

УДК 538.958, 538.915

Властивості заряду в наногетеросистемах з квантовими ямами та бар'єрами

Бойчук В. І., Білинський І. В., Гольський В. Б., Шаклеїна І. О.

fizyka.drohobych.net

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

На основі моделі Кроніга-Пенні з δ -подібними потенціалами досліджено тришарову наногетероструктуру, в якій біля меж поділу існує перехідний шар, відстань між крайніми атомами якого є параметром задачі і може змінюватися від нуля до двох сталих ґраток кристалів. Отримана точна формула для коефіцієнта відбивання R , з якої можна визначити залежність коефіцієнта R від хвильового вектора, величини перехідного шару та величини квантової ями (бар'єру) гетероструктури. Конкретні обчислення, проведені для моделей гетеросистем $GaAs/AlAs/GaAs$ та $AlAs/GaAs/AlAs$. Проведено порівняння коефіцієнтів відбивання у наближенні огинаючих та у методі ефективної маси при малих значеннях хвильового вектора та показано, що близькі результати можна отримати, якщо використати граничні умови Гарісона при відповідним чином підібраних параметрах. Для косинусоїдального закону дисперсії заряду, який виникає в моделі Кроніга-Пенні, в рамках методу S -матриці розсіяння визначено енергію зв'язаних станів для гетероструктури з квантовою ямою (типу $AlAs/GaAs/AlAs$).

Вступ

Протягом останнього часу інтенсивно вивчаються різні наноструктури, в яких як експериментально, так і теоретично досліджуються електричні та оптичні властивості. Значне число робіт присвячене гетероструктурам $GaAs/AlAs$, в яких шари $AlAs$ поміщено в кристалічне середовище $GaAs$ або навпаки [1–4]. Електронні властивості таких гетеросистем пов'язані з електронами Γ -долини зонного спектру. Проблема проходження цих електронів через межу різних кристалів виникає в електроніці гетеропереходів та при дослідженні транспортних властивостей полікристалічних матеріалів [5–13]. Для отримання точного розв'язку цієї задачі необхідно знайти явний вигляд блохівських функцій складових матеріалів та швидкоспадаючих функцій біля інтерфейсу. У багатьох роботах, як правило, блохівські функції замінюються огинаючими функціями і використовується наближення ефективної маси. Зазвичай вважається, що огинаюча функція та її похідні мають бути неперервними на межі поділу [10–13]. В принципі, ці умови повинні впливати з обґрунтованого виразу для оператора струму в просторі огинаючих функцій. Такий вираз повинен залежати від правильної форми оператора ефективної кінетичної енергії, що діє на огинаючі функції, та бути правильним також біля меж поділу, де зона структура швидко змінюється. Обґрунтування вигляду для цього оператора обговорювалося в літературі [5, 12, 13], але він не був в загальному виведений з перших принципів. Основні результати, отримані теорією, яка ґрунтується на $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ моделі

та наближенні сильного зв'язку [14–16]. Гарісоном в роботі [5] запропоновано умови неперервності $\xi\Phi$ та $(m\xi)^{-1}\nabla\Phi$, де Φ – огинаюча, $m(x)$ – ефективна маса, $\xi(x)$ – скалярний параметр, який, за припущенням, не сильно залежить від енергії біля краю зони кожного кристала. Для одновимірних кристалів умови Гарісона в найбільш загальній формі ($\beta\Phi$ та $\alpha(\partial\Phi/\partial x)$ – неперервні) можуть бути оправдані тим, що розв'язки ефективного рівняння Шредінґера, яке визначає огинаючі функції в кожному кристалі, можна представити через два параметри (α і β). З неперервності густини потоку ймовірності можна отримати неперервність добутку $\alpha\beta m$ впоперек межі поділу. Отже, дана проблема зводиться до визначення одного невідомого параметра (ξ). У більшості робіт, присвячених питанню вибору та обґрунтуванню граничних умов, досліджувалися прості гетероструктури з однією межею поділу, на якій всі величини, в тому числі й відстань між атомами, різко змінюються. Метою цієї роботи є розвиток теорії коефіцієнта відбивання подвійної гетероструктури з врахуванням перехідного шару біля меж поділу середовищ, на основі моделі Кроніга-Пенні для δ -подібних потенціалів, дослідження залежності коефіцієнта відбивання від хвильового вектора, величини перехідного шару та ширини квантової ями чи бар'єру гетероструктури, визначення енергії зв'язаних станів за допомогою методу S -матриці розсіяння.

Модель гетероструктури. Загальні формули

Гетероструктура, модель якої представлено на рис.1, складається з трьох кристалів. Злі-

ва (область I) та справа (область III) знаходяться однакові напівбезмежні кристали. Внутрішня область (область II) відповідає іншому кристалу гетеросистеми. Кристали представлені рядами δ -функцій з силою P_i та періодами d_i ($i=1, 2$). Величина піків δ -функції є різною для кристалів в областях I (III) та II. На межах поділу середовища немає атомів, що уможливорює відокремити ефекти, які пов'язані із зонною структурою, від тих, які визначаються стрибкоподібною зміною значення потенціалу на межі. Варто відмітити, що елементарні комірки на межах поділу розміром $b=b_1+b_2$ містять атоми обох типів кристалів. Ці комірки порушують трансляційну симетрію, тому коефіцієнт відбивання та енергія частинки є функцією їх розмірів. Не обмежуючись у виборі величини b , будемо, однак,

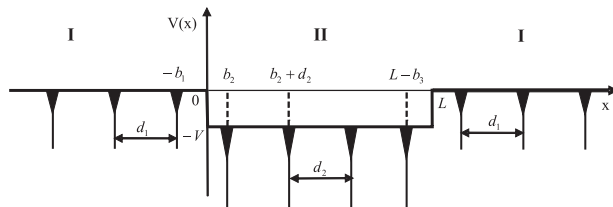


Рис.1. Модель гетероструктури

вважати, що перехідний шар між кристалами не є великим: $b < d_1 + d_2$. Систему координат вибираємо так, щоб ліва межа поділу знаходилась в точці $x=0$. Тоді рівняння Шредінгера для комірки з цією межею запишемо в вигляді:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} - P_i \delta(x \pm b_i) + V_{\pm} \right\} \Psi_{k_i}^{(i)} = E \Psi_{k_i}^{(i)}, \quad (1)$$

де m_0 – маса вільного електрона. У рівнянні (1) знак "плюс" та $i=1$ відповідає області зліва від інтерфейсу, а знак "мінус" та $i=2$ відповідає другому кристалу, тому $V_+ = 0$, $V_- = -V$. Аналогічні рівняння можна записати для правої комірки з межею поділу $x=L$.

В області I та III кристали напівобмежені, тому функції $\Psi_{k_1}^{(1)}$ та $\Psi_{k_1}^{(3)}$ є блохівськими функціями, для яких виконуються наступні умови:

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(1)}(0) &= e^{ik_1 d_1} \Psi_{k_1}^{(1)}(-d_1), \quad \Psi_{k_1}^{(3)}(L) = \\ &= e^{-ik_1 d_1} \Psi_{k_1}^{(3)}(L+d_1). \end{aligned} \quad (2)$$

Аналогічні співвідношення можна записати для похідних від хвильових функцій. Потрібно також врахувати, що в точках полюсів δ -функції Дірака похідна хвильової функції стрибкоподібно змінюється [17]. Зокрема,

$$\Psi_{k_1}^{(1)'}(-b_1+0) - \Psi_{k_1}^{(1)'}(-b_1-0) = -\frac{2m_0 P_1}{\hbar^2} \Psi_{k_1}^{(1)}(-b_1),$$

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(3)'}(L+b_1+0) - \Psi_{k_1}^{(3)'}(L+b_1-0) &= \\ &= -\frac{2m_0 P_1}{\hbar^2} \Psi_{k_1}^{(3)}(L+b_1), \end{aligned} \quad (3)$$

Використовуючи трансляційні властивості хвильових функцій, можна одержати дисперсійне рівняння для електрона в областях I та III:

$$\cos(k_1 d_1) = \cos(q_1 d_1) - U_1 \frac{\sin(q_1 d_1)}{q_1 d_1}, \quad (4)$$

де $U_1 = \frac{m_0 P_1 d_1}{\hbar^2}$, $q_1 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}}$, k_1 – хвильовий вектор електрона.

Нормовані хвильові функції крайніх комірок I та III кристалів можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(1)}(x) &= A_{k_1} \left[\frac{1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}}{1 - e^{-i(q_1-k_1)d_1}} e^{iq_1(x+b_1)} + \right. \\ &+ e^{-iq_1(x+b_1)} - (1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}) e^{iq_1|x+b_1|} \left. \right], \quad (5) \\ \Psi_{k_1}^{(3)}(x) &= A_{k_1} \left[\frac{1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}}{1 - e^{-i(q_1-k_1)d_1}} e^{iq_1(x-L-b_1)} + \right. \\ &+ e^{-iq_1(x-L-b_1)} - (1 - e^{-i(q_1+k_1)d_1}) e^{iq_1|x-L-b_1|} \left. \right]. \end{aligned}$$

Загальні хвильові функції в цих кристалах записуються так:

$$\Psi_1(x) = \Psi_{k_1}^{(1)}(x) + r \Psi_{-k_1}^{(1)}(x),$$

$$\Psi_3(x) = t \Psi_{k_1}^{(3)}(x). \quad (6)$$

У другій області гетеросистеми також можна знайти хвильову функцію для всієї області $\Psi^{(2)}(x)$, вигляд якої є досить складним і залежить від кількості атомів N .

З умов зшивання функцій $\Psi^{(1)}(x)$, $\Psi^{(2)}(x)$ та $\Psi^{(3)}(x)$ в точках $x=0$, $x=L$:

$$\begin{aligned} \Psi_{k_1}^{(1)}(0) &= \Psi^{(2)}(0), \quad \Psi^{(2)}(L) = \Psi_{k_1}^{(3)}(L), \\ \Psi_{k_1}^{(1)'}(x) \Big|_{x=0} &= \Psi_{k_1}^{(2)'}(x) \Big|_{x=0}, \quad (7) \\ \Psi_{k_1}^{(2)'}(x) \Big|_{x=L} &= \Psi_{k_1}^{(3)'}(x) \Big|_{x=L} \end{aligned}$$

визначаємо амплітуду коефіцієнта відбивання r . Знаючи r , можна визначити коефіцієнт відбивання (R) та проходження (T) заряду гетеросистеми:

$$R = |r|^2, \quad T = 1 - R. \quad (8)$$

Якщо область II гетероструктури містить велику кількість атомів ($N \gg 1$), то можна знехтувати відсутністю трансляційної симетрії та використати модель Кроніга-Пенні. Тоді хвильову функцію першої комірки цієї області можна записати у вигляді (5), якщо замінити q_1 на q_2 , а k_1 на k_2 відповідно. Хвильову функцію останньої комірки можна знайти на основі трансляційної властивості блохівської функції. Загальний вигляд хвильової

функції для цієї області можна відобразити формулою:

$$\Psi_2(x) = p\Psi_{k_2}^{(2)}(x) + f\Psi_{-k_2}^{(2)}(x). \quad (9)$$

На основі умов зшивання функцій $\Psi_1(x)$ (6) та $\Psi_2(x)$ (9) можна отримати вираз для коефіцієнта відбивання r :

$$r = \frac{\Psi_{k_1}^{(1)}(0) [\mu\Psi_{k_2}^{(2)'}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)] - \Psi_{k_1}^{(1)'}(0) [\mu\Psi_{k_2}^{(2)}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)]}{\Psi_{-k_1}^{(1)'}(0) [\mu\Psi_{k_2}^{(2)}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)] - \Psi_{-k_1}^{(1)}(0) [\mu\Psi_{k_2}^{(2)'}(0) + \Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)]}, \quad (10)$$

де введено наступне позначення:

$$\mu = \frac{\Psi_{-k_2}^{(2)'}(0)\Psi_{k_1}^{(3)}(L) - \Psi_{-k_2}^{(2)}(0)(d_2)\Psi_{k_1}^{(3)'}(L)}{\Psi_{k_2}^{(2)}(0)\Psi_{k_1}^{(3)'}(L) - \Psi_{k_2}^{(2)'}(0)\Psi_{k_1}^{(3)}(L)} e^{-2ik_2L}.$$

Коефіцієнт відбивання, знайдений на основі формули (10), можна порівняти з точним виразом та встановити критерії використання наближення безмежного кристала для області II гетероструктури. Хвильові функції Блоха кристалів, що утворюють реальні гетероструктури, є невідомими. Тому, як правило, використовують наближення огинаючих функцій. У нашому випадку огинаюча матиме вигляд:

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_1(x) = e^{ik_1x} + r e^{-ik_1x}, & x < 0 \\ \Phi_2(x) = A e^{ik_2x} + B e^{-ik_2x}, & 0 < x < L \\ \Phi_3(x) = t e^{ik_1(x-L)}, & x > L. \end{cases} \quad (11)$$

Функції $\Phi_i(x)$ ($i = 1, 2, 3$) – лінійні комбінації плоских хвиль, які є розв'язками рівняння Шредингера для гамільтоніанів, що описують стани біля країв зони $E_n^{(i)}$ у наближенні ефективних мас:

$$H^{(i)} = E_n^{(i)} - \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (12)$$

Граничні умови для огинаючих часто ґрунтуються на неперервності Φ та $\frac{1}{m} \frac{\partial \Phi}{\partial x}$ [10-14, 19-21]. Більш загальні умови, що накладаються на огинаючі, запропоновано Гарісоном [5]:

$$\begin{aligned} \beta_1 \Phi_1(0) &= \beta_2 \Phi_2(0), \\ \beta_2 \Phi_2(L) &= \beta_1 \Phi_3(L), \\ \alpha_1 \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} \Big|_{x=0} &= \alpha_2 \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} \Big|_{x=0}, \\ \alpha_2 \frac{\partial \Phi_2}{\partial x} \Big|_{x=L} &= \alpha_1 \frac{\partial \Phi_3}{\partial x} \Big|_{x=L}. \end{aligned} \quad (13)$$

З неперервності потоку ймовірності в наближенні ефективної маси можна отримати наступний зв'язок між параметрами:

$$\alpha_1 \beta_1 m_1 = \alpha_2 \beta_2 m_2. \quad (14)$$

Використовуючи (13) та (14), можна визначити коефіцієнт відбивання для гетероструктури:

$$R = \frac{\frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[\frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 k_2^2 \xi_1^2} - 1 \right]^2 \sin^2 k_2 L}{4 \frac{m_2^2 k_1^2}{m_1^2 k_2^2} + \frac{\xi_1^2}{\xi_2^2} \left[\frac{m_2^2 k_1^2 \xi_2^2}{m_1^2 k_2^2 \xi_1^2} - 1 \right]^2 \sin^2 k_2 L}, \quad \frac{\beta_1}{\beta_2} = \frac{\xi_1}{\xi_2}. \quad (15)$$

На основі отриманих формул для хвильової функції визначаємо загальні енергетичні характеристики гетеросистеми. Розглянемо модель гетероструктури з квантовою ямою в області II. В цьому випадку повинні існувати зв'язані стани частинки. Енергія цих станів визначалась за допомогою методу S-матриці [22]. Використовуючи цей підхід, загальний вигляд хвильової функції частинки у першій області потрібно записати у вигляді:

$$\Psi_1(x) = A(\Psi_{-k_1}^{(1)}(x) - S(E)\Psi_{k_1}^{(1)}(x)). \quad (16)$$

З умов зшивання функцій можна визначити вираз для $S(E)$

$$S(E) = -r^{-1}(E). \quad (17)$$

Для знаходження дискретних значень енергії частинки в утвореній гетероструктурі необхідно знайти полюси S-матриці.

Конкретні розрахунки. Аналіз одержаних результатів

З огляду на те, що останнім часом гетероструктури типу *GaAs/AlAs/GaAs* та *AlAs/GaAs/AlAs* знайшли широке використання в якості систем, де експериментально і теоретично досліджується тунелювання електронів та дірок [1-4], використаємо розглядувану модель до дослідження таких гетеросистем. Для цього необхідно, знаючи відомі параметри: ефективні маси, сталі ґратки та розрив зон, встановити параметри задачі: P_1 , P_2 , ξ_1 , ξ_2 .

З дисперсійного рівняння (4), можна визначити екстремальні значення енергій при $k_i \rightarrow 0$. Якщо в гетеросистемі на межі поділу не виникає додаткових полів і потенціальна енергія електрона не змінюється ($V_+ = 0$), то для обох типів кристалів $i=1,2$ екстремальні значення енергії визначаються з таких рівнянь:

$$\operatorname{tg} \sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n = -\frac{U_i}{\sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n}, \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (18)$$

$$\sin \sqrt{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2}} E_n = 0, \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (19)$$

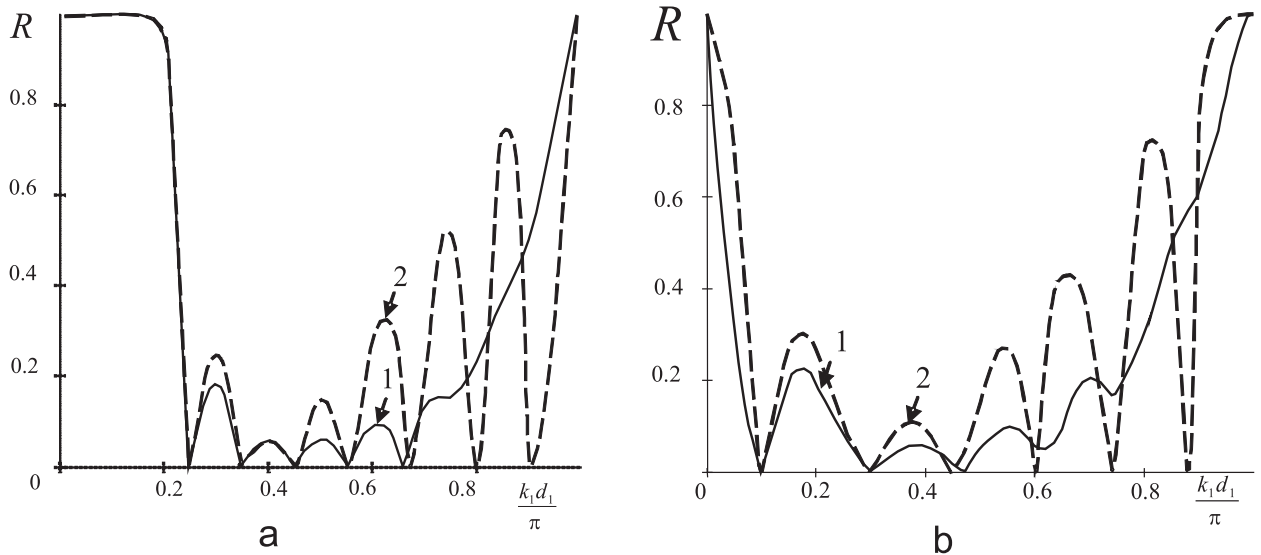


Рис.2. Коефіцієнт відбивання електронів для системи з трьох кристалів *GaAs/AlAs/GaAs* (рис.2а) та *AlAs/GaAs/AlAs* (рис.2б). $U_1 = -3.01$, $U_2 = -4.79$. Крива 1 – відповідає випадку $b = b_1 + b_2 = d_2$ ($b_1 = 0.1d_2$, $b_2 = 0.9d_2$). Крива 2 – для випадку $b = b_1 + b_2 = 2d_2$ ($b_1 = 0.1d_2$, $b_2 = 1.7d_2$)

Можна також визначити ефективні маси для непарних та парних енергетичних зон:

$$\frac{m_n}{m_0} = -\frac{2\hbar^2 U_i}{m_0 d_i^2 E_n} \left[1 - \frac{2U_i}{\frac{m_0 d_i^2}{2\hbar^2} E_n + U_i^2} \right], \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (20)$$

$$\frac{m_n}{m_0} = -\frac{U_i}{\pi^2 n^2}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

З рівняння (5) отримано закон дисперсії для кристалів *GaAs* та *GaAs* ($d_1 = 5.653 \text{ \AA}$, $m = 0.066$ – *GaAs*; $d_2 = 5.66 \text{ \AA}$, $m = 0.124$ – *AlAs*, $V_0 = 570 \text{ meV}$ – розрив між третіми зонами). При заданих значеннях сталих ґраток та ефективних масах частинки, близький до реального розрив зон реалізується для третіх енергетичних зон гетеросистеми, якщо

$$U_1 = \frac{\hbar^2}{m_0 P_1 d_1} = -3.01, \quad U_2 = \frac{\hbar^2}{m_0 P_2 d_2} = -4.79.$$

Маючи необхідні параметри, можна визначити коефіцієнт відбивання R чи пропускання T для гетеросистеми на основі кристалів *GaAs* та *AlAs*.

Відбивання та пропускання електронів в таких гетеросистемах суттєво залежить від ширини перехідного шару, тобто від величини $b = b_1 + b_2$. Зміна цієї величини веде як до зміни локальних максимумів функції $R = R(k_1)$, так і до зсуву цих максимумів.

На рис.2 подано залежність коефіцієнта відбивання електронів в гетеросистемах *GaAs* та *AlAs*, обчисленого за формулами (8) та (11), від безрозмірного хвильового вектора падаючого на яму

(бар'єр) електрона для різної ширини перехідного шару.

Для гетеросистеми *GaAs/AlAs/GaAs*, на відміну від системи *AlAs/GaAs/AlAs*, дана залежність складається з двох областей – підбар'єрного та надбар'єрного розсіювання (в області $k_1 d_1 / \pi < 0, 2$ пропускання електронів практично не спостерігається). Але загалом залежність коефіцієнта відбивання $R = R(k_1)$ для різної ширини перехідного шару має однаковий характер для обох типів гетеросистем. При малих коефіцієнт відбивання близький до одиниці і зменшується при збільшенні хвильового вектора. Для кожної структури чітко визначеними є точки, при яких спостерігається ідеальне пропускання, тобто $R = 0$. Отримано, що кількість максимумів (а відповідно і точок ідеального пропускання) є більшою для гетеросистеми *GaAs/AlAs/GaAs*, незважаючи на те, що проміжок пропускання цієї системи значно менший, ніж для *AlAs/GaAs/AlAs*. Величина відповідних максимумів є співмірною для обидвох типів кристалів. При $\frac{k_1 d_1}{\pi} = 1$ коефіцієнт відбивання досягає свого максимального значення ($R=1$).

Для обох типів гетеросистем було проведено порівняння результатів $R = R(k_1)$, одержаних за допомогою точного та наближеного розв'язків. При великих значеннях розміру другого кристала гетеросистеми L ($L \geq 4d_2$), отримано, що якісно обидві формули дають близькі результати, але краще збігання результатів обчислень спостерігається для системи *GaAs/AlAs/GaAs*.

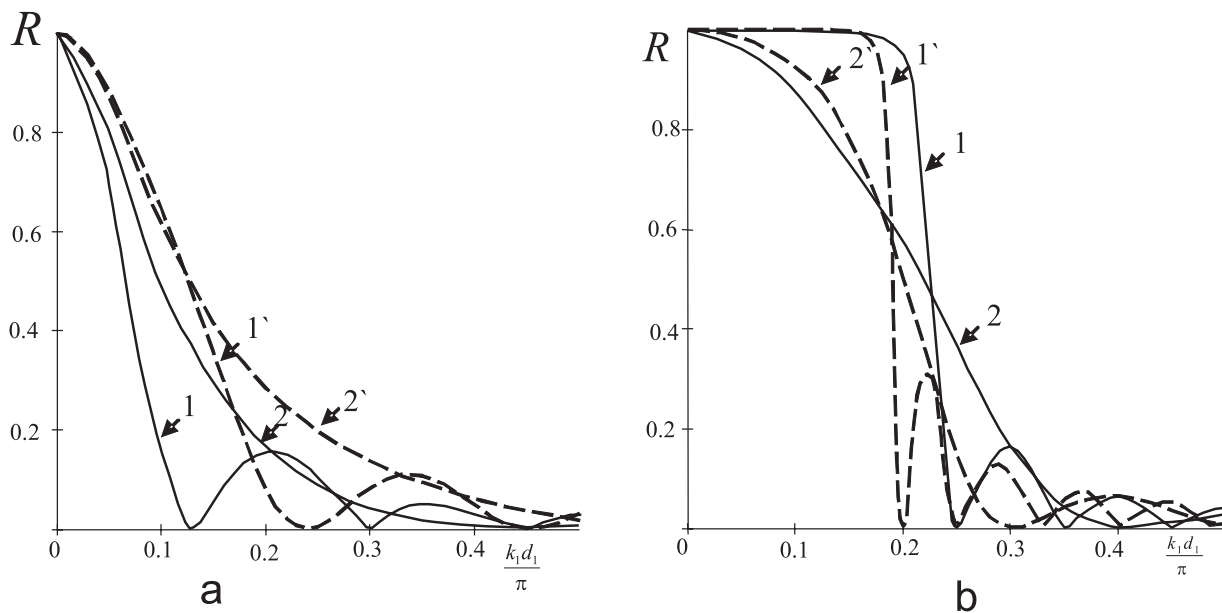


Рис.3. Коефіцієнт відбивання електронів для структури GaAs/AlAs/GaAs (рис.3а) та AlAs/GaAs/AlAs (рис.3б). Суцільна лінія – точний розв’язок, штрихова лінія – метод ефективної маси, що уточнений умовами Гарісона. Криві 1 та 1' – відповідають $L = 8d_2$ (45.224 Å); криві 2 та 2' – для $L = 2d_2$ (11.306 Å)

Перейдемо до аналізу коефіцієнта відбивання, отриманого на основі наближення огинаючих та методу ефективної маси, уточненого використанням граничних умов Гарісона. Розглянемо особливий випадок поверхні, коли комірка, що містить атоми обох кристалів, має розмір $b = 1/2(d_1 + d_2)$ (цей тип поверхні відповідає гетероструктурам з близькими сталими ґратки). Для цього випадку можна встановити точне значення підгоночних параметрів $\xi_i \equiv \beta_i^2$, $i = 1, 2$ через параметри кристалів та енергію електрона на дні зони:

$$\xi_{1,2} = \frac{U_{1,2}}{(q_n d_{1,2})^2} \frac{m_0}{m_{1,2}}, \quad q_n = \sqrt{\frac{2m_0 E_n}{\hbar^2}}.$$

З формули (20) видно, що для вищих зон, коли $(q_n d_{1,2} \gg |U_{1,2}|)$, величини ξ_i прямують до одиниці, і (15) переходить у формулу для коефіцієнта відбивання, яку можна отримати в наближенні огинаючих функцій за умови, що Φ та $1/m \frac{\partial \Phi}{\partial x}$ – неперервні на межах поділу. Для моделей кристалів гетеросистем GaAs та AlAs були отримані такі точні значення: $\xi_1 = 0,91$, $\xi_2 = 0,768$, що дало можливість порівняти результати, отримані за допомогою методу ефективної маси, з точним розв’язком.

На рис.3(а) подано коефіцієнт відбивання $R=R(k_1)$ для системи AlAs/GaAs/AlAs, обчислений за допомогою точного розв’язку та за формулою (15) – метод ефективної маси, уточнений граничними умовами Гарісона, для різної ширини бар’єру. Видно, що в області малих значень хвильового вектора ($k_1 \rightarrow 0$), де є застосовним метод ефективної маси, спостерігається добре якісне збігання результатів. При подальшому збільшенні хвильового вектора отримано зсув точок ідеально-

го пропускання електронів ($R = 0$) до більших k_1 та незначну невідповідність величин максимумів.

Проведені для гетеросистеми GaAs/AlAs/GaAs (рис.3(б)) обчислення також показали непогану якісну збіжність результатів, отриманих за допомогою методу ефективної маси з граничними умовами Гарісона та точного розв’язку. Для $k_1 \rightarrow 0$ обидва методи дають майже однакові результати. При подальшому збільшенні хвильового вектора розбіжність стає більш суттєвою. Це можна пояснити тим, що метод ефективної маси є застосовним лише в області малих значень хвильового вектора. Зауважимо, що для цієї гетероструктури, на відміну від структури AlAs/GaAs/AlAs, зі збільшенням значення хвильового вектора спостерігається зсув точок ідеального пропускання електронів ($R = 0$), отриманих методом ефективної маси, в бік менших k_1 та більш суттєва невідповідність величин максимумів. Однак потрібно відзначити, що ця розбіжність є значно меншою, ніж при порівнянні точного розв’язку та результатів, що отримані за допомогою методу ефективної маси для випадку $\xi_{1,2} = 1$.

З наведених графіків видно, що зі зменшенням ширини ями (бар’єру) середнє значення коефіцієнта пропускання електронів збільшується, що є очікуваним з фізичних міркувань. Використовуючи метод S-матриці розсіяння, визначено енергію зв’язаних станів для гетероструктури з квантовою ямою (типу AlAs/GaAs/AlAs). Згідно з вказаним методом, енергія станів задається тими значеннями енергії, що є полюсами S-матриці розсіяння. Поставлена задача – непроста з точки зору числових обчислень, оскільки аналітичний вираз для S-матриці (особливо для точного значення хвильової функції у другій області) є складним, а крім

того, значення функцій $k_i = k_i(E)$ ($i=1,2$) знаходились з трансцендентних рівнянь для хвильових векторів.

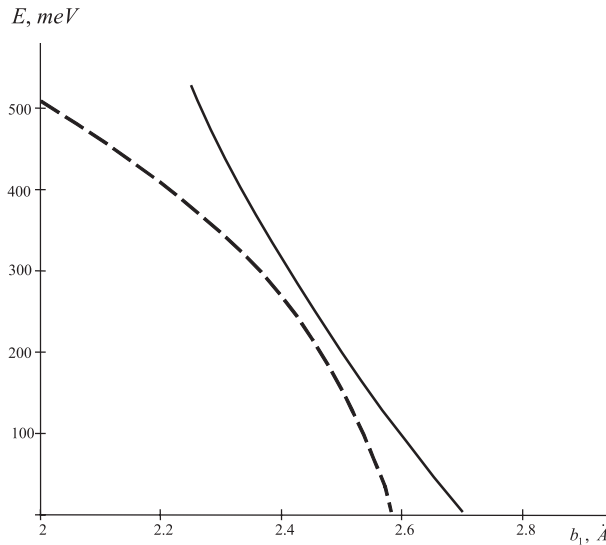


Рис.4. Залежність $E(b_1)$ для гетероструктури $AlAs/GaAs/AlAs$: суцільні криві – точний розв'язок, штрихові криві – наближений розв'язок (третя зона, $L = 4d_2$)

Результати обчислень енергії зв'язаного стану у квантовій ямі, що утворена третіми зонами для $L = 4d_2$, подано на рис.4. Видно, що при фіксованому значенні відстані $b_2 = d_2/2$ енергія залежить від b_1 , а отже, від відстані між сусідніми атомами на межах середовищ. Збільшення b_1 веде до зменшення енергії стану, що можна пояснити ефективним збільшенням розміру квантової ями. Крім того видно, що з точного розв'язку (суцільна крива) отримуємо дещо менші значення енергії, ніж у випадку наближеного розв'язку (штрихові криві), хоча різниця між енергіями є невеликою.

Залежність енергії зв'язаних станів у другій і третій зонах від розміру квантової точки подано на рис.5. Треті зони характеризуються більшим розривом на межах поділу, ніж другі. Енергія зв'язаних станів, що відрахована від дна чи стелі відповідних зон другої області, є більшою для третьої зони. Збільшення розміру КЯ веде до виникнення нових зв'язаних станів та монотонного зменшення енергії частинки, що отримана як методом S-матриці розсіювання (суцільні криві), так і методом ефективної маси (штрихові криві). Внаслідок того, що розрив третіх зон є більшим, ніж других, енергія зв'язаних станів частинки третіх зон квантової ями та матриці більша, ніж відповідна енергія для других зон. У межах квантової ями основний стан (криві 1,2,3,4) виникає при менших значеннях L , ніж збуджений стан (криві 1', 2', 3', 4'), як

для третьої, так і для другої енергетичної зони. Порівняння енергій частинки, отриманих різними методами, показує, що енергії, одержані методом S-матриці розсіювання, є більшими, ніж відповідні енергії у рамках методу ефективної маси.

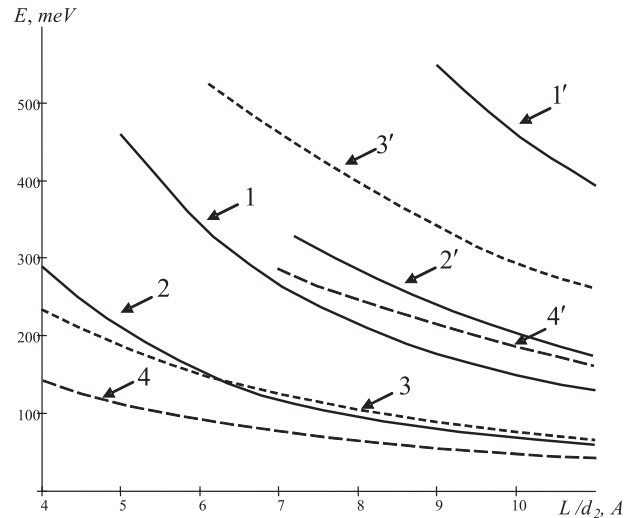


Рис.5. Залежність $E = E(L)$ для гетероструктури $AlAs/GaAs/AlAs$. Криві 1,1', 2, 2' – отримані методом S-матриці розсіювання, криві 3, 3', 4, 4' – методом ефективної маси: 1, 1', 3, 3' – $E = E(L)$ для третьої зони, 2, 2', 4, 4' – $E = E(L)$ для другої зони

Зокрема, для $L = 6d_3$ різниця енергій основного стану, отриманих різними методами, складає 200 меВ для третіх та 90 меВ для других зон.

Таким чином, у роботі на основі моделі Кроніга-Пенні з δ -подібними потенціалами досліджено тришарову наногетероструктуру, в якій біля меж поділу існує перехідний шар, відстань між крайніми атомами якого є параметром задачі і може змінюватися від нуля до двох сталіх ґраток кристалів. Отримана точна формула для коефіцієнта відбивання, з якої можна визначити залежність коефіцієнта R від хвильового вектора, величини перехідного шару та ширини квантової ями (бар'єру) гетероструктури. Конкретні обчислення, проведені для гетеросистем типу $GaAs/AlAs/GaAs$ та $AlAs/GaAs/AlAs$, показали, що наближення огибаючих та методу ефективної маси при малих значеннях хвильового вектора дають близькі значення коефіцієнта відбивання, якщо використати граничні умови Гарісона з відповідним чином підібраними параметрами. За допомогою методу S-матриці розсіювання визначено енергію зв'язаних станів для гетероструктури з квантовою ямою (типу $AlAs/GaAs/AlAs$). Отримано залежність енергії частинки від ширини перехідного шару та від розмірів другого середовища (ширини квантової ями).

Бібліографія

- [1] Караваев Ф., Чернышов В.Н. Резонансное тунелирование X- электронов в структурах (111). Псевдопотенциальный расчет и модель // ФТП. – 2001. – 35, № 1. – С. 105–109.

- [2] Морозова Е.Н., Макаровский О.Н. и др. Резонансное тунелирование дырок в двобарьерных структурах с квантовыми точками в центре квантовой ямы // ФТП. – 2005. – 39, № 5. – С. 573–576.
- [3] Вдовин Е.Е., Ханин Ю.Н. Анизотропия эффективной массы электронов в квантовой яме // ФТП. – 2005. – 39, № 4 – С. 445–452.
- [4] Вдовин Е.Е., Ханин Ю.Н., Дубровский Ю.В. Резонансное тунелирование в однобарьерных гетероструктурах // ФТП. – 2004. – 38, № 4. – С. 436–447.
- [5] Harrison W.A. Tunneling from an Independent-Particle Point of View // Phys. Rev. – 1961. – 123, № 1. – С. 85–89.
- [6] Grinberg A. and Luryi S. Electron transmission across an interface of different one-dimensional crystals // Phys. Rev. B. – 1989. – 39, № 11. – С. 7466–7475.
- [7] Levi A.F.J and Chiu T.H. Quantum reflections and inelastic scattering of electrons in semiconductor heterostructures // Solid-State Electronics. – 1988. – 31, № 3–4. – С. 625–628.
- [8] Trzeciakowski W. Effective-mass approximation in semiconductor heterostructures: One-dimensional analysis // Phys. Rev. B. – 1988. – 38, № 17. – С. 12493–12507.
- [9] Ben Daniel D.J. and Duke C.B. Space-Charge Effects on Electron Tunneling // Phys. Rev. – 1966. – 152, № 2. – С. 683–692.
- [10] Mohan P., Motohisa J., Fukui T. Fabrication of InP/InAs/InP core-multishell heterostructure nanowires by selective area metalorganic vapor phase epitaxy // Appl.Phys.Lett. – 2006. – 88, № 13. – P. 133105(1)–133105(3).
- [11] Noborisaka J., Motohisa J., Hara S., Fukui T. Fabrication and characterization of freestanding GaAs/ AlGaAs core-shell nanowires and AlGaAs nanotubes by using selective-area metalorganic vapor phase epitaxy // Appl.Phys.Lett. – 2005. – 87, № 9. – P. 093109(1)–093109(3).
- [12] Holovatsky V., Gutsul V., Makhanets O. Energy spectrum of electron in superlattice along the elliptic nanowire // Romanian journal of physics. – 2007. – 52, № 3–4. – P. 327–335.
- [13] Ткач М., Маханець О., Зегря Г. Электроны, дырки и экситоны в сверхрешетке цилиндрических квантовых точек с предельно слабой связью квазичастиц между слоями квантовых точек // ФТП. – 2002. – 36, № 5. – С. 543–549.
- [14] Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation // Phys. Rev. B. – 1981 – 24, № 10. – P. 5693–5697.
- [15] Zhu Q.-G. and Kroemer H. Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors // Phys. Rev. B. – 1983. – 27, № 6. – P. 3519–3527.
- [16] Altarelli M. Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices // Phys. Rev. B. – 1983. – 28, № 2. – P. 842–845.
- [17] Vakarchuk I.O. Квантова механіка. – Львів: ЛДУ ім. Івана Франка, 1998. – 616 с.
- [18] VuKmirovic N., Indjin D., Jovanovic V.D., Ikonc Z. and Harrison P. Symmetry of Hamiltonian in pyramidd quantum dots: Application to the calculation of electronic structure // arXiv: cond-mat/05.05607, 1, 1.
- [19] Бойчук В.И., Билынский И.В. Исследование интерфейсных поляронных состояний простой гетероструктуры полупроводников // ФТТ. – 1995. – 37, № 3. – С. 1016–1021.
- [20] Бойчук В.И., Кубай Р.Ю. Влияние промежуточного слоя с переменной от координаты диэлектрической проницаемостью на энергию основного состояния электрона в сферической сложной наногетеросистеме // ФТТ. – 2001. – 43, № 2. – С. 226–232.
- [21] Ткач Н.В., Фартушинский Р.Б. Влияние фононов на электронный спектр в полупроводниковых малоразмерных квантовых точках, помещенных в диэлектрическую среду // ФТТ. – 2003. – 45, № 7. – С. 1284–1291.
- [22] Baz A.I., Zeldovych Ya.B., Perelomov A.M. Dispersion and Decays in Irrelativistic Mechanics. – Moscow: "Nauka 1971. – 544 p.