

УДК 530.145.6:621.37

ПОРІВНЯННЯ ТРАДИЦІЙНОГО ТА ІМПЕДАНСНОГО МЕТОДІВ МОДЕЛЮВАННЯ КВАНТОВО-РОЗМІРНИХ СТРУКТУР

*Нелін Є. А., д.т.н., професор; Водозазька М. В., аспірантка
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут», м. Київ, Україна*

COMPARISON OF TRADITIONAL AND IMPEDANCE METHODS FOR QUANTUM-SIZED STRUCTURES SIMULATION

*Nelin E. A., Doctor of Engineering, Professor; Vodolazka M. V., Postgraduate Student
National Technical University of Ukraine «Kyiv Polytechnic Institute», Kyiv, Ukraine*

Вступ

Фізико-технічні принципи наноелектроніки базуються на керуванні тунелюванням і надбар'єрним проходженням електронних хвиль в штучних квантово-розмірних бар'єрних структурах. Традиційний метод моделювання таких структур полягає у зшиванні рішень на межах різнорідних областей структури з умов неперервності хвильової функції та її похідної [1]. При такому підході, що став стандартним, необхідні громіздкі алгебраїчні перетворення, які для структур з багатьма межами виконують матричним методом.

У роботі [2] розвинуто імпедансну модель квантово-механічних структур. У цій моделі, яка базується на використанні апарату теорії ліній передачі, граничні умови враховано автоматично.

Метою статті є порівняння традиційного та імпедансного методів моделювання квантово-розмірних структур на прикладі несиметричного потенціального бар'єра, аналіз особливостей тунелювання та встановлення умов узгодженого надбар'єрного проходження для такого бар'єра.

Особливості тунелювання хвиль

Останнім часом ефект тунелювання хвиль привертає особливу увагу перспективами використання для різних застосувань [3]. В нанодіапазоні цей ефект є базовим. На перший погляд незвичний, ефект тунелювання — фундаментальний для хвиль будь-якої природи. Рис. 1. ілюструє особливості тунелювання квантово-механічних хвиль крізь несиметричний потенціальний бар'єр.

У загальному випадку в дисперсійному (прозорому) хвильовому середовищі можуть поширюватися синусоїдні хвилі; у реактивному хвильовому середовищі хвилі можуть бути лише експоненційними [4].

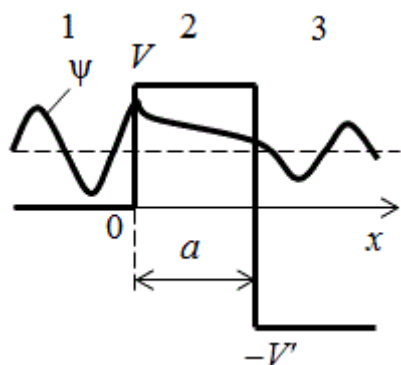


Рис. 1. Тунелювання квантово-механічних хвиль крізь несиметричний потенціальний бар'єр: 1 і 3 — області зовнішнього середовища, 2 — область бар'єра, ψ — хвильова функція, a — товщина бар'єра, V і V' — потенціальна енергія в областях 2 і 3.

Тунелюванню хвиль відповідає їх проходження крізь реактивне середовище скінченної товщини (рис. 1). При $E < V$, де E — енергія електрону, область 2 — реактивне середовище. Хвиля, що падає на ліву межу середовища 2 з дисперсійного середовища 1 — синусоїдна. У межах середовища 2 хвиля експоненційна. Права межа середовища 2 випромінює синусоїдну хвилю в дисперсійне середовище 3.

В режимі тунелювання хвиль коефіцієнт проходження набагато менший у порівнянні зі звичайним синусоїдним проходженням. При створенні спеціальних умов [2] в структурах відбувається резонансне тунелювання з коефіцієнтом проходження $|T| = 1$. Використання режимів звичайного і резонансного тунелювання забезпечує максимальну розв'язку сигналів.

Традиційний підхід

Хвильові функції та параметри областей 1–3 будемо позначати відповідними нижніми індексами. На відміну від [5], де розглянуто випадки в залежності від співвідношення між E , V та V' та прийнято, що ефективні маси електрону $m_1 = m_2 = m_3$, розглянемо загальний випадок при $m_1 \neq m_2 \neq m_3$

Хвильові функції мають задовольняти рівнянню Шредінгера. Для частинки масою m , що рухається під дією сили, спричиненою потенціалом $V(x, t)$, рівняння Шредінгера має вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t},$$

де $\hbar = h / 2\pi$, h — постійна Планка. Оскільки у даному випадку потенціал V не залежить від часу, то рішення рівняння Шредінгера можна представити у вигляді: $\psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Функція $\psi(x)$ задовольняє стаціонарному рівнянню Шредінгера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \tag{1}$$

де $k = \sqrt{2m(E - V)} / \hbar$ — хвильове число. Граничні умови полягають у неперервності функції ψ та її першої похідної, поділеної на ефективну масу електрону, $d\psi/m dx$ на межах між областями 1–3.

Очевидну часову залежність хвильової функції опустимо. Виходячи з (1) для хвильових функцій маємо:

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, \quad \psi_2 = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, \quad \psi_3 = Ge^{ik_3x}, \quad (2)$$

де A, B, C, D і G — множники, що визначаються граничними умовами при $x=0$ і $x=a$; $k_1 = \sqrt{2m_1E} / \hbar$; $k_2 = \sqrt{2m_2(E-V)} / \hbar$; $k_3 = \sqrt{2m_3(E+V')} / \hbar$.

Вирази для ψ_1 і ψ_2 включають пряму (падаючу) і зворотню (відбиту) хвилю; вираз для ψ_3 — лише пряму. Відбита хвиля узгоджує хвильові неоднорідності на межі між різнорідними областями. При $E < V$ значення k_2 уявне, що відповідає тунельному бар'єру.

Знайдемо коефіцієнт відбиття від бар'єра:

$$R = \frac{B}{A}. \quad (3)$$

Визначимо A і B . Граничні умови при $x=0$ мають вигляд:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0}. \quad (4)$$

Підставимо в (4) вирази для ψ_1 і ψ_2 з (2). В результаті маємо:

$$A + B = C + D, \quad \frac{ik_1}{m_1}A - \frac{ik_1}{m_1}B = \frac{ik_2}{m_2}C - \frac{ik_2}{m_2}D.$$

Після перетворень отримаємо:

$$A, B = \frac{1}{2} \left[C \left(1 \pm \frac{k_2 m_1}{k_1 m_2} \right) + D \left(1 \mp \frac{k_2 m_1}{k_1 m_2} \right) \right], \quad (5)$$

де верхні знаки відповідають A , нижні — B .

Для знаходження C і D запишемо граничні умови при $x=a$:

$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_3}{dx} \right|_{x=a}. \quad (6)$$

Підставимо в (6) вирази для ψ_2 і ψ_3 з (2). В результаті отримаємо:

$$Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} = Ge^{ik_3a}, \quad \frac{ik_2}{m_2}Ce^{ik_2a} - \frac{ik_2}{m_2}De^{-ik_2a} = \frac{ik_3}{m_3}Ge^{ik_3a}.$$

Після перетворень маємо:

$$C, D = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{k_3 m_2}{k_2 m_3} \right) Ge^{i(k_3 - k_2)a}, \quad (7)$$

де знаки « \pm » відповідають C і D .

Підставимо (7) в (5). В результаті отримаємо:

$$A, B = \frac{1}{4} \left[\left(1 \mp \frac{k_2 m_1}{k_1 m_2} \right) \left(1 - \frac{k_3 m_2}{k_2 m_3} \right) e^{ik_2a} + \left(1 \pm \frac{k_2 m_1}{k_1 m_2} \right) \left(1 + \frac{k_3 m_2}{k_2 m_3} \right) e^{-ik_2a} \right] G^{ik_3a}. \quad (8)$$

Після підстановки (8) в (3) маємо:

$$R = \frac{(1 - k_3 m_1 / k_1 m_3) + (k_2 m_1 / k_1 m_2 - k_3 m_2 / k_2 m_3) \operatorname{th}(ik_2 a)}{(1 + k_3 m_1 / k_1 m_3) - (k_2 m_1 / k_1 m_2 + k_3 m_2 / k_2 m_3) \operatorname{th}(ik_2 a)}. \quad (9)$$

Формула (9) узагальнює частинні вирази, отримані в [5] при $m_1=m_2=m_3$ та різних співвідношення між E , V та V' .

Імпедансний підхід

Рівняння (1) є загальним для хвиль різної природи. З аналогії поширення квантово-механічних хвиль і електромагнітних хвиль в лінії передачі випливає, що хвильова функція аналогічна струму в лінії передачі, а квантово-механічний імпеданс визначається формулою $Z = 2\sqrt{2(E - V)/m}$ [6]. В рамках імпедансного підходу квантово-механічне середовище моделюється лінією передачі з імпедансом Z , середовище скінченної товщини (потенціальний бар'єр або яма) — відрізком лінії передачі з хвильовим імпедансом Z , а квантово-механічна структура, утворена областями з різними імпедансами, — неоднорідною лінією передачі.

Оскільки коефіцієнт відбиття від неоднорідної лінії передачі залежить від відносних, а не від абсолютних значень імпедансу, для спрощення перетворень пронормуємо імпеданси областей 1–3 до імпедансу області 1.

Нормований вхідний імпеданс бар'єра дорівнює:

$$Z_b = Z_2 \frac{Z_3 - Z_2 \operatorname{th}(ik_2 a)}{Z_2 - Z_3 \operatorname{th}(ik_2 a)},$$

де $Z_2 = \sqrt{m_1(E - V)/m_2 E}$; $Z_3 = \sqrt{m_1(E + V')/m_3 E}$. При $E < V$ значення Z_2 уявне.

Коефіцієнт відбиття від бар'єра визначається формулою

$$R = \frac{1 - Z_b}{1 + Z_b} = \frac{1 - Z_3 + (Z_2 - Z_3 / Z_2) \operatorname{th}(ik_2 a)}{1 + Z_3 - (Z_2 + Z_3 / Z_2) \operatorname{th}(ik_2 a)}. \quad (10)$$

Оскільки $Z_2 = k_2 m_1 / k_1 m_2$ і $Z_3 = k_3 m_1 / k_1 m_3$, вираз (10) співпадає з (9). Як бачимо, імпедансний підхід дозволяє суттєво спростити вирішення.

Режим тунелювання

При тунелюванні

$$R = \frac{1 - Z_3 - i(|Z_2| + Z_3 / |Z_2|) \operatorname{th} \chi a}{1 + Z_3 + i(|Z_2| - Z_3 / |Z_2|) \operatorname{th} \chi a},$$

де $\chi = |k_2|$. У випадку $m_1=m_2=m_3$ з урахуванням того, що $\operatorname{ch}^2 = \operatorname{sh}^2 x + 1$, маємо

$$|R|^2 = \frac{V(V + V') \operatorname{sh}^2(\chi a) + (V - E)(2E + V' - 2\sqrt{E(E + V')})}{V(V + V') \operatorname{sh}^2(\chi a) + (V - E)(2E + V' + 2\sqrt{E(E + V')})}.$$

Виходячи із співвідношення $|R|^2 + |T|^2 = 1$, отримаємо

$$|T|^2 = \frac{4(V-E)\sqrt{E(E+V')}}{V(V+V')\text{sh}^2(\chi a) + (V-E)(2E+V'+2\sqrt{E(E+V')})}. \quad (11)$$

В режимі тунелювання виконуються умови

$$1) |T|^2 \ll 1, \quad 2) \chi a \gg 1 \text{ (при } E \neq V). \quad (12)$$

Оскільки у виразі (11) чисельник і другий доданок у знаменнику одного порядку, то з умови 1 впливає, що перший доданок у знаменнику набагато більший другого. При $x \gg 1$ $\text{sh}^2 x \approx \exp^2 x / 4$ (похибка зменшується зі збільшенням x і вже при $x=2$ менша 4%). Таким чином,

$$|T|^2 \approx \frac{16(V-E)\sqrt{E(E+V')} \exp^2(-\chi a)}{V(V+V')}. \quad (13)$$

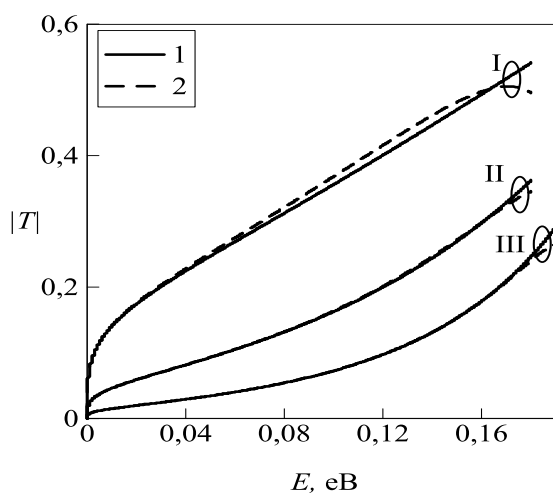


Рис. 2. Залежності коефіцієнта проходження в режимі тунелювання: $V=V'=0,2$ еВ, $m=m_0$, де m_0 — маса електрону; $a=1, 1,5$ і 2 нм (відповідно I, II і III).

Звернемо увагу, що наближення (13) прийнятне в більш широких діапазонах значень, ніж ті, що відповідають умовам (12). Так, при $E=0,18$ еВ у випадку I перша з умов (12) не виконується ($|T|^2=0,29$), а для всіх випадків не виконується друга умова (значення χa дорівнює відповідно 0,73, 1,1 і 1,4).

Узгоджене надбар'єрне проходження

Безвідбивне (зазвичай резонансне) надбар'єрне проходження з коефіцієнтом проходження $|T|=1$ — важливий ефект, що використовується в наноелектронних пристроях. Надбар'єрне проходження відповідає умові $E > V$. У цьому випадку Z_2 і k_2 дійсні і

$$R = \frac{1 - Z_3 + i(Z_2 - Z_3 / Z_2) \text{tg} k_2 a}{1 + Z_3 - i(Z_2 + Z_3 / Z_2) \text{tg} k_2 a}.$$

При безвідбивному надбар'єрному проходженні $R=0$. Виконання цієї умови неможливе при $m_1 = m_2 = m_3$. Умова виконується у таких випадках:

Якщо $V'=0$, маємо відому формулу для симетричного бар'єра.

На рис. 2 приведено залежності згідно (11) і (13) — відповідно 1 і 2. Для випадків I, II і III максимальна відносна похибка наближеної формули (при $E=0,18$ еВ) складає відповідно 8; 5 і 2%. Для випадку III при $E=0,19$ еВ похибка дорівнює 9%. Звернемо увагу, що наближення (13) прийнятне в більш широких діапазонах значень, ніж ті, що відповідають умовам (12). Так, при $E=0,18$ еВ у випадку I перша з умов (12) не виконується ($|T|^2=0,29$), а для всіх випадків не виконується друга умова (значення χa дорівнює відповідно 0,73, 1,1 і 1,4).

$$1) Z_3 = 1, \operatorname{tg} k_2 a = 0 \text{ (чому відповідає } k_2 a = \pi n, n = 1, 2, \dots); 2) Z_2 = Z_3 = 1. \quad (14)$$

У випадку 1 (при $Z_2 \neq 1$) узгодженість областей 1–3 обумовлена резонансом у резонаторі, сформованому бар'єром та його межами [2], у випадку 2 — однаковими імпедансами областей 1–3. Відповідно у випадку 1 узгодження і безвідбивне проходження резонансні, у випадку 2 — нерезонансні. При заданому рівні енергії E_s умови (14) виконуються при таких співвідношеннях між m_1, m_2 і m_3 :

$$1) m_2 = \frac{h^2 n^2}{8a^2(E_s - V)}, m_3 = m_1 \frac{E_s + V'}{E_s}; \quad 2) m_2 = m_1 \frac{E_s - V}{E_s}, m_3 = m_1 \frac{E_s + V'}{E_s}.$$

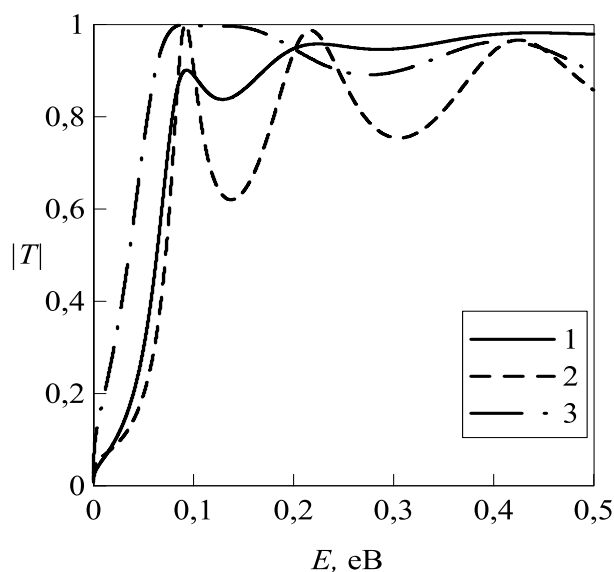


Рис. 3. Залежності коефіцієнта проходження для несиметричного бар'єра: 1 — без узгодження; 2 — з резонансним узгодженням, 3 — з нерезонансним узгодженням. Параметри: $V=0,05$ еВ; $V'=0,5$ еВ; $a=3$ нм; $E_s=0,09$ еВ; 1 — $m_1=m_2=m_3=m_0$; 2 — $m_1=0,15m_0, m_2=1,04m_0, m_3=m_0$; 3 — $m_1=m_0, m_2=0,44m_0, m_3=6,6m_0$.

На рис. 3 приведено залежності коефіцієнта проходження для несиметричного бар'єра, які ілюструють неузгоджене і узгоджене надбар'єрне проходження. Як бачимо, резонансне узгодження має вузькосмуговий характер, нерезонансне — широкосмуговий.

Висновки

Імпедансний метод дозволяє суттєво спростити моделювання квантово-механічних структур у порівнянні з традиційним методом вирішення квантово-механічних задач. В рамках імпедансного підходу моделювання квантово-механічних структур зводиться до побудови та аналізу еквівалентної неоднорідної лінії передачі. При використанні поняття квантово-механічного імпедансу стає можливим скористатися аналогіями з теорії ліній передачі. Так, ключові для наноелектронних пристроїв ефекти резонансного тунелювання та резонансного надбар'єрного проходження відповідають умові узгодження імпедансів. З цієї умови можна отримати необхідні аналітичні вирази для параметрів елементів.

Отримані в роботі співвідношення для несиметричного бар'єра необхідні при проектуванні наноелектронних структур з заданими параметрами і характеристиками.

Перелік посилань

1. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. (Нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц — М. : Физматлит. — 2002. — 808 с.
2. Нелин Е. А. Импедансная модель для “барьерных” задач квантовой механики / Е. А. Нелин // [Успехи физических наук](#). — 2007. — Т. 177, №3. — С. 307—313.
3. Шварцбург А. Б. Туннелирование электромагнитных волн – парадоксы и перспективы / А. Б. Шварцбург // [Успехи физических наук](#). — 2007. — Т. 177, № 1. — С. 43—58.
4. Крауфорд Ф. Волны / Ф. Крауфорд. — М. : Наука, 1976. — 526 с.
5. Fromhold A. T. Quantum Mechanics / A. T. Fromhold // *Encyclopedia of Physical Science and Technology*. — 2001. — Vol. 13. — P. 359—408.
6. Khondker A. N. Transmission line analogy of resonance tunneling phenomena: The generalized impedance concept / A. N. Khondker, M. R. Khan, A. F. M. Anwar // [J. Appl. Phys.](#) — 1988. — Vol. 63, No 10. — P. 5191—5193.

References

1. Landau L. D. and Lyfshyts E. M. (2002) *Teoretycheskaia fizyka. T. 3. Kvantovaia mekhanyka. (Nereliatyvystskaia teoriya)* [Theoretical Physics. Vol. 3. Quantum mechanics. (Non-relativistic theory)]. Moscow, Fyzmatlyt Publ., 808 p.
2. Nelin E.A. (2007) Impedance model for quantum-mechanical barrier problems. [Phys. Usp.](#), vol. 50, no. 3, pp. 293–299.
3. Shvartsburg A.B. (2007) Tunneling of electromagnetic waves: paradoxes and prospects. [Phys. Usp.](#), vol. 50, no. 1, pp. 37–51.
4. Krauford F. (1976) *Volny* [Waves]. Moscow, Nauka Publ., 526 p.
5. Fromhold A. T., Jr. (2001) *Quantum Mechanics. Encyclopedia of Physical Science and Technology*, vol. 13, pp. 359–408.
6. Khondker A. N., Khan M. R. and Anwar A. F. M. (1988) Transmission line analogy of resonance tunneling phenomena: The generalized impedance concept. [J. Appl. Phys.](#), vol. 63, no 10, pp. 5191–5193.

Нелин Є. А., Водозаська М. В. Порівняння традиційного та імпедансного методів моделювання квантово-розмірних структур. Проведено порівняльний аналіз традиційного та імпедансного підходів при моделюванні несиметричного потенціального квантово-механічного бар'єра. Звернуто увагу на особливість ефекта тунелювання хвиль. Отримано аналітичні вирази для коефіцієнта відбиття від несиметричного бар'єра традиційним і імпедансним методами. Продемонстровано ідентичність виразів. Отримано формули для коефіцієнта проходження в режимі тунелювання та умови безвідбивного резонансного та нерезонансного надбар'єрного проходження. Приведено характеристики коефіцієнтів проходження в режимі тунелювання та надбар'єрного проходження.

Ключові слова: несиметричний потенціальний бар'єр, квантово-механічний імпеданс, тунелювання, узгоджене надбар'єрне проходження.

Нелин Е. А., Водозаская М. В. Сравнение традиционного и импедансного методов моделирования квантово-размерных структур. Проведен сравнительный анализ традиционного и импедансного подходов при моделировании несимметричного потенциального квантово-механического барьера. Обращено внимание на особенность эффекта туннелирования волн. Получены аналитические выражения для коэффициента отражения от

несимметричного бар'єра традиційним і імпедансним методами. Продемонстровано ідентичність виражень. Отримані формули для коефіцієнта проходження в режимі тунелювання і умовия безотражательного резонансного і нерезонансного надбар'єрного проходження. Приведені характеристики коефіцієнтів проходження в режимі тунелювання і надбар'єрного проходження.

Ключевые слова: несимметричный потенциальный барьер, квантово-механический импеданс, туннелирование, согласованное надбарьерное прохождение.

Nelin E. A., Vodolazka M. V. Comparison of traditional and impedance methods for quantum-sized structures simulation.

Introduction. Comparative analysis of traditional and impedance approaches in modeling asymmetric potential quantum-mechanical barrier is fulfilled.

Features of waves tunneling. The effect of waves tunneling is considered. The features of quantum-mechanical wave tunneling through asymmetric potential barrier are illustrated.

Traditional approach. Quantum-mechanical wave transmission through asymmetric potential barrier on the basis of quantum-mechanical approach is explored. The expression for reflection coefficient is obtained.

Impedance approach. The expression of the reflection coefficient using the impedance method, which is based on the concept of quantum-mechanical impedance and the theory of transmission lines is obtained. The identity of expressions received by two approaches is demonstrated.

Tunneling regime. The expressions for transmission coefficient for tunneling regime in exact and approximate forms are obtained. Applicability of the approximate formula is presented.

Matched overbarrier transmission. The conditions of reflectionless resonant and nonresonant overbarrier transmission are obtained. Dependences of transmission coefficient for asymmetric barrier that illustrate unmatched and matched overbarrier transmission are presented.

Conclusions. Impedance method significantly simplifies modeling of quantum-mechanical structures in comparison with the traditional method of solving quantum-mechanical problems.

Keywords: asymmetric potential barrier, quantum-mechanical impedance, tunneling, matched overbarrier transmission..