УДК 538.911

Є.А. Нелін, М.В. Водолазька

КВАНТОВО-МЕХАНІЧНІ СТРУКТУРИ З ДЕЛЬТА-ФУНКЦІОНАЛЬНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ

Based on the concept of quantum-mechanical impedance model, we develop the quantum-mechanical δ-inhomogeneities – δ-barrier and δ-well for nanoelectronics applications. Typical models for natural and artificial quantum-mechanical structures: single, double and triple δ-inhomogeneities; potential steps, wells and barriers with δ-inhomogeneities, lattice of δ-inhomogeneities are considered. We obtain analytical expressions for eigenvalues of structures. We give energy dependences of reflection and transmission coefficients for the typical quantum-mechanical structures with δ-functional potential. By comparing characteristics of inhomogeneities with the finite size, we analyze the δ-error. We consider crystal and crystal-like structure, defects in the crystal and surface levels. Impedance δ-model of the quantum-mechanical structures are distinguished by simplicity and clarity, wide possibilities of their use in the design of signal processing nanoelectronic devices, as well as teaching and learning tool.

Вступ

У зв'язку з інтенсивними розробками та дослідженнями новітніх наноелектронних пристроїв обробки сигналів значної актуальності набувають прикладні квантово-механічні задачі, пов'язані з поширенням електронних хвиль у штучних структурах. При моделюванні квантово-механічних структур, які фактично є бар'єрними структурами різної геометрії, часто використовують дельта-функціональний потенціал. Модель потенціальних δ-бар'єрів і δ-ям, яка дає можливість отримати аналітичні рішення, широко застосовується у квантовій механіці. За допомогою решіток δ-бар'єрів моделюють ідеальні кристали та дефекти в кристалах [1], двобар'єрну структуру з резонансним тунелюванням електронів (РТЕ) [2].

У цій праці квантово-механічні задачі з δ-функціональним потенціалом розглянуто на основі концепції імпедансу [3]. Традиційно квантово-механічні задачі розв'язують зшиванням рішень на межах з умов неперервності хвильової функції та її похідної. В імпедансній моделі [3] граничні умови враховано автоматично, що істотно спрощує розв'язок.

Фізико-технічні принципи електроніки і мікроелектроніки базуються на керуванні дрейфовим рухом електронів у кристалічних ґратах твердого тіла, а наноелектроніки – на керуванні тунелюванням електронних хвиль крізь штучні бар'єрні структури. Базовий елемент такої структури – потенціальна неоднорідність у формі сходинки. Дві сходинки протилежної спрямованості утворюють бар'єр або яму.

Сходинка як межа між різнорідними областями приводить до відбиття хвилі. Відповідно, в бар'єрній структурі формується поле відбитих хвиль. Залежно від фазових співвідношень між полями падаючої та відбитої хвиль спостерігається резонансне проходження (у т.ч. резонансне тунелювання) та резонансна локалізація хвиль. Внаслідок цих ефектів у періодичних структурах формуються дозволені і заборонені зони (ЗЗ).

Потенціальна сходинка відповідає гетеропереходу – контакту двох напівпровідників з різною шириною ЗЗ. Дельта-неоднорідність моделює високий тонкий бар'єр або глибоку вузьку яму, які позначимо як ε-неоднорідність. Потенціальні залежності типових наноелектронних структур утворюють сходинки, бар'єри, ями, δ- та ε-неоднорідності. Ґрати δ-неоднорідностей відповідають кристалу та кристалоподібній структурі (КС). КС, що мають особливі спектральні характеристики, широко досліджують для пристроїв обробки сигналів.

Постановка задачі

Мета роботи полягає у розробленні моделі імпедансних квантово-механічних δ-неоднорідностей і на цій основі імпедансних моделей квантово-механічних структур з однією або декількома δ-неоднорідностями та ґрат δ-неоднорідностей.

Потенціальна δ-неоднорідність

Вхідний імпеданс δ-неоднорідності. Імпеданс, який характеризує реакцію середовища на хвильове збурення, є узагальненим параметром або характеристикою взаємодії хвилі та середовища для хвиль будь-якої природи. Імпедансний підхід широко використовується в механіці, акустиці, радіотехніці, оптиці. Цей підхід не отримав поширення в квантовій механіці, хоча він має переваги порівняно з традиційним матричним методом.

Квантово-механічний імпеданс дорівнює $Z = 2\sqrt{\frac{2(E \mp V)}{m}}$, де E — енергія електрона; V — потенціальна енергія; m — ефективна маса електрона. Тут і далі верхній знак відповідає бар'єру. Для потенціалу δ-неоднорідності площею α і шириною $a \to 0$ маємо $V = \frac{\alpha}{a} \to \infty$. З огляду на це, імпеданс і хвильове число δ-ями та δ-бар'єра визначаються виразами $Z_я = 2\sqrt{\frac{2\alpha}{am}}$, $k_я = \frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar} = \frac{c}{\sqrt{a}}$ і $Z_б = iZ_я$, $k_б = ik_я$, де $c = \frac{\sqrt{2\alpha m}}{\hbar}$.

Згідно з імпедансною моделлю потенціальні бар'єр або яма моделюються лінією передачі довжиною a з імпедансом Z. Вхідний імпеданс лінії дорівнює

$$Z_{вх} = Z\frac{Z_н - ZA}{Z - Z_н A}, \tag{1}$$

де $Z_н$ — імпеданс навантаження; $A = th(ika)$. В цьому випадку $Z_н = Z_0 = 2\sqrt{\frac{2E}{m'}}$ — імпеданс зовнішнього середовища, де m' — ефективна маса електрона у зовнішньому середовищі.

Для δ-бар'єра $A = \frac{-c}{\sqrt{a}}$, а для δ-ями $A = \frac{ic}{\sqrt{a}}$. Вхідний імпеданс δ-неоднорідності дорівнює $Z_0 \pm \frac{i4\alpha}{\hbar}$. Дельта-неоднорідність вносить в імпеданс реактивну складову частину: δ-бар'єр — ємнісну, а δ-яма — індуктивну (в радіотехніці і в квантовій механіці в формулі (1) протилежні знаки). Ця складова залежить лише від площі δ-неоднорідності і не залежить від ефективної маси. Оскільки індуктивна складова частина компенсує ємнісну, то δ-яма компенсує вплив δ-бар'єра. Повна компенсація відповідає РТЕ крізь δ-бар'єр.

Для спрощення перетворень будемо використовувати імпеданси, нормовані до Z_0. Нормований вхідний імпеданс δ-неоднорідності дорівнює

$$Z_\delta = 1 + i2\eta, \tag{2}$$

де $\eta = \frac{2\alpha m'}{\hbar^2 k'}$.

Коефіцієнт відбиття від δ-неоднорідності. Коефіцієнт відбиття від межі між областями з імпедансом Z і з вхідним імпедансом $Z_{вх}$ визначається виразом

$$R = \frac{Z - Z_{вх}}{Z + Z_{вх}}. \tag{3}$$

Підставивши $Z = 1$ і $Z_{вх} = Z_\delta$, отримаємо

$$R = \frac{1}{i\eta^{-1} - 1}. \tag{4}$$

При $E > 0$

$$R = \frac{1}{\pm i\hbar\alpha^{-1}\sqrt{\frac{2E}{m'}} - 1}, \tag{5}$$

що збігається з [4], де розглянуто δ-бар'єр. Коефіцієнти відбиття однакових за площею і за характером δ-неоднорідностей рівні, а різних за характером — рівні по модулю. Таким чином, ступінь локалізації хвилі δ-бар'єрами такий самий, як і δ-ямами однакової площі.

З огляду на (1) і (3), коефіцієнт відбиття від симетричного потенціального бар'єра або ями скінченних розмірів визначається виразом

$$R = \frac{(Z^2 - 1)A}{2Z - (Z^2 + 1)A}. \tag{6}$$

На рис. 1 наведено залежності, що відповідають (6) і (5), для ε- і δ-неоднорідностей однакової площі. Максимальна відносна похибка δ-моделі бар'єра дорівнює 5 %, ями — 10 %.

Незважаючи на умову $E \ll V$, δ-модель забезпечує прийнятну апроксимацію і при $E > V$. У діапазоні до 1 еВ при товщині бар'єра $a = 1$ нм максимальна похибка δ-моделі дорівнює 8 %, а при $a = 0,5$ нм і $a = 1$ нм і $m = m' = m_0$ — відповідно 8 і 4 %. Похибка менша для бар'єра. У разі ε-ями з параметрами ε-бар'єра з рис. 1 похибка становить 10 % вже при $E = 0,3$ еВ.

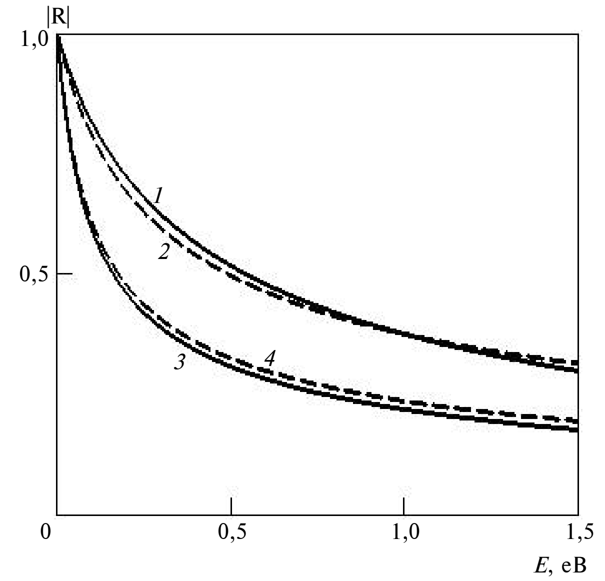

Рис. 1. Залежності коефіцієнта відбиття від ε- і δ-бар'єрів (криві *1*, *2*) та від ε- і δ-ям (криві *3*, *4*). Параметри ε-неоднорідностей: V = 1 еВ, товщина бар'єра a = = 0,5 нм, ширина ями a = 0,3 нм. Для ε- і δ-неоднорідностей $m = m' = 0,1m_0$, де m_0 – маса електрона

Дельта-яма, $E < 0$. Коефіцієнт відбиття визначається виразом

$$R = \frac{1}{\hbar\alpha^{-1}\sqrt{\frac{2|E|}{m'}} - 1}.$$

Коефіцієнт відбиття дорівнює відношенню амплітуд зворотної та прямої хвиль на межі між зовнішнім середовищем та потенціальною ямою з боку зовнішнього середовища. Оскільки зовнішнє середовище реактивне, ці хвилі експоненціальні. Власному значенню енергії відповідає резонанс і режим стоячих хвиль у потенціальній ямі. Із наближенням до резонансу амплітуда зворотної хвилі збільшується, а прямої зменшується. При резонансі амплітуда прямої хвилі дорівнює нулю. Залежність $R(E)$ у цій точці має розрив. Виходячи з умови $R = \infty$, власне значення δ-ями дорівнює $E_\delta = \frac{-m'\alpha^2}{2\hbar^2}$, що збігається з [4]. Власні значення ε- і δ-ями (див. рис. 1) дорівнюють $E_\varepsilon = -0,055$ еВ та $E_\delta = -0,059$ еВ. Похибка δ-моделі становить 7 %.

Потенціальна сходинка і δ-неоднорідність

На рис. 2 наведено характерні потенціальні залежності з δ-неоднорідностями.

Моделі, наведені на рис. 2, *а* і *б* при $V_1 = \infty$ та на рис. 2, *в* для ідентичних δ-бар'єрів часто використовують у прикладних задачах. Розгляд сходинок скінченної висоти, різних за характером δ-неоднорідностей, наповнює ці моделі новим важливим змістом, зокрема, умовами РТЕ.

Знайдемо власні значення потенціальної області, обмеженої сходинкою і δ-неоднорідністю (див. рис. 2, *а*). У разі сходинки вниз і δ-бар'єра ця область – потенціальна яма. Власні значення визначаються умовою балансу фаз у потенціальній області:

$$2kb + \varphi_1 + \varphi_2 = 2\pi n, \tag{7}$$

де b – відстань між сходинкою і неоднорідністю або між неоднорідностями для всіх моделей на рис. 2, $\varphi_{1,2}$ – фази коефіцієнтів відбиття від меж області; $n = 1, 2, ...$ – номер енергетичного рівня електрона. Тут враховано періодичність фази, так що $0 \le \varphi_1 + \varphi_2 < 2\pi$. У цьому випадку $\varphi_{1,2}$ – фази коефіцієнтів відбиття відповідно від сходинки і від δ-неоднорідності. З огляду на (3), для сходинки вниз маємо

$$\varphi_1 = \begin{cases} -2\text{arctg}|Z_1|, & E < V_1, \\ 0 \ (Z_1 < 1); \ \pi \ (Z_1 > 1), & E > V_1, \end{cases} \tag{8}$$

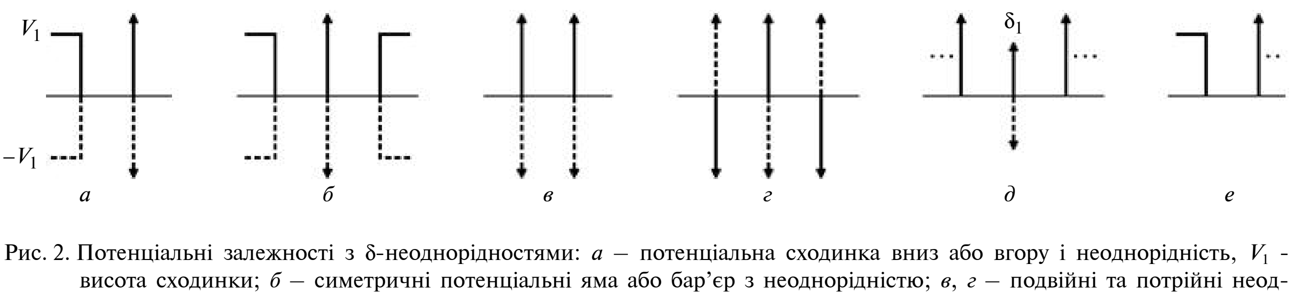

Рис. 2. Потенціальні залежності з δ-неоднорідностями: *а* – потенціальна сходинка вниз або вгору і неоднорідність, V_1 - висота сходинки; *б* – симетричні потенціальні яма або бар'єр з неоднорідністю; *в*, *г* – подвійні та потрійні неоднорідності; *д* – дефект кристала, δ_1 – неоднорідність, зумовлена дефектом; *е* – поверхня кристала

де Z_1 — імпеданс в області сходинки. Для сходинки вгору $E > 0$ і значення φ_1 такі ж, як і для сходинки вниз при $E > V_1$. Виходячи з (4),

$$\varphi_2 = \pi + \operatorname{arctg}\eta^{-1}. \qquad (9)$$

Сходинка вниз, E < V$_1$. Підставивши (8) і (9) в (7), отримаємо

$$\operatorname{tg}2kb = -\frac{1+\eta\tilde{Z}}{\eta+\tilde{Z}}, \qquad (10)$$

де $\tilde{Z} = \dfrac{2\,|\,Z_1\,|}{|\,Z_1\,|^2 - 1}$. При $(|\,Z_1| - 1)(\tilde{Z} - \eta) > 0$ для бар'єра і при $|Z_1| < 1$ для ями значення $2kb$ відносно (7) зміщені на π радіан.

Якщо $V_1 = \infty$, то $\tilde{Z} = 0$ і

$$\operatorname{tg}2kb = -\eta^{-1}, \qquad (11)$$

що збігається з [5], де розглянуто нескінченно високу сходинку і δ-бар'єр. Для нижніх рівнів $|\eta| >> 1$. При цьому $kb - \pi n \approx \dfrac{-\eta^{-1}}{2}$ і власні значення визначаються виразом

$$E \approx E_n(1-\chi), \qquad (12)$$

де $E_n = \left(\dfrac{\pi n}{2}\right)^2 \xi$, $\xi = \dfrac{2\hbar^2}{m'b^2}$; $\chi = \dfrac{\pm\hbar^2}{\alpha m'b}$. Значення E_n, що визначаються умовою $\operatorname{tg}kb = 0$, власні для нескінченно глибокої потенціальної ями шириною *b*. Отже, власні рівні області, обмеженої нескінченно високою сходинкою і δ-бар'єром, розташовані нижче, а δ-ямою — вище рівнів нескінченно глибокої ями. Нижні рівні зміщені на величину χE_n.

Розглянемо випадок ε-неоднорідності. Нехай $V_1 = V$ і $m = m' = m_1$, де m_1 — ефективна маса електрона в області сходинки. Для нижніх рівнів $E << V$, $\tilde{Z} \approx 2\sqrt{\dfrac{E}{V}} << 1$ і $|\eta| >> 1$. Оскільки $|\,\eta\,|\,\tilde{Z} \approx k_m a$, де k_m — максимальне значення хвильового вектора в області ε-неоднорідності, а $k_m a << 1$, то $|\,\eta\,|\,\tilde{Z} << 1$ і $\operatorname{tg}2kb \approx -\eta^{-1}$. Таким чином, $kb - \pi n \approx -\tilde{Z}\gamma$, де $\gamma = \dfrac{\pm 1}{2k_m a}$. У випадку високої сходинки $V >> \xi\gamma^2$ і $E \approx E_n(1-\sigma\gamma)$, де $\sigma = 2\sqrt{\dfrac{\xi}{V}}$, $\sigma\gamma = \chi$. Величина σ характеризує зниження нижніх рівнів глибокої ями відносно рівнів нескінченно глибокої ями [4], а коефіцієнт γ — збільшення зміщення рівнів при заміні однієї зі сходинок ями ε-неоднорідністю. У випадку ε-бар'єра при $V = 1$ еВ, $b = 20$ нм, $a = 0{,}1$ нм і $m = m' = m_1 = 0{,}3m_0$ маємо $\sigma = 0{,}071$, $\gamma = 1{,}8$ і $\chi = 0{,}13$.

Сходинка вниз, E > V$_1$***; сходинка вгору, E > 0. Резонансне проходження***. Власні рівні визначаються (11) зі зміщенням значень $2kb$ на π радіан, якщо $Z_1 < 1$. При резонансному проходженні хвиль, крім балансу фаз, виконується баланс амплітуд: модулі коефіцієнтів відбиття від сходинки і δ-неоднорідності рівні. З цієї умови маємо $|\eta| = \dfrac{|\sqrt{Z_1} - \sqrt{Z_1^{-1}}\,|}{2}$.

Підставивши в (1) $Z_{\text{н}} = Z_\delta$ і $Z = 1$, виходячи з (3), отримаємо коефіцієнт відбиття від сходинки і δ-неоднорідності

$$R = \frac{Z_1 - Z_\delta + i(1 - Z_1 Z_\delta)B}{Z_1 + Z_\delta - i(1 + Z_1 Z_\delta)B},$$

де $B = \operatorname{tg}kb$.

Потенціал, що розглядається, характеризує рис. 3. Для порівняння наведено характеристику поодинокого ε-бар'єра; характеристики ε- і δ-

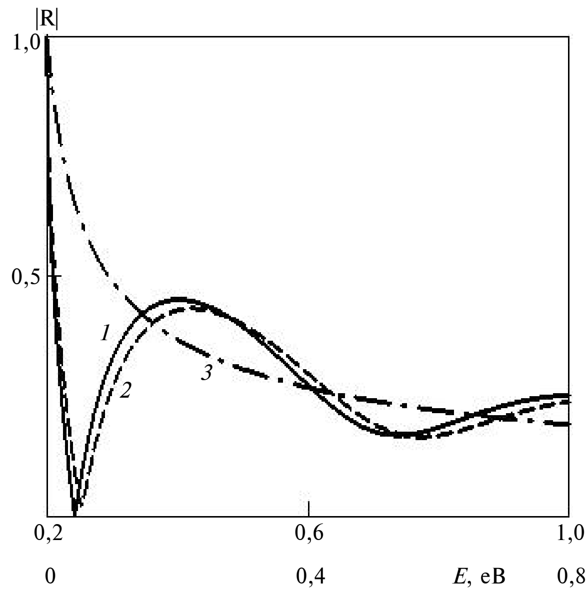

Рис. 3. Залежності коефіцієнтів відбиття від сходинки і ε- або δ-бар'єра (криві *1*, *2*), а також від поодинокого ε-бар'єра (крива *3*); $V = 1{,}05$ еВ, $V_1 = 0{,}2$ еВ, $a = 0{,}2$ нм, $b = 4$ нм, $m = m' = m_1 = 0{,}16m_0$; $V–V_1 = 0{,}85$ еВ — висота поодинокого ε-бар'єра. Нижній ряд значень енергії *E* відповідає одиночному ε-бар'єру

бар'єрів збігаються. Мінімуми залежностей *1* і *2* відповідають власним значенням, які для залежності *1* дорівнюють 0,243 і 0,737 еВ. При першому значенні виконується баланс амплітуд і спостерігається РТЕ. Для РТЕ в структурі з δ-бар'єром має бути $b = 4,08$ нм.

Потенціальні яма або бар'єр з δ-неоднорідністю

Симетрична яма з δ-неоднорідністю (див. рис. 2, *б*)**.** Знайшовши вхідний імпеданс такого потенціалу, отримаємо коефіцієнт відбиття:

$$R = \frac{Z_1^2 B(1+\eta B)+\eta - B}{(Z_1 B + i)[Z_1(1+\eta B)+i(\eta - B)]}. \qquad (13)$$

При $E < V_1$ і $E > V_1$ власні значення визначаються рівністю нулю знаменника і чисельника відповідно.

Якщо $E < V_1$, спектр власних значень складається з двох складових частин. Перша визначається виразом $B_1 = \frac{-1}{|Z_1|}$ або $\operatorname{tg} 2kb = -\tilde{Z}$ з періодичністю 2π радіан і відповідає парним за номером власним значенням потенціальної ями без δ-неоднорідності. При цих значеннях δ-неоднорідність не впливає, оскільки хвильові функції непарні. Для другої складової частини

$$B_2 = \frac{\eta + |Z_1|}{1-\eta\ |Z_1|}. \qquad (14)$$

Нижнім рівням, коли $|Z_1| >> |\eta| >> 1$, відповідає $B_2 \approx -\eta^{-1}$. При цьому кожний з рівнів другої складової частини розташований поблизу відповідного рівня першої складової частини нижче для δ-бар'єра і вище для δ-ями. Якщо $V_1 = \infty$, то $B_1 = 0$, $B_2 = -\eta^{-1}$, що збігається з [4].

При $E > V_1$ власні значення визначаються виразом

$$B = \frac{1 - Z_1^2 \pm \sqrt{(1-Z_1^2)^2 - 4\eta^2 Z_1^2}}{2\eta Z_1^2}. \qquad (15)$$

Для δ-бар'єра ці значення відповідають РТЕ. Якщо $Z_1 >> 2|\eta| >> 1$, то $B_1 \approx -\eta^{-1}$ і $B_2 \approx 0$.

На рис. 4 описується РТЕ крізь одиночні ε- і δ-бар'єри, розташовані у потенціальній ямі.

Залежності *1* і *2* розраховані, виходячи з [3] і (13).

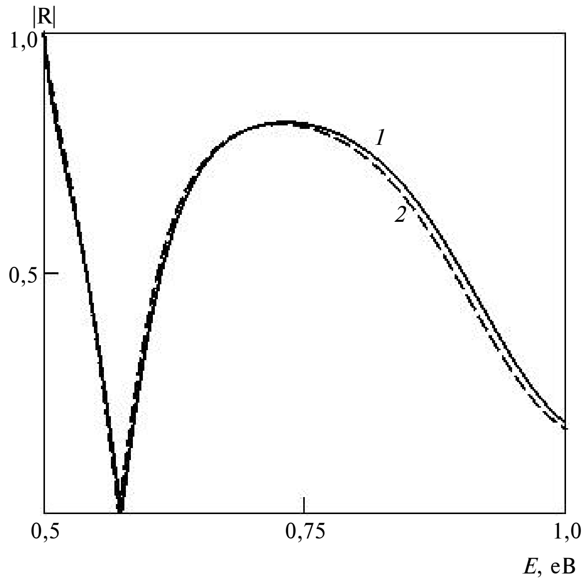

Рис. 4. Залежності коефіцієнта відбиття від потенціальної ями з ε- або δ-бар'єром (криві *1*, *2*); $V = 1$ еВ, $V_1 = 0,5$ еВ, $a = 0,2$ нм, $b = 2$ нм, $m = m' = m_1 = m_0$

***Симетричний бар'єр з δ-неоднорідністю,* (див. рис. 2, *б*). $E > -V_1$.** Власні значення визначаються рівністю нулю виразу (13).

У випадку δ-ями маємо двобар'єрну структуру з δ-ямою. У діапазоні тунелювання, коли $E < 0$, $B = i\,\mathrm{th}(|k|b)$. Власне значення, що відповідає РТЕ, єдине і визначається виразом

$$|\eta| = \frac{|B|(|Z_1|^2 + 1)}{|Z_1 B|^2 + 1}.$$

Для товстих бар'єрів $|B| \approx 1$ і $E \approx E_\delta$. Бар'єру з δ-ямою відповідає вузькосмугова характеристика проходження з високим позасмуговим заглушенням.

У випадку δ-бар'єра при $E > 0$ власні значення, що відповідають РТЕ, визначаються (15). Виходячи з (15), область допустимих значень $|\eta| \le \frac{|1 - Z_1^2|}{2Z_1}$. При $m_1 = m'$ відношення максимально можливих значень $|\eta|$ варіантів з ямою і бар'єром дорівнює $\sqrt{\frac{E+V_1}{E-V_1}}$. Потенціальна яма забезпечує РТЕ крізь δ-бар'єри більшої площі.

Подвійні і потрійні δ-неоднорідності

Подвійна δ-неоднорідність, $E > 0$ (див. рис. 2, в). Характер неоднорідностей однаковий або різний, площі у загальному випадку різні.

Знайшовши вхідний імпеданс подвійної δ-неоднорідності, отримаємо коефіцієнт відбиття:

$$R = \frac{B(\eta_1 - \eta_2) - i(\eta_1 + \eta_2 + 2\eta_1\eta_2 B)}{1 + B(\eta_1 + \eta_2) + i(\eta_1 + \eta_2 + 2\eta_1\eta_2 B - B)}, \quad (16)$$

де індекси 1 і 2 відносяться до першої та другої неоднорідностей. Виходячи з (3) і (7), для власних значень маємо

$$\mathrm{tg}2kb = \frac{\eta_1 + \eta_2}{1 - \eta_1\eta_2} \quad (17)$$

зі зміщенням значень $2kb$ на π радіан, якщо $\eta_1\eta_2 < 1$ і $\eta_1\eta_2 > -1$, відповідно, при однакових і різних за характером неоднорідностях.

Нехай $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Для однакових за характером неоднорідностей $\eta_1 = \eta_2 = \eta$ і (16), (17) перетворюються до вигляду

$$R = \frac{2\eta(1 + \eta B)}{B - 2\eta(1 + \eta B) + i(1 + 2\eta B)}, \quad (18)$$

$$B = -\eta^{-1}. \quad (19)$$

Вираз (18) випливає і із формули коефіцієнта відбиття двобар'єрної структури [3], а вираз (19) — з рівності нулю (18) і збігається з [4], де розглянуто ідентичні δ-бар'єри. Формула (19) відрізняється від (11) зменшеним у два рази аргументом функції tg$x$. Відповідно, із врахуванням (12), нижні рівні визначаються виразом $E \approx E_n(1 - 2\chi)$. При заміні сходинки на δ-неоднорідність зміщення нижніх рівнів відносно рівнів нескінченно глибокої потенціальної ями зростає в два рази.

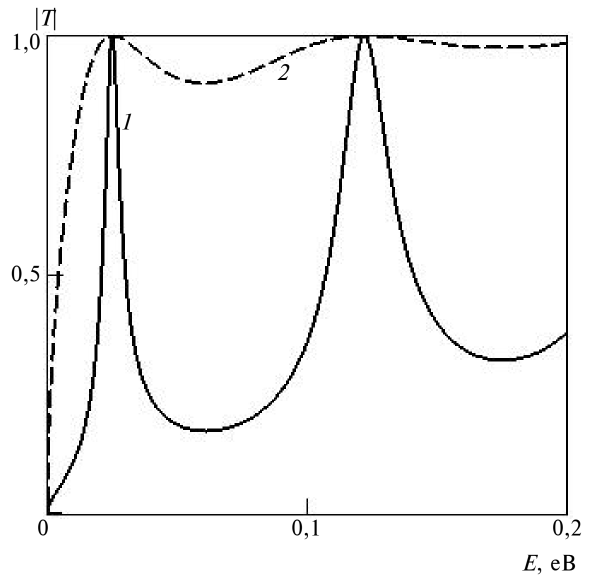

Рис. 5. Залежності коефіцієнтів проходження потенціальної ями з ε-неоднорідностями та без них (криві *1*, *2*). Потенціали ями, ε-ями і ε-бар'єра дорівнюють, відповідно, 0,1, 1,28 і 0,8 еВ; $a = 0{,}2$ нм; $b = 5$ і 5,2 нм для кривих *1* і *2* відповідно; $m = m' = m_1 = m_0$

Для різних за характером δ-неоднорідностей $\eta_1 = -\eta_2 = \eta$ і

$$R = \frac{2\eta B(1 + i\eta)}{1 - iB(1 + 2\eta^2)}.$$

Власні значення визначаються умовою $B = 0$ і збігаються зі значеннями резонансного проходження над симетричними ямою або бар'єром. Такий збіг дає змогу сформувати селективну структуру, що являє собою потенціальну яму або бар'єр з розміщеними на їх краях різних за характером δ-неоднорідностями.

Таку структуру описано на рис. 5. Глибина ε-ями вибрана з умови максимуму резонансних значень коефіцієнта проходження.

Потрійна δ-неоднорідність, $E > 0$ (див. рис. 2, г). Крайні неоднорідності ідентичні, середня неоднорідність має протилежний характер і подвоєну площу.

Із врахуванням симетрії структури її власні значення відповідають РТЕ. При резонансі в будь-якій точці резонансної порожнини вхідні імпеданси у протилежних напрямках рівні. Позначимо через Z_+ і Z_- вхідні імпеданси на лівій межі середньої неоднорідності відповідно в додатному і від'ємному напрямках осі x. Із врахуванням (1) та (3), а також комплексного спряження величин для від'ємного напрямку, маємо

$$Z_+ = \frac{Z_\delta - iB}{1 - iZ_\delta B} - 4i\eta, \quad Z_- = \frac{\overset{*}{Z_\delta} + iB}{1 + i\overset{*}{Z_\delta} B},$$

де 2η — реактивна складова частина вхідного імпедансу крайніх неоднорідностей; знак "*" означає комплексне спряження. З рівності $Z_+ = Z_-$ отримаємо $B(B + 2B\eta^2 + \eta) = 0$. Звідси випливає $B = 0$ і $B = \frac{-\eta}{1 + 2\eta^2}$.

На рис. 6 описано РТЕ крізь поодинокий бар'єр в потрійній і для порівняння в подвійній ε-неоднорідностях.

Власні значення потрійної ε-неоднорідності дорівнюють 0,081 і 0,082 еВ, а її δ-моделі — 0,082 і 0,094 еВ.

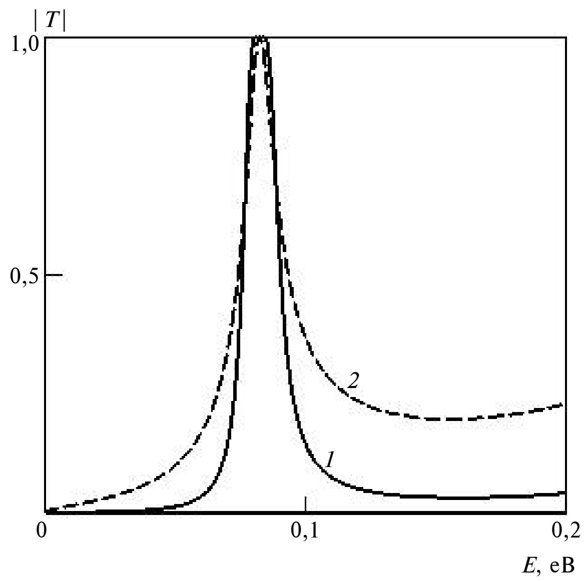

Рис. 6. Залежності коефіцієнтів проходження потрійної і подвійної ε-неоднорідностей (криві *1*, *2*); 1 еВ – висота ε-бар'єра; 0,2 нм – ширина ε-ями; 1,24 і 1,60 еВ – глибини ε-ями; 0,4 і 0,2 нм – товщина ε-бар'єра; b = 2 і 1,93 нм, відповідно, для потрійної і подвійної ε-неоднорідностей; $m = m' = m_1 = m_0$

Кристал і кристалоподібна структура, дефекти, поверхневі стани

Кристал і КС. Періодичні ґрати δ-неоднорідностей – зручна модель для аналізу характеристик кристалів та КС. Моделювання періодичних структур ґрунтується на теоремі Блоха. Імпедансна модель без цієї теореми дає можливість отримати відому умову для ЗЗ, а також нові результати, які ілюструють характеристики кристалів та КС з хвильових позицій.

Нехай подвійна δ-неоднорідність (див. рис. 2, *в*) – фрагмент необмежених ґрат δ-неоднорідностей. У таких ґратах вхідний імпеданс Z кожної з неоднорідностей однаковий. Із врахуванням (1) та (2) вхідні імпеданси суміжних неоднорідностей зв'язані співвідношенням

$$Z = \frac{Z - iB}{1 - iZB} + 2i\eta.$$

Звідси

$$Z = \sqrt{\psi} + i\eta, \qquad (20)$$

де $\psi = 1 - \eta^2 - 2\eta B^{-1}$.

Звернемо увагу на взаємозв'язок фізики і математики у виразі (20). У ЗЗ імпеданс Z уявний, тому математична функція дійсної частини $\mathrm{Re}\,Z$ має бути такою, щоб умова $\mathrm{Re}\,Z = 0$ виконувалася в діапазоні значень. Як бачимо, $\mathrm{Re}\,Z = \sqrt{\psi}$, а в ЗЗ $\psi < 0$.

На рис. 7 наведено залежність $\psi(E)$, яка ілюструє зонний характер пропускання необмеженої періодичної структури.

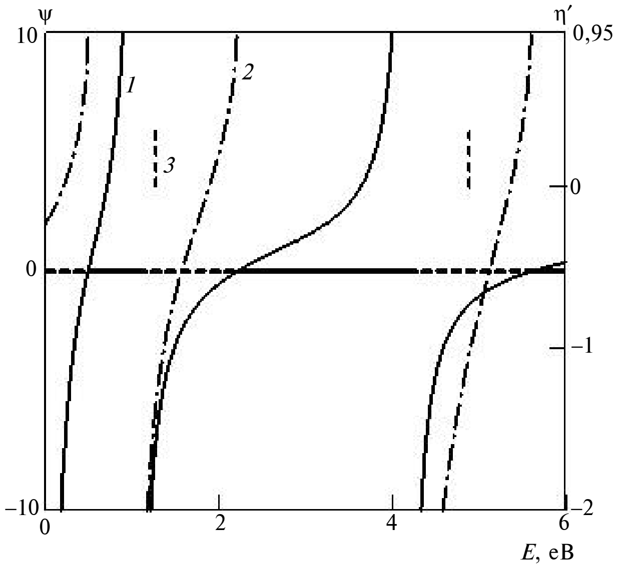

Рис. 7. Залежності $\psi(E)$ решітки δ-бар'єрів і рівнів дефекту кристала (криві *1*, *2*); поверхневі рівні (*3*); b = 0,6 нм, α = 0,5 еВ·нм, V_1 = 20 еВ, $m' = m_1 = m_0$

При $\psi < 0$ імпеданс уявний і ґрати δ-неоднорідностей стають реактивним квантовомеханічним середовищем. Ці інтервали відповідають ЗЗ, позначеним на рис. 7 штриховою лінією на осі абсцис. Дозволені зони позначені суцільною лінією.

З умови $\psi < 0$ отримаємо відоме співвідношення для ЗЗ [6]:

$$|\cos kb + \eta \sin kb| > 1. \qquad (21)$$

У випадку δ-бар'єрів нижні межі дозволених зон визначаються умовою $\psi = 0$, а верхні – $B = 0$, коли функція ψ зазнає розриву. Верхні межі збігаються з власними значеннями нескінченно глибокої потенціальної ями. Для нижніх меж маємо $B = \dfrac{2}{\eta^{-1} - \eta}$. При $\eta >> 1$ зони вузькі, якщо $\eta << 1$ – широкі.

Виходячи з (3) та (20), у дозволених зонах фаза коефіцієнта відбиття від δ-неоднорідності необмежених ґрат дорівнює $\varphi = \pi n - kb$, де n – номер дозволеної зони. Таким чином, баланс фаз (7), що відповідає резонансу і формуванню стоячої хвилі між δ-бар'єрами, виконується у всій зоні. Дозволені зони – зони власних значень кристала або КС. Стояча хвиля компенсує хвильові неоднорідності на межах елементів структури [3], і падаюча хвиля резонансно проходить, зокрема, резонансно тунелює, крізь кристал або КС з коефіцієнтом проходження, що дорівнює одиниці. Власні значення подвійної δ-неоднорідності, що визначаються (19), і при яких ліва частина (21) дорівнює нулю, розташовані приблизно в серединах дозволених зон.

Дефекти кристала та КС. Розглянуті кристал і КС ідеальні та нескінченні. Оскільки реальні структури мають дефекти і скінченні, значний практичний інтерес становить моделювання дефектів і поверхні кристала. Порушення періодичності структур веде до формування рівнів у ЗЗ.

Дефект моделюється неоднорідністю δ_1 з параметром η_1 (див. рис. 2, *д*). У кристалі дефект відповідає атомам впровадження або заміщення. Така задача аналогічна задачі з δ-неоднорідністю у потенціальній ямі. Виходячи з (14) або з рівності вхідних імпедансів у протилежних напрямках на межі неоднорідності δ_1, отримаємо

$$B = \frac{\eta_1 + |Z|}{1 - \eta_1 |Z|}. \tag{22}$$

Криві *2* на рис. 7 показують залежність рівнів дефекту від відношення параметрів дефекту і кристала $\eta' = \frac{\eta_1}{\eta}$.

При $\eta_1 = 0$ рис. 2, *д* відповідає вакансії. Кристал з вакансією являє собою резонатор Фабрі–Перо з резонансною порожниною шириною $2b$ і відбивачами, утвореними напівнескінченними ґратами δ-бар'єрів. По-іншому, це потенціальна яма з вхідним імпедансом стінок, що дорівнює Z. Виходячи з (7) або (22), власні значення такого резонатора визначаються виразом $B = 2\eta$, що збігається з [6].

Таммівські поверхневі рівні (див. рис. 2, е). З умови балансу фаз або рівності нулю знаменника коефіцієнта відбиття при $E < V_1$ у ЗЗ маємо

$$B = \frac{2\eta}{1 + |Z_1|^2 - 2\eta |Z_1|}.$$

Якщо $m_1 = m'$, то

$$B = \frac{1}{\frac{V_1}{2\eta E} - \sqrt{\frac{V_1}{E - 1}}},$$

що збігається із [6]. Глибокі нижні поверхневі рівні близькі до нижніх меж ЗЗ. На рис. 7 показано два нижні поверхневі рівні.

Висновки

Імпедансні моделі квантово-механічних структур з дельта-функціональним потенціалом істотно спрощують розв'язання прикладних задач наноелектроніки. Отримані аналітичні вирази для характеристик і власних значень типових структур дають змогу фізично наочно пояснити формування умов резонансного проходження хвиль, спектрів природних і штучних квантово-механічних структур, зонних характеристик, рівнів дефектів і поверхневих рівнів кристалів і КС. Розроблені моделі дають підказки при конструюванні квантово-механічних структур з необхідними характеристиками. Завдяки простоті і наочності вони мають широкі можливості при проектуванні наноелектронних пристроїв обробки сигналів, а також у навчальному процесі.

Подальші дослідження в цьому напрямі пов'язані з аналізом більш складних структур за допомогою апарату неоднорідних ліній передачі.

1. *P. Markos and C.M. Soukoulis,* Wave Propagation From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials. Princeton & Oxford: Princeton University Press, 2008, 352 p.
2. *Голант Е.И., Пашковский А.Б.* Двухуровневые волновые функции электронов в двухбарьерных квантово-размерных структурах в электрическом поле конечной амплитуды // ФТП. – 2000. – **34**, вып. 3. – С. 334–339.
3. *Нелин Е.А.* Импедансная модель для "барьерных" задач квантовой механики // УФН. – 2007. – **177**. – № 3. – С. 307–313.
4. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. – М.: Наука, 1981. – 658 с.
5. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Т. 1. – М.: Мир, 1974. – 342 с.
6. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. Ч. 1. – М.: Едиториал УРСС, 2001. – 304 с.

Рекомендована Радою
радіотехнічного факультету
НТУУ "КПІ"

Надійшла до редакції
15 квітня 2013 року