— НАНОЭЛЕКТРОНИКА —

УДК 530.145.84

ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО ТОКА ПРИ ПОДБАРЬЕРНОМ ОТРАЖЕНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ВОЛНЫ ОТ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ СТУПЕНЬКИ В 2D-НАНОСТРУКТУРЕ

© 2021 г. В. А. Петров^{а, *}, А. В. Никитин^а

^а Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Моховая ул., 7, корп. 11, Москва, 125009 Российская Федерация *E-mail: vicanpet@mail.ru Поступила в редакцию 25.05.2020 г. После доработки 25.05.2020 г. Принята к публикации 05.06.2020 г.

Теоретически исследовано влияние интерференции электронных волн при их отражении от прямоугольного полубесконечного потенциального барьера на пространственное распределение плотности квантово-механического тока $ej_x(x, z)$ (e – заряд электрона, $j_x(x, z)$ – плотность потока вероятности) в полупроводниковой 2D-наноструктуре. Структура представляет собой последовательно расположенные в направлении распространения электронной волны узкую и широкую прямоугольные квантовые ямы (КЯ). Предполагается, что волна падает из узкой КЯ₁ на потенциальный барьер высоты V_0 в широкой КЯ₂. Показано, что при падении на барьер волны с энергией, меньше V_0 , при определенных условиях в КЯ₁ существует осциллирующее сложным образом пространственно-неоднородное распределение $ej_x^{(1)}(x, z)$. При этом в КЯ₂ возможно экспоненциально затухающее и имеющее координатную зависимость просачивание $ej_x^{(2)}(x, z)$ под барьер. Показано, что такое поведение $ej_x^{(1)}(x, z)$ и $ej_x^{(2)}(x, z)$ обусловлено интерференцией электронных волн, распространяющихся по разным квантово-размерным подзонам в рассматриваемой наноструктуре.

DOI: 10.31857/S0033849421020121

введение

В настоящее время успехи нанотехнологии позволяют создавать полупроводниковые наноструктуры, в которых линейные размеры 1D- или 2D-проводящего канала в направлении распространения электронной волны меньше длины свободного пробега электрона. В таком канале частицы движутся в баллистическом режиме, что позволяет экспериментально исследовать в данных структурах эффекты баллистического переноса, в частности, различные электронные интерференционные эффекты. Теоретические основы этих эффектов, а также анализ основных экспериментальных результатов в этой области, приведены в ряде монографий [1-3]. Существует большое число теоретических работ, посвященных исследованию баллистического переноса электронов в 1D- и 2D-наноструктурах, общей особенностью которых является наличие в квантовых каналах участков резкого (неадиабатического) изменения либо геометрии канала, либо потенциального рельефа в нем. Например, квантовый транспорт был теоретически исследован в 1D-каналах прямоугольного [4] и параболического [5] профилей, соединяющих два 2D-электронных резервуара, а также в квантовых точечных контактах различного типа, соединяющих такие резервуары [6], Т-образных каналах [7, 8], каналах с резкими изломами и каналах изогнутой формы [9–11], каналах с б-образным рассеивающим центром внутри [12], скрещенных каналах [13], одиночных геометрически неоднородных каналах с участками разной ширины [14-17], геометрически однородных 1D- и 2D-наноструктурах с участками резкого изменения потенциального рельефа, управляемого поперечным постоянным электрическим полем [18]. Роль затухающих мод в квантовых точечных контактах была рассмотрена в [12, 19, 20]. Во всех этих работах принципиальным моментом является рассеяние электронных волн на какой-либо неоднородности наноструктуры, что, в свою очередь, приводит к рассеянию электронной волны по всем квантово-

размерным подзонам структуры и, как следствие, к возникновению электронных интерференционных эффектов. Во всех этих работах (а также в ряде других аналогичных по тематике) конечной целью являлось вычисление либо квантовомеханического коэффициента прохождения структуры, либо ее конлактанса. Так как при нахожлении этих величин необходимо вычислить полный ток частиц в квантовом канале, что достигается интегрированием зависящей от координат плотности квантовомеханического тока по поперечному сечению канала, то пространственно-неоднородные эффекты для плотности квантовомеханического тока в таких работах не рассматривались. Возможность существования пространственнонеоднородных эффектов для плотности потока вероятности $j_{x}(x, z)$ в полупроводниковой 2D-наноструктуре кратко обсуждалась ранее [21]. В дальнейшем мы более детально исследовали теоретически такие пространственно-неоднородные эффекты в полупроводниковых 1D- и 2D-наноструктурах различного типа. Мы показали, что в 1D- [22] и 2D-наноструктурах [23, 24], представляющих собой последовательно расположенные в направлении распространения электронной волны узкую и широкую по оси *z* квантовые ямы (КЯ), возможны эффекты пространственного повторения и мультипликации для $j_x(x, z)$ (или квантовомеханической плотности тока $e_{j_x}(x, z)$). Было показано, что для КЯ прямоугольного сечения (ось *z* – ось размерного квантования) поперечное распределение $j_x(0, z)$, существующее на входе широкой КЯ, с определенной точностью воспроизводится на расстоянии X₁ от входа (повторяемость) и расщепляется внутри каждого повторяющегося отрезка длины X₁ в симметричной по оси z наноструктуре на q идентичных пиков в qраз меньшей интенсивности на расстоянии X_1/q (мультипликация). При этом исходное распределение $j_x(0, z)$ периодически воспроизводится в сечениях $X_p = pX_1$ (*q* и *p* – целые числа). Эти эффекты в широкой КЯ возникают из-за интерференции электронных волн, распространяющихся в ней одновременно по разным квантоворазмерным подзонам. В наноструктурах, состоящих из последовательно расположенных узкой прямоугольной КЯ и широкой КЯ параболического профиля в 1D- [25] и 2D-наноструктурах [26] эффекты повторяемости также присутствуют, но эффекты мультипликации выражены гораздо слабее по сравнению с широкой прямоугольной КЯ. Мы также исследовали влияние постоянного поперечного электрического поля в области широкой КЯ на эффекты повторяемости и мультипликации в таких наноструктурах и показали, что электрическое поле позволяет кардинально менять пространственное распределение $i_x(x, z)$ [27 - 31].



Рис. 1. Схематичный вид потенциального рельефа симметричной 2D-наноструктуры на основе последовательности двух прямоугольных квантовых ям: узкой (КЯ₁) и широкой (КЯ₂), ширина которых соответственно *a* и *A*. В области КЯ₂ при $x \ge 0$ существует полубесконечный прямоупольный потенциальный барьер высотой V_0 ; $E_c^{(1)}$ и $E_c^{(2)}$ – энергетические положения доньев зон проводимости в КЯ₁ и КЯ₂ соответственно.

Основная цель данной работы — всестороннее теоретическое исследование влияния интерференции электронных волн на их отражение от прямоугольного полубесконечного потенциального барьера в полупроводниковой 2D-наноструктуре в случае, когда энергия падающей волны меньше высоты барьера. Полученные в этой работе результаты были частично и очень кратко изложены ранее в [32].

1. МОДЕЛЬ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ-НЕОДНОРОДНОЙ 2D-НАНОСТРУКТУРЫ

Структура состоит из последовательно расположенных в направлении распространения электронной волны прямоугольных узкой ($x < 0, K \mathbf{S}_1$) и широкой (x > 0, KЯ₂) квантовых ям. Потенциальный барьер высоты V₀ находится в широкой $KЯ_2$ при x > 0 (рис. 1). Как известно [32], в обычной ситуации, когда в трехмерном случае электронная волна с энергией $E < V_0$ падает на барьер по оси x, а движение по осям у и z свободно, квантовомеханические плотности тока $ej_x^{(1)}(x, y, z)$ при x < 0 и $ej_x^{(2)}(x, y, z)$ под барьером при x > 0 равны нулю. Плотность вероятности нахождения частицы под барьером при этом отлична от нуля и экспоненциально спадает при $x \to \infty$, а равенство нулю тока следует из действительности волновой функции частицы под барьером. Мы покажем, что в геометрически-неоднородных наноструктурах, в которых существуют квантово-размерные подзоны (КРП), ситуация кардинально меняется. Интерференция электронных волн, распространяющихся по этим подзонам, при определенных условиях может приводить к возникновению в таких наноструктурах пространственно-неоднородного распределения квантовомеханического тока.

В данной работе дано полное теоретическое описание эффекта отражения электронной волны от прямоугольного полубесконечного потенциального барьера в 2D-наноструктуре. Представлены результаты аналитического расчета для двух ситуаций. В первой ситуации предполагалось, что в КЯ₁ паление и отражение волны с лействительным квазиимпульсом происходит только по одной (нижней) КРП. Во всех вышележащих КРП в КЯ₁, а также во всех подзонах в КЯ₂ квазиимпульсы мнимые. Вторая ситуация отличалась от первой только возможностью незатухающего отражения волны в КЯ1 от барьера по второй подзоне с действительными квазиимпульсами. Мы показали, что в ситуации 1, когда электронная волна падает по первой (нижней) КРП в К \mathbf{R}_1 и ее продольная энергия E_x меньше энергетического положения дна второй подзоны в КЯ₁ (т.е. незатухающее распространение отраженной от барьера волны возможно только по этой же нижней подзоне в КЯ₁) квантовомеха-

нические плотности тока $ej_x^{(1)}(x, z)$ при x < 0 в КЯ₁

и $ej_x^{(2)}(x,z)$ под барьером в КЯ₂ при x > 0 равны нулю. Однако в ситуации 2, когда энергия частицы, распространяющейся по нижней подзоне в КЯ₁, больше энергетического положения дна второй подзоны, из-за интерференции отраженных волн картина кардинально меняется. Возможность отражения волны при $x \to -\infty$ по второй подзоне приводит к возникновению в КЯ₁ осциллирующего сложным образом пространственно-неоднородного распределения $ej_x^{(1)}(x, z)$, а под барьером в КЯ₂ экспоненциально затухающего при $x \to \infty$ и имеющего координатную зависимость $ej_x^{(2)}(x, z)$. Далее, мы приводим результаты численного расчета $ej_x^{(1)}(x, z)$ и $ej_x^{(2)}(x, z)$ для симметричной по оси z структуры (рис. 1) конкретными параметрами, полностью подтверждающие результаты аналитического рассмотрения.

2. ОБЩАЯ СХЕМА РАСЧЕТА ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ПОТОКА ВЕРОЯТНОСТИ *j*_x(*x*, *z*)

Рассмотрим 2D-наноструктуру, состоящую из двух последовательно расположенных вдоль оси x квантовых ям: КЯ₁ с потенциалом $U_1(z)$ (x < 0) и КЯ₂ с потенциалом $U_2(z)$ (x > 0), локализующими частицу по оси z (нормаль к плоскостям ям). Бу-

дем также считать, что движение по оси *у* отделяется и является свободным, а потенциальная энергия частицы в пределах каждой из областей не зависит от *x*, меняясь скачком в точке сочленения ям (x = 0). Эффективные массы частиц *m** будем считать изотропными и одинаковыми в обеих областях. Тогда уравнения Шредингера, описывающие движения частицы по оси *z* в каждой из областей, имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\chi_j(z)}{dz^2} + U_1(z)\chi_j(z) = E_j\chi_j(z).$$
(1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\varphi_n(z)}{dz^2} + U_2(z)\varphi_n(z) = E_n\varphi_n(z).$$
(2)

Здесь E_i и E_n – собственные значения, а $\chi_i(z)$ и $\phi_n(z)$ – собственные функции уравнений (1) и (2) соответственно в КЯ1 и КЯ2. Полная энергия частицы $E = E_{x,z} + E_y$, где $E_y = \hbar^2 k_y^2 / 2m^*$ — энергия, соответствующая свободному движению по оси у. Рассмотрим ситуацию, когда слева направо, из КЯ₁ по квантовой подзоне *m* в КЯ₂ распространяется монохроматическая электронная волна единичной амплитуды с действительным квазиимпульсом k_m . Будем считать, что квантовые ямы, локализующие частицу по оси z, имеют бесконечно высокие потенциальные барьеры, т.е. спектры энергий в обеих ямах в этом направлении полностью дискретны. В такой 2D-наноструктуре с произвольными $U_1(z)$ и $U_2(z)$ нас будет интересовать ситуация, когда энергия падающего электрона в КЯ1 удовлетворяет условию $E_x < \Delta U = U_2(z) - U_1(z)$, причем U₂(z) включает и дополнительный встроенный потенциал V_0 . В этом случае в K \mathbf{S}_1 существует конечное число М нижних подзон с действительными k, a все лежащие выше подзоны имеют мнимые волновые векторы. Тогда волновые функции частицы $\mu^{(1)}(x, z)$ и $\mu^{(2)}(x, z)$ в каждой из областей по отдельности имеют вид

$$\mu^{(1)}(x,z) = \chi_m(z) \exp(ik_m x) + \sum_i B_j \chi_j(z) \exp(-ik_j x),$$
(3)

$$\mu^{(2)}(x,z) = \sum_{n} C_{n} j_{n}(z) \exp(ik_{n} x).$$
(4)

Здесь B_j и C_n – постоянные коэффициенты, определяющие соответственно амплитуды волн, отраженных в КЯ₁ по подзонам E_j и прошедших в КЯ₂ по подзонам E_n ; $k_{j,m}$ и k'_n – волновые числа, соответствующие движению частицы по оси *x* в этих областях:

$$k_{j} = \left[2m^{*}(E - E_{j,m} - E_{y})\right]^{1/2} / \hbar;$$

$$k_{n}' = \left[2m^{*}(E - E_{n} - E_{y})\right]^{1/2} / \hbar.$$

Отражение и трансформация электронных волн в такой структуре происходят из-за скачкообразного изменения потенциала $\Delta U = U_2(z) - U_1(z)$ в точке x = 0. Отметим, что если $E - E_y > E_j$, E_n , то k_j и k'_n действительны и соответствующие им волны являются распространяющимися; при обратном неравенстве $-k_j$ и k'_n мнимые и волны являются затухающими, с характерными длинами затухания $l_j = |k_j|^{-1}$ и $l_n = |k'_n|^{-1}$. Для рассматриваемых нами структур со ступенчатым переходом между КЯ₁ и КЯ₂ коэффициенты B_j и C_n определяются из системы уравнений, которая вытекает из граничных условий для волновых функций и их производных в точке x = 0:

$$\mu^{(1)}(x = 0, z) = \mu^{(2)}(x = 0, z);$$

$$\nabla_{x}\mu^{(1)}(x = 0, z) = \nabla_{x}\mu^{(2)}(x = 0, z);$$

$$\gamma_{x}(z) + \sum B\gamma_{x}(z) = \sum C \omega_{x}(z).$$

(5)

$$\chi_m(z) + \sum_j B_j \chi_j(z) = \sum_n C_n \varphi_n(z),$$

$$\kappa_m \chi_m(z) - \sum_j k_j B_j \chi_j(z) = \sum_n k'_n C_n \varphi_n(z).$$
(6)

Умножая слева уравнение (5) на $\phi_p^*(z)$, а (6) на $\chi_p^*(z)$ (звездочка (*) — знак комплексного сопряжения) и интегрируя полученные выражения по *z*, получим систему линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов *B_i* и *C_n*:

$$t_{p,m} + \sum_{j} B_{j} t_{p,j} = C_{p},$$
 (7a)

$$k_m \delta_{pm} - k_p B_p = \sum_n k'_n C_n f_{p,n}.$$
 (76)

Здесь $t_{p,m} = \int \phi_p^*(z) \chi_m(z) dz$ и $f_{p,n} = \int \chi_p^*(z) \phi_n(z) dz$ – коэффициенты неортогональности собственных

функций в КЯ₁ и КЯ₂. Отметим, что $f_{pm} = t_{mp}^*$, а если собственные функции, как в нашем случае, вещественны, то $f_{pm} = t_{mp}$. Перепишем (7а) и (7б) с учетом этого обстоятельства:

$$\sum_{j} B_{j} f_{j,p} - C_{p} = -f_{m,p},$$
(8a)

$$k_{p}B_{p} + \sum_{n} k_{n}C_{n}f_{p,n} = k_{m}\delta_{p,m}.$$
 (86)

Отметим, что в симметричных по оси *z* структурах, когда локализующие частицу потенциалы $U_1(z)$ и $U_2(z)$ в КЯ₁ и КЯ₂ удовлетворяют условиям $U_1(z) = U_1(-z)$ и $U_2(z) = U_2(-z)$ (точка z = 0 находится на оси симметрии структуры), собственные функции $\chi_i(z)$ и $\varphi_n(z)$ в КЯ₁ и КЯ₂ можно классифицировать по четности. В этом случае коэффициенты неортогональности равны нулю для функций разной четности.

Расширенная матрица системы (8а), (8б) при учете N уровней, имеющая порядок 2 N(j, p = 1, ..., N; m принимает одно из значений от 1 до N), имеет вид

$$\begin{pmatrix} f_{1,1} & f_{2,1} & \cdots & -1 & 0 & \cdots \\ f_{1,2} & f_{2,2} & \cdots & 0 & -1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_1 & 0 & \cdots & k_1' f_{1,1} & k_2' f_{1,2} & \cdots \\ 0 & k_2 & \cdots & k_1' f_{2,1} & k_2' f_{2,2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}.$$
(9)

Решение системы (8а), (8б) для N учтенных уровней, как известно, имеет вид

$$B_j = \frac{D_j}{D}, \quad C_j = \frac{D_{N+j}}{D}.$$
 (10)

Здесь D — определитель матрицы (9), а D_j — определители, получающиеся из D после замены в нем j-столбца столбцом из свободных членов системы (8a), (8б).

В дальнейшем нас будут интересовать координатные зависимости $j_x^{(1)}(x, z)$ и $j_x^{(2)}(x, z)$ – плотности потока вероятности вдоль оси *x* соответственно в КЯ₁ и КЯ₂ (или $ej_x^{(1)}(x, z)$ и $ej_x^{(2)}(x, z)$ – компоненты плотности квантовомеханического тока вдоль оси *x*). Плотность потока вероятности [33] имеет вид

$$j_x(x, z) = \frac{i\hbar}{2m^*} \times$$

$$\times \left[\mu(x, z) \nabla_x \mu^*(x, z) - \mu^*(x, z) \nabla_x \mu(x, z) \right].$$
(11)

Подставляя волновые функции частицы (3)-(4) в (11), получим

$$j_{x}^{(1)}(x,z) = \frac{\hbar}{2m^{*}} \left[2 \left(k_{m} \chi_{m}^{2} - \sum_{i=j=1}^{M} k_{i} \chi_{i}^{2} |B_{i}|^{2} \right) - \sum_{i \neq j} B_{j} B_{i}^{*} \chi_{i} \chi_{j} (k_{j} + k_{i}^{*}) \exp(i(k_{i}^{*} - k_{j})x) + \chi_{m} \exp(-ik_{m}x) \sum_{j \neq m} \chi_{j} B_{j} (k_{m} - k_{j}) \exp(-ik_{j}x) \right] +$$

$$+ \chi_{m} \exp(ik_{m}x) \sum_{i \neq m} B_{i}^{*} \chi_{i} (k_{m} - k_{i}^{*}) \exp(ik_{i}^{*}x).$$

$$(12)$$

В (12) мы оставили только члены, отличные от нуля и выделили в отдельную сумму члены с i = j, где эти индексы пробегают значения от 1 до M по всем подзонам с действительными квазиимпульсами. При этом очевидно, что члены с чисто мнимыми квазиимпульсами при i = j равны нулю. Также равны нулю члены в последних двух суммах при i = m и j = m. Таким образом, во второй сумме остаются только перекрестные члены. Выражение для $j_x^{(2)}(x,z)$, в котором суммирование ведется по индексам, соответствующим только мнимым k'_n , имеет вид

$$j_x^{(2)}(x,z) = \frac{\hbar}{m^*} \left[\sum_{n=1}^N \varphi_n(z) \left(\sum_{t=n+1}^N \varphi_t(z) \exp(-(p'_n + p'_t)x)(p'_n - p'_t)(C_{n1}C_{t2} - C_{t1}C_{n2}) \right) \right].$$
(13)

При записи (12) и (13) мы сменили индексы суммирования *i* для $(u^{(1)}(x, z))^*$ и *n* для $(u^{(2)}(x, z))^*$ на *i* и t соответственно и учли, что в рассматриваемой нами задаче волновые функции $\phi_n(z)$ и $\chi_i(z)$ действительны, что позволяет представить в (13) чисто мнимые k'_n в виде $k'_n = ip'_n$, где $p'_n = \text{Im}(k'_n)$, а комплексные коэффициенты C_n в виде $C_n = C_{n1} + iC_{n2}$, где $C_{n1} = \operatorname{Re}(C_n)$, $C_{n2} = \operatorname{Im}(C_n)$. Здесь $\operatorname{Re}(C_n)$, $\operatorname{Im}(C_n)$ и $\operatorname{Im}(k'_n)$ – реальная часть C_n и мнимые части C_n и k'_n , соответственно. В (13) отсутствуют члены с n = t, которые равны нулю. Если в системе уравнений (8а), (8б) для определения коэффициентов $B_{i,i}$ и $C_{n,t}$ будут присутствовать при расчете подзоны с мнимыми $k_{i,j}$ и $k'_{n,t}$, то коэффициенты B_{i,j} и C_{n,t} будут комплексными. Таким образом, выражения (12), (13) совместно с найденными из решения уравнений (1), (2) собственными функциями $\chi_i(z)$ и $\phi_n(z)$, а также определенными из решения системы (8а), (8б) коэффициентами B_i и C_n дают полное решение задачи о распределении плотностей потоков вероятности $j_x^{(1)}(x,z)$ и $j_x^{(2)}(x,z)$ (или квантовомеханических плотностей токов) в рассматриваемой наноструктуре.

Отметим, что полный поток плотности вероятности вдоль оси *x* в КЯ₁ $J_x^{(1)} = \int j_x^{(1)}(x, z)dz$ (а значит, и полный квантовомеханический ток) вследствие ортонормированности функций { $\chi_i(z)$ }, как следует из (12), не имеет координатной зависимости от *x* и равен

$$J_{x}^{(1)} = \int j_{x}^{(1)}(x,z)dz = \frac{\hbar}{m^{*}} \left[\left(k_{m} - \sum_{i=j=1}^{M} k_{i} \left| B_{i} \right|^{2} \right) \right]. \quad (14)$$

В (14) суммирование проводится по всем подзонам в KS_1 с действительными k_i , по которым происходит незатухающее распространение электронных волн. Отметим, что кондактанс структуры *G* также не зависит от *x*.

Из (13) вследствие ортонормированности функций $\{\phi_n(z)\}$ следует также, что в КЯ₂

$$J_x^{(2)} = \int j_x^{(2)}(x,z) dz = 0.$$

Далее рассмотрим две ситуации.

Ситуация 1. Кинетическая энергия частицы E_x в КЯ₁ находится в интервале $E_1^{(1)} < E_x < E_2^{(1)}$ и меньше величины барьера $V_{3\phi}$ в КЯ₂, т.е. $E_x < V_{3\phi}$ (верхние индексы (1) означают принадлежность подзон к КЯ₁). При этом предполагается, что электронная волна падает по нижней квантоворазмерной подзоне в КЯ₁ (m = 1) и может отражаться от барьера без затухания только по этой же подзоне с действительным квазиимпульсом k_1 , и в режиме затухания по всем остальным лежащим выше подзонам с энергиями $E_i^{(1)} > E_1^{(1)}$ с чисто мнимыми квазиимпульсами. В КЯ₂ существуют только подзоны с чисто мнимыми квазиимпульсами. Покажем теперь, что в ситуации 1 под барьером в КЯ₂ $j_x^{(2)}(x, z) = 0$. Представим в (13) комплексные коэффициенты C_i в виде $C_i = r_i \exp(i\theta_i)$.

$$j_{x}^{(2)}(x,z) = -\frac{\hbar}{m^{*}} \left[\sum_{n=1}^{N} r_{n} \varphi_{n}(z) \left(\sum_{t=n+1}^{N} \varphi_{t}(z) \exp(-(p_{n}^{'} + p_{t}^{'})x)(p_{n}^{'} - p_{t}^{'})r_{t} \sin\left(\theta_{n} - \theta_{t}\right) \right) \right].$$
(15)

Рассмотрим отношение

$$\sigma_{n,t} = \frac{C_n}{C_t} = \frac{r_n \exp(i\theta_n)}{r_t \exp(i\theta_t)} = \frac{r_n}{r_t} \exp(i(\theta_n - \theta_t)) =$$

$$= \frac{r_n}{r_t} (\cos(\theta_n - \theta_t) + i\sin(\theta_n - \theta_t)).$$
(16)

Так как $C_t = D_t/D$, то отношение $C_n/C_t = D_n/D_t$. Вычисляя определители D_n получим

$$D_{N+n} = (-1)^{(N+n)+(N+1)} \times \begin{cases} f_{1,1} & f_{2,1} & \dots & -1 & 0 & \dots \\ f_{1,2} & f_{2,1} & \dots & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \dots \\ f_{1,N} & f_{2,N} & \dots & 0 & 0 & \dots \\ 0 & ip_2 & \dots & ip_1'f_{2,1} & ip_2'f_{2,2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = (-1)^{(N+n)+(N+1)} 2k_1 d_{N+n,N+1}.$$

$$(17)$$

РАДИОТЕХНИКА И ЭЛЕКТРОНИКА том 66 № 2 2021

В (17) мы ввели обозначения $k'_{N+n} = ip'_{N+n}$, где $p'_{N+n} = \text{Im}(k'_{N+n})$. Здесь $d_{N+n,N+1}$ – минор элемента $a_{N+n,N+1}$ в определителе (17), имеющий порядок (N-1). В (17) все нижние (N-1) строки определителя содержат только чисто мнимые квазиим-пульсы. Поэтому из каждой строки можно вынести (i), так что $d_{N+n,N+1} = (i)^{(N-1)}c_n$, где c_n – действительное число, т.е.

$$D_n = (-1)^{(N+n)+(N+1)} (i)^{N-1} 2k_1 c_n.$$
(18)

Так как c_n – действительные числа, то отношение

$$\frac{C_n}{C_t} = \frac{D_n}{D_t} = (-1)^{(n-t)} \frac{c_n}{c_t}$$

также вещественное число. Поэтому, как следует из (16), разность фаз $C_n - C_t = \pi m$, где $m = 0, \pm 1,...$ Так как такие соотношения выполняются для любых пар коэффициентов C_n и C_t в (13) и (15), то в ситуации 1 в КЯ₂ $j_x^{(2)}(x, z) = 0$. Мы вычислили также $j_x^{(1)}(x, z)$ в ситуации 1 по формуле (12), представив коэффициенты $B_{i,j}$ в виде $B_{i,j} = |B_{i,j}| \exp(i\theta_{i,j})$, и показали, что в этой ситуации $j_{i}^{(1)}(x, z) = 0$.

Ситуация 2. В этом случае ситуация кардинально меняется. Кинетическая энергия частицы в КЯ₁ находится в интервале $E_2^{(1)} < E_x < E_3^{(1)}$ и, как и в ситуации 1, меньше величины потенциального барьера $V_{3\phi}$ в КЯ₂. В этом случае незатухающее распространение отраженной от барьера электронной волны возможно как по нижней, так и по второй подзоне в КЯ₁.

Рассмотрим сначала поведение в ситуации 2 плотности потока вероятности $j_x^{(2)}(x, z)$ в КЯ₂. Выражение для $j_x^{(2)}(x, z)$ в этом случае будет иметь такой же вид (13), (15), как и в ситуации 1. Ранее, при рассмотрении ситуации 1 мы, получая выражения (19) для определителей D_{N+n} , на последнем этапе расчета вынесли из миноров $d_{(N+n),(N+1)}$ множители (i)^(N-1), так как квазиимпульс k_2 был чисто мнимым числом. В рассматриваемой сейчас ситуации 2 квазиимпульс k_2 — действительное число. Найдем в этой ситуации определитель D_{N+n} поряд-ка 2N, разбив его на сумму двух определителей:

$$D_{N+n} = D_{N+n}^{(1)} + D_{N+n}^{(2)} = (-1)^{(n+1)} 2k_1 \Big[d_{(N+n),(N+1)}^{(1)} + d_{(N+n),(N+1)}^{(2)} \Big] = \left\{ \begin{cases} f_{1,1} & f_{2,1} & \dots -1 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ f_{1,2} & f_{2,1} & \dots & 0 & \dots & \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \dots \\ f_{1,N} & f_{2,N} & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots \\ 0 & k_2 & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \dots \\ f_{1,2} & f_{2,1} & \dots & -1 & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \dots \\ f_{1,2} & f_{2,1} & \dots & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & \dots \\ \vdots & \dots \\ f_{1,N} & f_{2,N} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots \\ h_{N} & f_{2,N} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & p_1' f_{2,1} & \dots & p_{n-1}' f_{2,n-1} & p_{n+1}' f_{2,n+1} & \dots \\ \vdots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & p_1' f_{2,1} & \dots & p_{n-1}' f_{2,n-1} & p_{n+1}' f_{2,n+1} & \dots \\ \vdots & \dots \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{N} & h_{N} & h_{N} & h_{N} \\ h_{$$

Во втором миноре в (19) введено обозначение $\overline{n} = N + n$. Так как в первом миноре $d_{N+n,N+1}^{(1)}$ ниж-

ние (N - 2) строк, а во втором $d_{N+n,N+1}^{(2)}$ нижние (N - 1) строк содержат чисто мнимые квазиим-

РАДИОТЕХНИКА И ЭЛЕКТРОНИКА том 66 № 2 2021

пульсы $k'_n = i \text{Im}(k'_n) = i p'_n$, то в (19) мы вынесли общий множитель $(i)^{N-2}$. В (19) все элементы определителей, а значит, и сами определители, вещественны, но детерминант D_{N+n} – комплексное число. Таким образом, в ситуации 2 отношение

$$\frac{C_n}{C_t} = (-1)^{n+t} \frac{\left[d_{(N+n),(N+1)}^{(1)} + d_{(N+n),(N+1)}^{(2)}\right]}{\left[d_{(N+t),(N+1)}^{(1)} + d_{(N+t),(N+1)}^{(2)}\right]}$$
(20)

является комплексным числом. Запишем (20) в виде

$$\frac{C_n}{C_t} = \frac{a_n + ib_n}{a_t + ib_t} = \frac{a_n a_t + b_n b_t}{a_t^2 + b_t^2} + i \frac{b_n a_t - a_n b_t}{a_t^2 + b_t^2}.$$
 (21)

Представим (21) в виде (16):

$$\frac{r_n}{r_t} (\cos(\theta_n - \theta_t) + i\sin(\theta_n - \theta_t)) =$$

$$= \frac{a_n a_t + b_n b_t}{a_t^2 + b_t^2} + i \frac{b_n a_t - a_n b_t}{a_t^2 + b_t^2}.$$
(22)

Из (22) получаем

$$\operatorname{tg}(\theta_n - \theta_t) = \frac{b_n a_t - a_n b_t}{a_n a_t + b_n b_t}.$$
(23)

Таким образом, при наличии в KS_1 более чем одного уровня с действительными квазиимпульсами разность фаз в каждом из членов в суммах (13), (15) в КЯ₂ отлична от нуля, т.е. в ситуации 2 под барьером в КЯ₂ плотность потока вероятности имеет вид $j_x^{(2)}(x,z) \neq 0$ и экспоненциально затухает при $x \to \infty$. В рассматриваемой ситуации каждой паре коэффициентов C_n, C_t в (13), (15) соответствует своя разность фаз $\Delta_{n,t} = (\theta_n - \theta_t)$. Поэтому при вычислении явного вида $j_x^{(2)}(x,z)$ в сумме по n,t суммируются члены с разными амплитудами и разными $\Delta_{n,t}$, отличными от нуля, для всех различных пар C_n, C_t . Из полученного выше доказательства отличия от нуля $j_x^{(2)}(x,z)$ под барьером в КЯ₂ следует, что в КЯ₁ в ситуации 2 также $j_x^{(1)}(x,z) \neq 0$. В противном случае (при равенстве нулю $j_x^{(1)}(x,z)$) было бы невозможно существование отличного от нуля $j_x^{(2)}(x,z)$ в КЯ₂.

Запишем выражение для $j_x^{(1)}(x, z)$ в ситуации 2. Тогда квазиимпульсы k_1 и k_2 в КЯ₁ – вещественные, а все остальные – мнимые. Все квазиимпульсы в КЯ₂ – мнимые. Введя, как и раньше, обозначения $k_i = ip_i$, где $p_i = \text{Im}(k_i)$, и записав коэффициенты B_i в виде $B_i = r_i \exp(i\theta_i)$, можно представить в этой ситуации выражение для $j_x^{(1)}(x, z)$ в виде

$$j_{x}^{(1)}(x,z) = \frac{\hbar}{m^{*}} \left\{ \left[k_{1}\chi_{1}^{2}(z)(1-r_{1}^{2}) - k_{2}\chi_{2}^{2}(z)r_{2}^{2} - r_{2}\chi_{1}(z)\chi_{2}(z) \left[r_{1}(k_{1}+k_{2})\cos((\theta_{1}-\theta_{2}+(k_{2}-k_{1})x) + (k_{1}-k_{2})\cos((k_{1}+k_{2})x-\theta_{2}) \right] \right] + 2\sum_{i=3}^{N} r_{i}\chi_{i}(z) \times \left\{ \sum_{j=i+1}^{N} r_{j}\chi_{j}(z)\exp((p_{i}+k_{2})x-\theta_{2}) \right] + 2\sum_{i=3}^{N} r_{i}\chi_{i}(z) \times \left\{ \sum_{j=i+1}^{N} r_{j}\chi_{j}(z)\exp((p_{i}+p_{j})x)(p_{i}-p_{j})\sin(\theta_{i}-\theta_{j}) \right\} - \frac{24}{r_{2}\chi_{2}(z)q_{2}}\exp(p_{i}x) \left[r_{i}\chi_{1}(z)q_{1}\sin(\theta_{1}-\theta_{i}-k_{1}x+\varphi_{1}) + r_{2}\chi_{2}(z)q_{2}\sin(\theta_{1}-\theta_{i}-k_{2}x+\varphi_{2})) - \chi_{1}(z)q_{1}\sin(\theta_{i}-k_{1}x_{i}+\varphi_{1})) \right] \right\},$$

где $q_{1,2} = \sqrt{k_{1,2}^2 + p_i^2}$ и $\sin \varphi_{1,2} = k_{1,2} / p_i$.

Отметим разное поведение членов в выражении (24) при $x \to -\infty$. Так, первый и второй члены в фигурных скобках не зависят от x. Члены, содержащие суммы по i, при $x \to -\infty$ осциллируют, экспоненциально затухая, а третий член в (24) имеет осцилляторный незатухающий характер при всех отрицательных значениях координаты x.

Таким образом, в ситуации 2 $j_x^{(1)}(x, z)$ сложным образом осциллирует в КЯ₁. Причиной этого яв-

ляется интерференция электронных волн, отражающихся от барьера по двум нижним подзонам с действительными квазиимпульсами. Детальные распределения $j_x^{(1)}(x, z)$ и $j_x^{(2)}(x, z)$ можно получить только в результате численных расчетов. Результаты таких расчетов приведены ниже. Подчеркнем еще раз отличие фазовых соотношений для любых пар комплексных коэффициентов B_i, B_j и C_n, C_t в ситуации 1 от ситуации 2. При учете в ситуации 1 только одной подзоны с вещественным квазиимпульсом k_1 разности фаз для всех различных пар коэффициентов C_n, C_t в (15) одинаковы и имеют вид $\Delta_{n,t} = \theta_n - \theta_t = \pi m$, где $m = 0, \pm 1$. Однако в ситуации 2 учет второй подзоны с вещественными k_2 приводит к появлению в выражении (24) для $j_x^{(1)}(x, z)$ дополнительных членов, возникающих из-за интерференции электронных волн с вещественными k_1 и k_2 . Вследствие этого, у каждой пары коэффициентов C_n, C_t появляется своя, отличная от нуля, разность фаз $\Delta_{n,t}$, причем $\Delta_{n,t}$ для всех пар в КЯ₂ различны. В результате плотности потоков вероятности $j_x^{(1)}(x, z)$ в КЯ₁ и $j_x^{(2)}(x, z)$ в КЯ₂ становятся отличными от нуля.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА

Очевидно, что полностью реализовать схему расчета $j_x^{(1)}(x,z)$ и $j_x^{(2)}(x,z)$, изложенную в преды-дущем разделе, при учете большого числа квантоворазмерных подзон в КЯ₁ и КЯ₂ можно только с помощью численных методов. В этом разделе мы приводим результаты численного расчета влияния электронной интерференции на отражение электронной волны от полубесконечного прямоугольного потенциального барьера в полупроводниковой 2D-наноструктуре с конкретными параметрами. Мы рассмотрели задачу о рассеянии монохроматической электронной волны единичной амплитуды, распространяющейся по нижней квантоворазмерной подзоне (*m* = 1) из узкой прямоугольной КЯ₁ (x < 0; a = 150 Å) в широкую прямоугольную $K \mathfrak{A}_2$ (x > 0; A = 500 Å) в симметричной по оси z 2D-наноструктуре с параметрами GaAs ($m^* = 0.067m_0, m_0$ – масса свободного электрона). Так как в таких симметричных структурах локализующие частицу потенциалы $U_1(z)$ и $U_2(z)$ в $KЯ_1$ и $KЯ_2$ удовлетворяют условиям $U_1(z) = U_1(-z)$ и $U_2(z) = U_2(-z)$ (точка z = 0 находится на оси симметрии структуры), то собственные функции $\chi_i(z)$ и $\phi_n(z)$ в KЯ₁ и KЯ₂ можно классифицировать по четности. В этом случае коэффициенты неорто-

гональности этих функций $f_{j,n} = \int \chi_j^*(z) \varphi_n(z) dz$ равны нулю для функций разной четности. Это приводит к разбиению системы (8а), (8б) на две независимые подсистемы:

1) подсистему неоднородных линейных уравнений, содержащую только коэффициенты B_j и C_n с индексами той же четности, что и номер подзоны *m*, по которой волна падает из K S_1 на барьер в K S_2 ,

РАДИОТЕХНИКА И ЭЛЕКТРОНИКА том 66 № 2 2021

2) подсистему однородных линейных уравнений для коэффициентов B_j и C_n с индексами противоположной *m* четности.

Так как в определителе системы однородных уравнений нет линейно зависимых строк или столбцов, то этот определитель отличен от нуля, т.е. для рассматриваемого нами случая с m = 1 все коэффициенты B_j и C_n с четными *j* и *n* равны нулю. Это обстоятельство существенно уменьшает объем численных расчетов. При расчете предполагалось, что высота потенциального барьера в $KS_2 V_0 = 243$ мэВ (рис. 1). Наличие такого барьера приводило фактически к изменению энергетического положения дна зоны проводимости в KS_2

до энергии $E_c^{(2)}$. Энергетическая диаграмма структуры приведена на рис. 2. Энергия частицы отсчитывается от дна зоны проводимости $E_c^{(1)}$ в КЯ₁. Минимумы энергий четырех нижних квантоворазмерных подзон находились в КЯ₁ при значении энергии

 $E_{1-4}^{(1)}=24.94;99.78;224.49;399.10$ мэВ и в КЯ₂ при —

 $E_{1-4}^{(2)} = V_0 + E_{1-4}^{(A)} =$ = 245.25, 251.98,263.21 и 278.92 мэВ,

где $E_{1-4}^{(A)}$ — энергии четырех нижних уровней размерного квантования в KЯ₂, ширина которых *A* равнялась 2.25, 8.98, 20.21 и 35.92 мэВ соответственно. При этом эффективная высота потенциального барьера для частицы, падающей на барьер из КЯ₁, была равна $V_{3\phi} = E_1^{(A)} + V_0$. Расчет был сделан для КЯ с бесконечно высокими потенциальными стенками. В рассматриваемом нами случае, когда энергия продольного движения падающей из КЯ₁ на барьер частицы $E_x < V_{3\phi}$, необходимо при расчете $j_x^{(2)}(x, z)$ использовать выражение (13), так как в КЯ₂ при таких E_x существуют только члены с мнимыми волновыми векторами $k'_{n,t}$. Мы исследовали численно две рассмотренные выше ситуации, учитывая при расчете в каждой квантовой яме по 31-й подзоне.

Ситуация 1. Кинетическая энергия частицы E_x в КЯ₁ находилась в интервале $E_1^{(1)} < E_x < E_2^{(1)}$ и была меньше эффективной высоты барьера $V_{3\phi}$ в КЯ₂, т.е. $E_x < V_{3\phi}$. В этой ситуации электронная волна падала по нижней квантоворазмерной подзоне в КЯ₁ (m = 1) и могла отражаться от барьера без затухания только по этой же подзоне с реальным k_{x1} , а в режиме затухания - по подзонам с мнимыми k_{xj} . Расчет подтвердил результаты проведенного выше теоретического анализа, что в ситуации 1 $j_x^{(1)}(x, z) = 0$ и $j_x^{(2)}(x, z) = 0$.



Рис. 2. Энергетическая схема 2D-наноструктуры, изображенной на рис. 1. $E_1^{(1)} - E_4^{(1)}$ и $E_1^{(2)} - E_4^{(2)} -$ энергетические положения доньев четырех нижних квантово-размерных подзон соответственно в КЯ₁ и КЯ₂; $E_{1,2,3,4}^{(1)}(k_x)$ и $E_{1,2,3,4}^{(2)}(k_x'^{(2)}) -$ законы дисперсии электронов для этих подзон в КЯ₁ и КЯ₂; $E_c^{(1)}$ и $E_c^{(2)}$ – энергетические положения доньев зон проводимости в КЯ₁ и КЯ₂ соответственно; $E_x^{(1)}$ или $E_x^{(2)}$ – энергии инжектированного электрона с волновым вектором $k_{1x}^{(1)}$ или $k_{1x}^{(2)}$ в КЯ₁. Энергия частицы отсчитывается от дна зоны проводимости $E_c^{(1)}$ в КЯ₁.

Ситуация 2. В этом случае ситуация кардинально меняется. Кинетическая энергия частицы в $KS_1 E_x = 245$ мэВ находилась в интервале $E_3^{(1)} < E_x < E_5^{(1)}$ и, как и в ситуации 1, была меньше высоты эффективного потенциального барьера $V_{3\phi}$ в KS_2 на 10.25 мэВ. В этом случае незатухающее распространение отраженной от барьера электронной волны было возможно как по нижней, так и по третьей подзоне в KS_1 (отражение по второй подзоне в KS_1 для рассматриваемой нами симметричной по оси *z* наноструктуры было запрещено правилами отбора). На рис. 3 приведен общий вид пространственно-неоднородного распределения плотностей потоков вероятностей $j_x^{(1)}(x,z)$ и $j_x^{(2)}(x,z)$ в рассматриваемой 2D-наноструктуре в интервале от x = 15 нм до x = -49 нм

(рис. 3). На нем отчетливо видно, что в KЯ₁ $j_x^{(1)}(x, z)$ имеет сложную осцилляторную структуру, состоящую из пиков, в которых $j_x^{(1)}(x, z) > 0$, и провалов, в которых $j_x^{(1)}(x, z) < 0$. Проекции амплитуд $j_x^{(1)}(x, z)$ на плоскость (x, z = 0) в интервале от x = 0 до x = -49 нм приведены на рис. 4a и на плоскость (x = 0, z) в интервале $z = \pm a/2$ – на рис. 46. На рис. 5 приведен общий вид пространственнонеоднородного распределения плотности потока вероятности $j_x^{(2)}(x, z)$ в КЯ₂ в интервале от x = 15 нм до x = 0. Видно, что в ситуации 2 под барьером в КЯ₂ плотность потока вероятности $j_x^{(2)}(x, z)$ отлична от нуля и в КЯ₂ существуют три области, в которых квантовомеханический ток $ej_x^{(2)}(x, z)$

 $j_x(x,z)/j_x(0,0)$

1.0



Рис. 3. Общий вид пространственно-неоднородного распределения плотностей потоков вероятностей $j_x^{(1)}(x, z)$ и $j_x^{(2)}(x, z)$ в рассматриваемой 2D-наноструктуре в интервале x = 15...-49 нм.

имеет координатную зависимость от x и z. Это центральная область, расположенная зеркально симметрично относительно плоскости (z-x), в которой ток $e_{j_x}^{(2)}(x,z)$ направлен в положительном направлении оси x. И две симметрично расположенные по оси z боковые области, в которых ток $e_{j_x}^{(2)}(x,z)$ направлен в противоположную сторону, в отрицательном направлении оси *x*. Очевидно, что наличие боковых областей с обратным направлением тока необходимо для обеспечения оттока заряда из-под барьера. Отсутствие таких областей привело бы к накоплению заряда под барьером. В этих трех областях амплитуда $ej_x^{(2)}(x,z)$ экспоненциально затухает при $x \to \infty$. Разумеется, полный ток под барьером, полученный интегрированием по *z* выражения для $ej_x^{(2)}(x,z)$ (13), из-за ортогональности поперечных волновых функций для разных квантоворазмерных подзон в KЯ₂ равен нулю. На рис. 4 приведены кривые, демонстрирующие распределение по оси z под барьером в широкой КЯ₂ с параметрами GaAs нормированной плотности потока вероятности $j_x(x, z)/j_x(0, 0)$ для шести поперечных сечений, последовательно расположенных по оси x в шести точках: $X_{1,2,3,4,5,6} = 0, 5,$ 10, 15, 20 и 30 Å. На рис. 5а представлена топограмма пространственного распределения под барьером в широкой КЯ₂ в плоскости (x-z) нор-



Рис. 4. Распределение по оси *z* под барьером в широкой КЯ₂ с параметрами GaAs нормированной плотности потока вероятности $j_x(x, z)/j_x(0,0)$ для шести поперечных сечений, последовательно расположенных по оси *x* в шести точках: *X* = 0 (*I*), 5 (*2*), 10 (*3*), 15 (*4*), 20 (*5*) и 30 Å (*6*). Положительные значения $j_x(x, z)/j_x(0,0)$ соответствуют плотности квантово-механического тока вдоль положительного направления оси *x*; отрицательные – в противоположном направлении; (Цифры в квадратах – нумерация кривых.) Кинетическая энергия частицы $E_x^{(2)}$ в КЯ₁ равнялась 245 мэВ и была меньше полной эффективной высоты потенциального барьера в КЯ₂ $V_{эф\phi} =$ $= E_1^A + V_0$ на 10.25 мэВ ($V_0 = 243$ мэВ).

мированной плотности потока вероятности $j_x^+(x,z)/j_x(0,0)$ (область 2) и (области 1 и 3).

Таким образом, в работе показано, что при энергии частицы меньше высоты потенциального барьера в рассмотренных 2D-наноструктурах интерференция электронных волн при определенных условиях приводит к подбарьерному просачиванию плотности квантовомеханического тока.

Очевидно, что если в наноструктуре в области x < 0 с помощью боковых электродов приложить по оси *z* постоянное электрическое поле, меняющее потенциальный профиль KЯ₁, то можно непрерывно перейти от ситуации 1, когда $j_x^{(1)}(x, z) = 0$, к ситуации 2, когда $j_x^{(1)}(x, z) \neq 0$. Такой переход может быть обусловлен как понижением симметрии (включение второго уровня с действительным квазиимпульсом) при включении поля, так и изменением расстояния между размерными подзонами в KЯ₁.

Рис. 5. Топограмма (а) пространственного распределения под барьером в широкой KS_2 в плоскости (x-z) нормированной плотности потока вероятности $j_x^+(x, z)/j_x(0,0)$ (область 2) и $j_x^-(x z)/j_x(0,0)$ (области 1 и 3). Амплитуды пиков представлены в отн.ед. Линии, уменьшающиеся по толщине в области 2, – сечения пика $j_x^+(x,z)/j_x(0,0)$ на высотах 1.0, 0.8, 0.4, 0.2, 0.1. Линии, уменьшающиеся по толщине в областях 1 и 3, соответствуют сечениям пиков $j_x^-(x,z)/j_x(0,0)$ высотой –0.57 в точках $j_x^-(0 \pm 46 \text{ Å})/j_x(0,0)$ при высотах –0.4, –0.2, –0.1. Зависимости (б) от *z* нормированных подбарьерных плотностей потоков вероятностей $j_x^+(x, z)/j_x(0,0)$ (область 2) и $j_x^-(x, z)/j_x(0,0)$ (области 1 и 3) в широкой KS_2 при x = 20 Å. Направления стрелок указывают направления токов, их длины соответствуют различным значениям нормированной амплитуды по оси *z* в каждой из трех областей. Положительные $j_x^+(x, z)$ и отрицательные $j_x^-(x, z)$ соответствуют положительному и отрицательному направлениям вдоль оси *x*.

В данной работе рассмотрена 2D-наноструктура с квантовыми ямами прямоугольного сечения и прямоугольным потенциальным барьером. Однако необходимо отметить, что рассмотренные эффекты носят общий характер и должны проявляться как в неоднородных по оси x 2D-наноструктурах с другими потенциальными профилями квантовых ям и потенциальных барьеров, так и в аналогичных 1D-наноструктурах. При этом единственным необходимым условием появления интерференционных эффектов является существование в КЯ₁, откуда на барьер падает электронная волна, как минимум двух квантоворазмерных подзон с действительными квазиимпульсами, что обеспечивает возникновение интерференции отражающихся от барьера волн.

В настоящее время существуют способы инжекции квазимоноэнергетических пучков электронов в 2D-наноструктурах. Так, например, в [34] был исследован баллистический электронный транспорт по минизонам в сверхрешетке на основе системы GaAlAs—GaAs путем инжекции в сверхрешетку пучков горячих электронов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные в работе теоретический анализ и численный расчет показывают, что в полупроводниковых 2D-наноструктурах, геометрия и потенциальный рельеф которых обеспечивают существование в таких структурах электронных интерференционных эффектов, возможен новый эффект — возникновение пространственно-неоднородного распределения плотности квантовомеханического тока $ej_x(x, z)$. Рассмотрена наноструктура, состоящая из последовательно расположенных в направлении распространения электронной волны узкой и широкой прямоугольных квантовых ям. Показано, что при энергии частицы меньше высоты потенциального барьера в такой наноструктуре при определенных условиях возможно ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ

1. *Имри Й*. Введение в мезоскопическую физику. М.: Физматлит, 2002.

возникновение осциллирующего пространствен-

но-неоднородного распределения *ej_x(x, z)* в узкой квантовой яме и экспоненциально затухающее и

имеюшее координатную зависимость просачива-

ние $e_{i_x}(x, z)$ под полубесконечный прямоуголь-

ный потенциальный барьер высотой V₀, создан-

ный в широкой квантовой яме. Этот эффект обу-

словлен интерференцией электронных волн.

распространяющихся по разным квантово-раз-

мерным подзонам в такой наноструктуре.

- Ferry D.K., Goodnick. S.M. Transport in Nanostructures. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997.
- 3. *Datta S.* Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995.
- Kircenow G. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. № 14. P. 10452.
- 5. Kircenow G. // Sol. St. Com. 1988. V. 68. № 8. P. 715.
- 6. *Tekman E., Ciraci S.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. № 9. P. 7145.
- Sols F., Macucci M., Ravaioli U., Hess K. J. // J. Appl. Phys. 1989. V. 66. № 8. P. 3892.
- *Tachibana H., Totsuji H. //* J. Appl. Phys. 1996. V. 79. № 9. P. 7021.
- 9. Wu H., Sprung D.W.L., Martorell J. // J. Appl. Phys. 1992. V. 72. № 1. P. 151.
- 10. Namiranian A., Khajehpour M.R.H., Kolesnichenko Yu.A., Shevchenko S.N. // Physica E. 2001. V. 10. № 4. P. 549.
- Olendski O., Mikhailovska L. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. № 3. P. 035331.
- 12. Bagwell P.F. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. № 15. P. 10354.
- Takagaki Y., Ferry D.K. // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. № 15. P. 8399.
- Itoh T., Nobuyuki Sano N., Yoshii A. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. № 24. P. 14131.
- Singha Deo P., Gupta B.C., Jayannavar A.M., Peeters F.M. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. № 16. P.10784.

- Nicolic K., Sordan R. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. № 15. P. 9631.
- Jin G.J., Wang Z.D., Hu A., Jiang S.S. // J. Appl. Phys. 1999. V. 85. № 3. P. 1597
- Петров В.А., Сандлер И.М. // Микроэлектроника. 1994. Т. 23. № 4. С. 3.
- Berggrenn K.F., Ji Z.-L. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. № 6. P. 4760.
- 20. Ji Z.-L., Berggrenn K.-F. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. Nº 12. P. 6652.
- Petrov V.A., Bratman V.L. // Phys. Stat. Sol.(b). 2000.
 V. 221. № 1. P. 459.
- 22. Petrov V.A., Nikitin A.V. // Proc. SPIE. 2004. V. 5401. P. 377.
- 23. Петров В.А., Никитин А.В. // РЭ. 2007. Т. 52. № 11. С. 1387.
- 24. *Petrov V.A., Nikitin A.V.* // Physics, chemistry and application of nanostructures. Proc. Int. Conf. on Nanomeeting. Minsk, Belarus, 22–25 May 2007. P. 109.
- 25. *Petrov V.A., Nikitin A.V.* // Proc. SPIE. 2008. V. 7025. P. 702500-1.
- 26. *Петров В.А., Никитин А.В.* // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. № 4. С. 436.
- Petrov V.A., Nikitin A.V. // Phys. Stat. Sol. (c). 2006.
 V. 3. № 7. P. 2423.
- 28. *Петров В.А., Никитин А.В.* // Физика и техника полупроводников. 2006. Т.40. № 8. С. 977.
- Petrov V.A., Nikitin A.V. // Proc. SPIE. 2006. V. 6260. P. 62600N-1.
- 30. Петров В.А., Никитин А.В. // РЭ. 2009. Т. 54. № 2. С. 220.
- Petrov V.A., Nikitin A.V. // Proc. 17th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology", Minsk, Belarus, 22–26 Jun. 2009. P. 254.
- Petrov V.A., Nikitin A.V. // Proc. 11th IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conf. (NMDC 2016), 9–12 October, Toulouse, France. https://doi.org/10.1109/NMDC.2016.7777168
- 33. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
- 34. *Rauch C., Strasser G., Unterrainer K. et al.* // Physica E. 1998. V. 2. № 1–4. P. 282.