностная схема, расслоенное пространство, T -инвариантность, топологический солитон, численное моделирование

Наиболее общей характеристикой физических законов является их симметрия, соответствующая законам сохранения, при этом понятие симметрии имеет более широкий и глубокий смысл, чем, например, в обычной геометрии [1]. Рассмотрим

свойство T -инвариантности $(2 + 1)$ -мерной суперсимметричной $O(3)$ нелинейной сигма-модели (НСМ). Предложенная впервые на рубеже 50–60-х гг. XX в. для эффективного описания природы безмассовых возбуждений теория НСМ при-