

УДК 593.293.011

А.А. ШТЫГАШЕВ

КОЛЛАПС РЕЗОНАНСОВ В СВЕРХРЕШЕТКАХ

Исследовано явление отражения электронной волны при резонансном прохождении через периодические структуры конечной длины с двумя барьерами в ячейке периодичности в зависимости от параметров потенциальных барьеров. Показано, что для зеркально-симметричной периодической структуры возникновение такого отражения сопровождается коллапсом резонансных пиков единичной прозрачности. Произведен численный расчет спектров коэффициентов прохождения и электронной плотности квазирезонансных состояний.

Ключевые слова: коллапс, сверхрешетка, резонансное прохождение, нуль амплитуды прохождения.

Введение

Одним из основных свойств многослойных периодических структур является резонансное безотражательное прохождение волн через такую структуру в результате интерференции при отражениях от интерфейсных границ раздела слоев [1–3].

Для резонансно-туннельных симметричных полупроводниковых гетероструктур с небольшим числом слоев возможно частичное отражение электронных волн при совпадении энергии частицы с энергией резонансного состояния системы. Это явление необходимо учитывать при разработке устройств, принцип действия которых основан на интерференции электронных волн.

Для периодических структур с двумя барьерами в ячейке периодичности можно выделить два типа отражений. Первый тип отражения возможен в любой такой периодической решетке и обусловлен переходом делокализованного в решетке резонансного состояния в локализованное у границы структуры состояние при изменении параметров ячейки периодичности. Второй тип отражения связан с коллапсом резонансов [4–8], он заключается в слиянии пиков единичной прозрачности при монотонном изменении параметров структуры, причем при превышении некоторых пороговых значений параметров появляется отражение, уменьшается высота и изменяется форма результирующего максимума коэффициента прохождения. Исследование коллапса резонансов в работе [4] сведено к изучению поведения максимумов аналитического выражения коэффициента прозрачности $T(E)$. Опишем коллапс, исследуя нули (в общем случае комплексные) амплитуды отражения $r(E)$. Для наблюдения коллапса наиболее перспективными являются сверхрешетки с узкими и высокими потенциальными барьерами, например сверхрешетки Si/CaF₂.

Целью настоящей работы является исследование влияния параметров ячейки периодичности на отражательные свойства сверхрешеток при наличии зеркальной симметрии. В зеркально-симметричной структуре с двумя барьерами в ячейке периодичности наблюдается коллапс резонансов, исследована природа этого явления.

Основные соотношения

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния электрона с массой m и энергией E на многослойной периодической структуре с потенциалом $U(x)$, занимающей область $x_1 \leq x \leq x_{N+1}$, где $N/2$ – число периодов решетки (рис. 1). Вне структуры потенциал $U(x)$ равен нулю. Пусть в левой области $x < x_1$ распространяются падающая $A_0 \exp(ikx)$ и отраженная $B_0 \exp(-ikx)$ плоские волны (множитель $\exp(-iEt/\hbar)$ здесь и далее не выписываем), а в правой области $x > x_{N+1}$ распространяется прошедшая волна $A_{N+1} \exp(ik(x - x_{N+1}))$. Амплитуды B_0 и A_{N+1} можно выразить через амплитуду A_0 , для этого удобно использовать метод трансфер-матрицы (см., например, [2, 9]), который приводит к следующей линейной связи:

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix} = M_{\text{eff}}(x_{N+1}, x_1) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где x_1 и x_{N+1} – координаты левой и правой границы структуры; $M_{\text{eff}}(x_{N+1}, x_1) \equiv M_{\text{eff}}(E)$ – эффективная трансфер-матрица, определяемая выражением [9]

$$M_{\text{eff}}(E) = L^{-1} M(x_{N+1}, x_1) L, \quad (2)$$

где $M(x_{N+1}, x_1)$ – матрица перехода через структуру, а матрица L имеет вид

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}, \quad k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}. \quad (3)$$

Через элементы трансфер-матрицы $(M_{\text{eff}})_{i,j}$ ($i, j = 1, 2$) можно выразить амплитуды рассеяния. В работе [4] исследовалось поведение резонансных максимумов коэффициента прохождения $T(E)$, который выражается через элемент матрицы $(M_{\text{eff}})_{2,2}$ как

$$T(E) = \frac{1}{\left| (M_{\text{eff}}(E))_{2,2} \right|^2}. \quad (4)$$

В бездиссипативных структурах резонансные максимумы полной прозрачности $T(E) = 1$ соответствуют нулям коэффициента отражения $R(E) = |r|^2 = 1 - T(E)$, поэтому удобно исследовать поведение нулей амплитуды отражения r :

$$r = -\frac{M_{\text{eff}}(E)_{2,1}}{M_{\text{eff}}(E)_{2,2}}. \quad (5)$$

Известно [10], что полюсы амплитуды отражения лежат в нижней полуплоскости комплексной переменной E , следовательно, для энергий, лежащих на действительной оси, знаменатель r отличен от нуля и нули амплитуды отражения определяются условием

$$M_{\text{eff}}(E)_{2,1} = 0. \quad (6)$$

Это уравнение можно численно решить и тем самым описать поведение резонансов рассеяния при изменении параметров системы.

В качестве конкретного модельного примера будем рассматривать рассеяние частиц конечной периодической решеткой с потенциалом, образованным системой чередующихся дельта-барьеров мощности Ω_1 и Ω_2 , отстоящих друг от друга на равном расстоянии a (рис. 1). Дельта-барьеры моделируют узкие и высокие реальные потенциальные барьеры, их мощности можно оценить как $\Omega \approx 2mU_b b / \hbar^2$, где U_b – высота, а b – толщина реального барьера.

Зеркально-симметричная периодическая решетка дельта-барьеров

Пусть решеточный потенциал имеет вид (рис. 1)

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=0}^{N_1} \Omega_1 \delta(x - x_{2j+1}) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^{N_1} \Omega_2 \delta(x - x_{2j}). \quad (7)$$

Здесь N_1 – число ячеек периодичности ($N_1 = N/2$); $x_1 = 0$, $x_{j+1} = x_j + a$ – координаты дельта-барьеров. Для отношения мощностей барьеров введем обозначение $\alpha = \Omega_2 / \Omega_1$.

Матрица перехода через зеркально-симметричную периодическую структуру равна произведению матрицы перехода через крайний правый барьер и N_1 -й степени матрицы M перехода через ячейку периодичности, т.е.

$$M(x_{N+1}, x_1) = m_{\Omega_1} M^{N_1}, \quad M = m_a m_{\Omega_2} m_a m_{\Omega_1}, \quad (8)$$

где матрицы перехода через слой нулевого потенциала толщины a и дельта-барьер мощности Ω_j соответственно равны

$$m_a = \begin{pmatrix} \cos ka & k^{-1} \sin ka \\ -k \sin ka & \cos ka \end{pmatrix}, \quad m_{\Omega_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \Omega_j & 1 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Степень унимодулярной матрицы M можно выразить через нее саму и единичную матрицу I как [11]

$$M^{N_1} = U_{N_1-1}(y)M - U_{N_1-2}(y)I, \quad (10)$$

где $U_{N_1}(y)$ – полином Чебышева второго рода; y – полуслед матрицы M , в нашем случае он равен

$$y = \frac{\Omega_1 \Omega_2}{4k^2} + \left(1 - \frac{\Omega_1 \Omega_2}{4k^2}\right) \cos kd + \frac{\Omega_1 + \Omega_2}{2k} \sin kd. \quad (11)$$

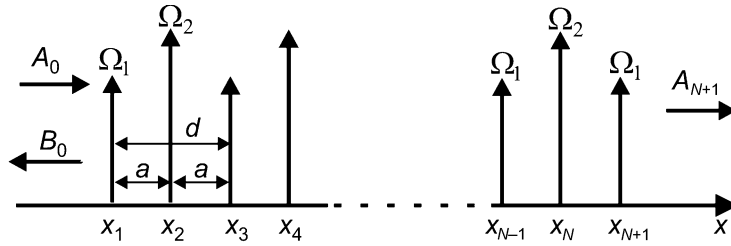


Рис. 1. Зеркально-симметричная решетка дельта-барьеров ($\alpha > 1$)

Эффективная трансфер-матрица (2) с учетом (3), (8) – (10) приобретает вид

$$M_{\text{eff}}(E) = U_{N_1-1}(y)L^{-1}m_{\Omega_1}ML - U_{N_1-2}(y)L^{-1}m_{\Omega_1}L, \quad (12)$$

а матричные элементы, определяющие резонансные состояния, можно записать в следующем виде:

$$(M_{\text{eff}}(E))_{2,1} = \frac{i}{2} \left(U_{N_1-1}(y) \left(kM_{1,2} + \frac{M_{2,1}}{k} + \frac{\Omega_1}{k} M_{1,1} \right) - U_{N_1-2}(y) \frac{\Omega_1}{k} \right); \quad (13)$$

$$(M_{\text{eff}}(E))_{2,2} = (yU_{N_1-1}(y) - U_{N_1-2}(y)) - \frac{i}{2} \left(U_{N_1-1}(y) \left(kM_{1,2} - \frac{M_{2,1}}{k} - \frac{\Omega_1}{k} M_{1,1} \right) + U_{N_1-2}(y) \frac{\Omega_1}{k} \right). \quad (14)$$

Подставляя явный вид матричных элементов M , получаем

$$(M_{\text{eff}}(E))_{2,1} = \frac{i}{2} \frac{\Omega_1}{k} (U_{N_1}(y) + \alpha U_{N_1-1}(y)), \quad (15)$$

$$(M_{\text{eff}}(E))_{2,2} = U_{N_1-1}(y) \left(\left(1 - \frac{\Omega_1 \Omega_2}{2k^2}\right) \cos kd + \left(\frac{\Omega_1}{k} + \frac{\Omega_2}{2k}\right) \sin kd + \frac{\Omega_1 \Omega_2}{2k^2} \right) - U_{N_1-2}(y) + \frac{i}{2k} \left(U_{N_1-1}(y) \left(\left(2 + \alpha - \frac{\Omega_1 \Omega_2}{2k^2}\right) \cos kd + \left(\frac{\Omega_1}{k} + \frac{\Omega_2}{k} - \frac{2k}{\Omega_1}\right) \sin kd + \frac{\Omega_1 \Omega_2}{2k^2} \right) - U_{N_1-2}(y) \right). \quad (16)$$

Уравнение на нули амплитуды отражения, $(M_{\text{eff}})_{2,1} = 0$, дает

$$U_{N_1}(y) + \alpha U_{N_1-1}(y) = 0. \quad (17)$$

Волновая функция стационарного рассеяния электрона на потенциале (7) в j -м слое равна $\Psi(E, x) = \psi_j(E, x)$, где $\psi_j(E, x) = A_j \exp(ik(x - x_j)) + B_j \exp(-ik(x - x_j))$. Амплитуды A_{j+1}, B_{j+1} парциальных плоских волн $j+1$ -го слоя связаны с амплитудами A_j, B_j j -го смежного слоя рекуррентным соотношением

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = L^{-1} m_{\Omega, j+1} m_a L \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Краевая амплитуда A_0 задается условием нормировки волновых функций непрерывного спектра на дельта-функцию энергии, а амплитуда B_0 – вторым уравнением системы (1).

При изменении α происходит смещение энергий резонансных состояний. Отношение суммарной плотности вероятности нахождения частицы на четных дельта-барьерах к суммарной плотности вероятности нахождения на всех N потенциальных дельта-барьерах является мерой такого смещения

$$\rho_s = \sum_{j=1}^{N_1} \left| \Psi(E_s, x_{2j}) \right|^2 / \sum_{j=1}^N \left| \Psi(E_s, x_j) \right|^2, \quad (19)$$

где $x_j = (j-1)a$. Чем больше это отношение, тем на большее расстояние по энергетической шкале сдвигается состояние при изменении параметра α .

Увеличение α ($\alpha > 1$) приводит к расщеплению полосы прозрачности на две подполосы, внутренние крайние состояния этих подполос образуют дублет пиков. С увеличением α они сближаются, оставаясь при этом единичными до тех пор, пока расстояние между ними станет меньше их ширины, и при некотором пороговом значении $\alpha = \alpha^*$ наступает коллапс состояний, сопровождающийся возникновением отражения в области слившихся пиков.

При уменьшении α ($0 < \alpha < 1$) резонансные состояния дублета в симметричной решетке не отщепляются от подполос единичной прозрачности и смещаются вниз.

Как и в [4], для количественной оценки эффекта разрушения симметрии введем коэффициент асимметрии

$$\eta = \left| \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} \right|, \quad (20)$$

где p_1 и p_2 – интегральные вероятности нахождения частицы в левой и правой частях системы. Этот параметр характеризует асимметрию распределения плотности вероятности электрона. Волновая функция верхнего состояния дублета является антисимметричной функцией, а волновая функция нижнего состояния дублета – симметричной функцией относительно плоскости симметрии сверхрешетки. На рис. 2, а–г показано изменение $T(E)$ и на рис. 2, д–з – квадрата модуля волновой функции рассеяния состояния E_{10} дублета (E_{10}, E_{11}) нижней полосы пропускания; значения параметров следующие: а, д – $E_{10} = 0,0842$ эВ, $\eta = 0$ при $\alpha = 1,0$; б, е – $E_{10} = 0,0851$ эВ, $\eta = 0$ при $\alpha = 1,15$; в, ж – $E_{10} = 0,0858$ эВ, $\eta = 0,051$ при $\alpha = 1,3$; з, з – $E_{10} = 0,0861$ эВ, $\eta = 0,776$ при $\alpha = 1,45$. Вертикальные стрелки обозначают дельта-барьеры в произвольном масштабе. Число ячеек периодичности в системе $N_1 = 10$, $a = 20$ Å, мощность нечетных барьеров $\Omega_1 = 1$ ат. ед. = $1,89$ Å⁻¹.

При $\alpha < \alpha^*$ волновые функции всех резонансных состояний делокализованы по решетке, что соответствует безотражательному прохождению частицы через решетку (для состояния с E_{10} см. рис. 2, д–е), параметр асимметрии η равен нулю. В момент коллапса при $\alpha = \alpha^*$, вследствие интерференции симметричной и антисимметричной волновых функций дублета, результирующая волновая функция становится несимметричной (рис. 2, ж), параметр асимметрии η отличен от нуля, тогда как потенциальный профиль системы при этом сохраняет симметричность, как отмечено в [4]. При $\alpha > \alpha^*$ волновая функция состояния с энергией E_{10} затухает в глубь решетки (рис. 2, ж, з), с увеличением α видна тенденция локализации электрона у границ структуры, параметр η возрастает. При энергии E_{10} , как и при любых других резонансных энергиях, почти вся плотность вероятности локализована внутри решетки, слева и справа от решетки значения $|\Psi|^2$ относительно малы и в масштабе рисунка практически неразличимы (оценка такой малости дается

выражением $\gamma = \max(|\psi_0(E_{10}, x)|^2) / \max(|\psi_1(E_{10}, x)|^2)$ и не превышает 0,0065 при всех значениях α , использованных в расчете). Графики квадрата модуля волновой функции рассеяния верхнего состояния дублета с энергией E_{11} имеют качественно такой же вид, поэтому здесь не приводятся. Отметим, что при изменении α ($\alpha > 0$) все резонансные пики смещаются с разным темпом, наименьший темп смещения у верхнего пика, наибольший – у нижнего.

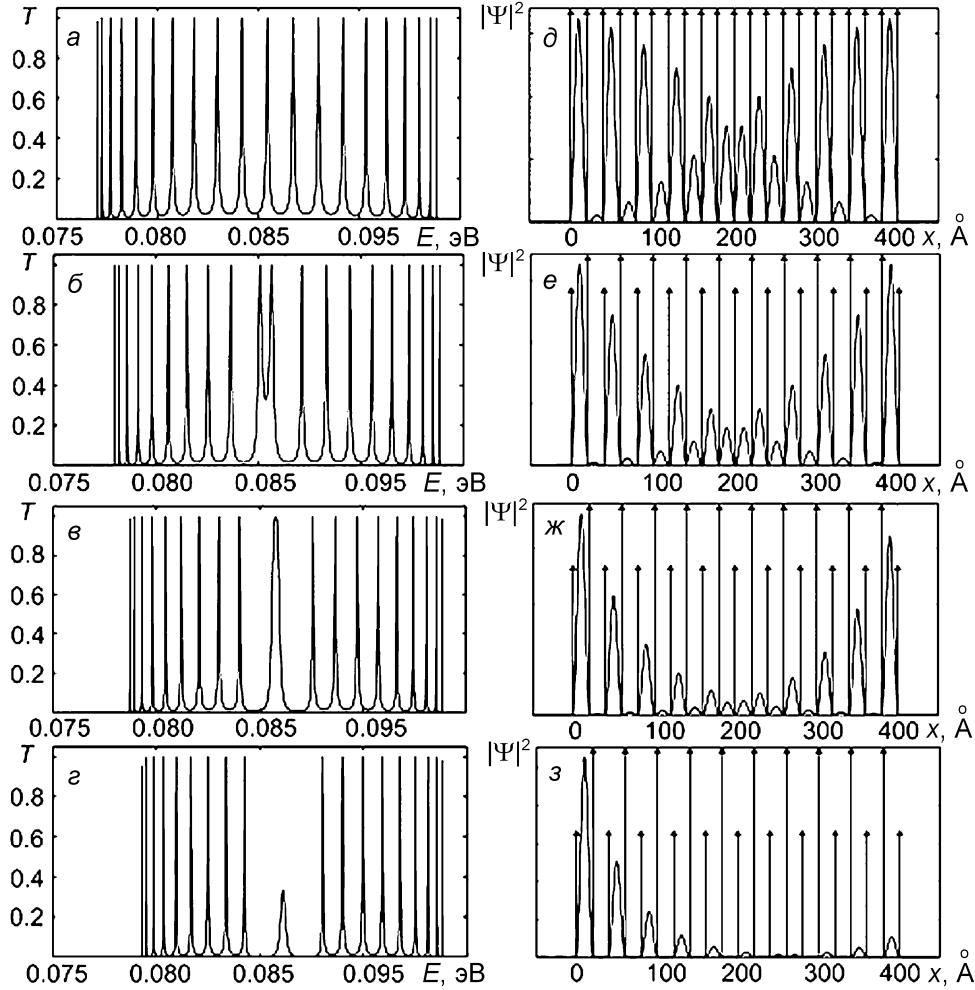


Рис. 2. Изменение прозрачности T при увеличении α (левая колонка) и квадрат модуля волновой функции рассеяния нижнего состояния E_{10} дублета полосы пропускания в зависимости от x (правая колонка): а, д – $\alpha=1,0$; б, е – $\alpha=1,15$; в, ж – $\alpha=1,3$; з, з – $\alpha=1,45$

На рис. 3 показано сближение положения пиков $T(E_{10})$, $T(E_{11})$ и соответствующих им комплексных нулей амплитуды отражения при увеличении параметра α . Наступление коллапса соответствует сходу нулей $(M_{\text{eff}})_{2,1}$ с действительной оси в комплексную плоскость, с образованием вблизи точки коллапса пары комплексно-сопряженных корней $\tilde{E} = \text{Re } \tilde{E} \pm i \text{Im } \tilde{E}$ (рис. 3, б). Пороговое значение параметра α в расчете $\alpha^* = 1,295$. Числа на графике (прямой шрифт для нижнего пика E_{10} , подчеркнутый – E_{11}) соответствуют значениям параметра α : 1 – 0,85; 2 – 1,00; 3 – 1,15; 4 – 1,30; 5 – 1,35; 6 – 1,4; 7 – 1,45; 8 – 1,60; 9 – 1,85; 10 – 2,0.

Коллапс резонансных пиков прозрачности $T(E)$ в симметричных периодических системах сопровождается проявлением следующих особенностей. Одна из них связана с разным темпом смещения резонансных состояний по энергетической оси при изменении параметра α . Количественной мерой, характеризующей такое смещение, служит параметр ρ_s , определенный соотношением

(19). Для симметричной системы при изменении мощности четных барьеров Ω_2 в дублете E_{10} , E_{11} имеем: $\alpha=1,0$ $\rho_{10}=0,79$, $\rho_{11}=0,16$; $\alpha=1,1$ $\rho_{10}=0,69$, $\rho_{11}=0,21$; $\alpha=1,2$ $\rho_{10}=0,56$, $\rho_{11}=0,26$, т.е. нижний уровень дублета смещается на большее расстояние, чем верхний (рис. 3, б) вплоть до их слияния при $\alpha=\alpha^*$. Другая особенность заключается в качественном изменении волновых функций этих состояний. Если параметр α меньше порогового значения α^* , то состояния дублета делокализованы и описывают волны, распространяющиеся через решетку без отражения (рис. 2, д, е). При увеличении $\alpha > \alpha^*$ волновая функция, соответствующая резонансному пику $T(E)$ в полосе непропускания, локализована у левой границы структуры (рис. 2, з).

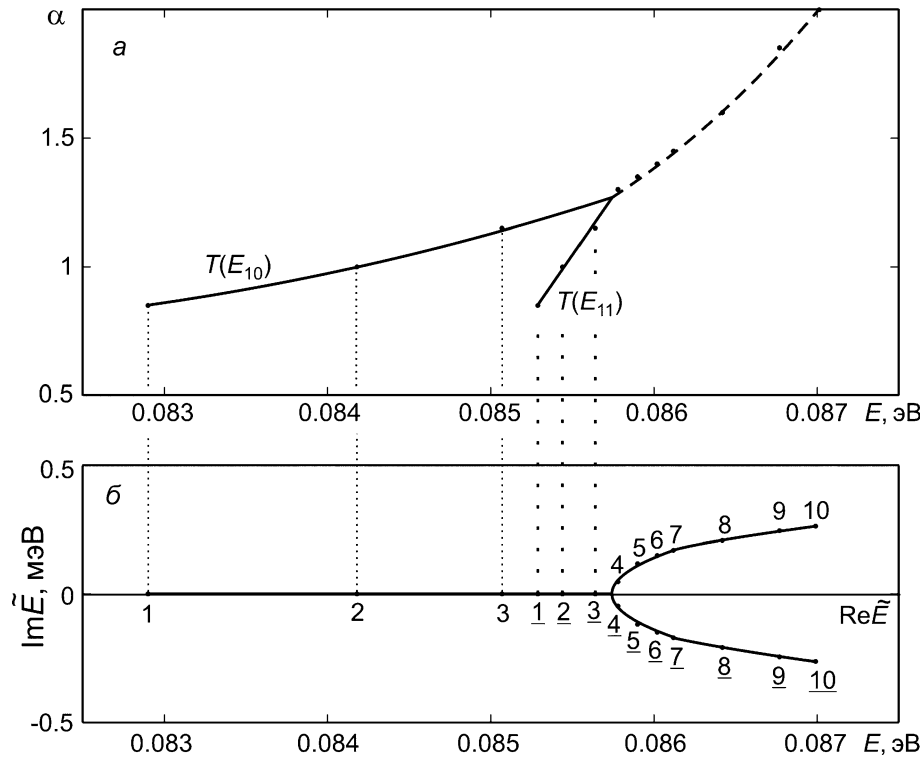


Рис. 3. Движение резонансных максимумов дублета при увеличении параметра α (сплошные линии – $T_{\max}=1$, штриховая линия – $T_{\max}<1$) (а). Траектория нулей $\tilde{E}$ амплитуды отражения дублета при увеличении параметра α (б). По оси абсцисс отложены значения энергии $\text{Re } \tilde{E}$ резонансных состояний в эВ, по оси ординат – $\text{Im } \tilde{E}$ в мэВ

Коллапс резонансов в зеркально-симметричных трехбарьерных структурах был исследован в работах [4, 5]. Для таких структур в рамках модели дельта-потенциалов уравнение, определяющее энергии резонансных пиков $T(E)$, получается из (17) при $N_1=1$ в виде

$$y + \alpha/2 = 0, \quad (21)$$

где полуслед $y = y(E, \alpha)$ задан формулой (11). Из-за осциллирующего характера $y(E, \alpha)$ решения этого уравнения описывают дубликаты пиков. При увеличении α пока $\min(y) < -\alpha/2$ уравнение (21) определяет дубликаты линий единичной прозрачности. При $\min(y) \cong -\alpha/2$ ему соответствует пороговое значение $\alpha = \alpha^*$, наступает коллапс, и линии дублета сливаются. При $\min(y) > -\alpha/2$ корни уравнения будут комплексно-сопряженными и пик станет меньше единицы.

Заключение

В отличие от работ [4–8], посвященных коллапсу пиков единичной прозрачности в трехбарьерных структурах, исследовали решетки с $N \gg 1$. Хорошо известно, что периодичность многослойных структур обеспечивает резонансное безотражательное прохождение электронной волны. Не всякую периодическую решетку можно путем добавления элементов решетки превратить в

зеркально-симметричную. Даже не во всякой симметричной решетке возможен коллапс, примером такой решетки является решетка с одним барьером в ячейке периодичности. С помощью численного моделирования мы показали, что в зеркально-симметричных решетках с двумя барьерами в ячейке периодичности может наблюдаться коллапс, при условии, что мощность второго барьера больше мощности первого.

В работе в качестве управляющего параметра использовалось отношение мощностей барьеров. Можно также изменять глубину квантовой ямы в ячейке периодичности при фиксированных одинаковых барьерах. Для наступления коллапса необходимо обеспечить следующие условия: 1) управляющий параметр должен влиять на распределение плотности вероятности резонансных состояний дублета в системе, 2) при этом состояния дублета должны сближаться по энергетической оси, 3) изменение управляющего параметра должно быть таким, что эти состояния при коллапсе оказались в полосе непропускания.

Расчеты для более реалистической модели прямоугольных потенциалов с двумя барьерами в ячейке периодичности в однозонном приближении, когда в модели можно одновременно менять два управляющих параметра (отношение высот и толщин барьеров), показывают, что качественно результаты не отличаются от приведенных выше результатов.

Автор выражает признательность А.А. Горбачевичу и Ю.Г. Пейсаховичу за полезные обсуждения и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tsu R. and Esaki L. // Appl. Phys. Lett. – 1973. – V. 22. – P. 562.
2. Херман М. А. Полупроводниковые сверхрешетки. – М.: Мир, 1989.
3. Караваев Г.Ф., Чуприков Н.Л. // Изв. вузов. Физика. – 1993. – № 3. – С. 51–56.
4. Горбачевич А.А., Журавлев М.Н., Капаев В.В. // ЖЭТФ. – 2008. – Т. 134. – С. 338–353.
5. Leo J. and Toombs G.A. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 43. – P. 9944–9946.
6. Yamamoto H., Kane Y., and Naniguchi K. // Phys. Status Solidi. B. – 1991. – V. 167. – P. 571.
7. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004.
8. Ткач Н.В., Сети Ю.А. // Физика низких температур. – 2009. – Т. 35. – С. 710–720.
9. Peisakhovich Y.G. and Shtygashev A.A. // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 075327.
10. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. – М.: Наука, 1971. – 544 с.
11. Яри в А., Ю х П. Оптические волны в кристаллах. – М.: Мир, 1987.

Новосибирский государственный технический университет,
г. Новосибирск, Россия
E-mail: shtyg@rambler.ru

Поступила в редакцию 16.09.09,
после доработки – 11.03.10.