

КОЛЛАПС РЕЗОНАНСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ КАК ПЕРЕХОД С НАРУШЕНИЕМ СИММЕТРИИ В ОТКРЫТОЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ

А. А. Горбачевич^а, М. Н. Журавлев^а, В. В. Капаев^{б}*

^а *Московский государственный институт электронной техники
124498, Москва, Россия*

^б *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 февраля 2008 г.

Теоретически исследован коллапс резонансов в резонансно-туннельных гетероструктурах, представляющий собой слияние при изменении параметров системы двух резонансов единичной прозрачности в один резонанс с прозрачностью меньшей единицы. В точке коллапса в геометрически симметричной системе возникает асимметрия распределения электронной плотности. Параметр асимметрии ведет себя подобно параметру порядка при фазовом переходе второго рода. Физический механизм перехода при этом связан с уширением уровней квазистационарных состояний квантовой системы в результате взаимодействия с континуумом делокализованных состояний. Показана также возможность существования в одномерных системах двух качественно различных типов резонансов при малых энергиях, различающихся знаком эффективного размера потенциала.

PACS: 73.40.Gk

1. ВВЕДЕНИЕ

Как хорошо известно, в пространственно-ограниченных квантовых системах конечное значение неопределенности импульса Δp приводит к дискретности энергетического спектра в силу того, что различимыми могут быть только уровни энергии, отстоящие друг от друга на величину, большую $(\Delta p)^2/2m$. В открытых квантовых системах, обменивающихся с окружением частицами и/или энергией, уровни энергии квазистационарных состояний имеют конечную ширину. Возникает вопрос о возможности существования эффекта, в известном смысле обратного формированию дискретного спектра в ограниченных квантовых системах, а именно: слияния двух уровней квазистационарных состояний в один, если расстояние между уровнями становится меньше их ширины. Наша работа дает положительный ответ на этот вопрос.

Простейшие из резонансно-туннельных струк-

тур — двухбарьерные — один из наиболее изученных объектов среди полупроводниковых гетероструктур [1–4]. Это, в частности, объясняется исключительно высоким быстродействием резонансно-туннельных диодов и значительными перспективами их использования в электронике [2–5]. Задача рассеяния в случае прямоугольных барьеров легко решается аналитически [4, 6], и туннельная прозрачность (коэффициент прохождения) симметричной резонансно-туннельной структуры как функция энергии демонстрирует максимумы единичной амплитуды (резонансы) при совпадении энергии налетающего электрона с уровнем квазистационарного состояния в яме, образованной двумя барьерами. Шириной уровня квазистационарного состояния γ и, соответственно, резонанса можно управлять, изменяя ширину и высоту барьеров, а расстоянием по энергии ΔE между квазистационарными уровнями — варьируя расстояние между барьерами (ширину квантовой ямы). Поэтому, на первый взгляд, меняя параметры структуры, можно добиться того, что в двухбарьерной структуре расстояние между

*E-mail: kapaev@sci.lebedev.ru

уровнями квазистационарных состояний (резонансами) станет меньше их ширины. Между тем даже для очень широких (узкие и/или низкие барьеры) и близко расположенных (широкая яма) уровней квазистационарных состояний резонансы в пропускании остаются все же различимыми и никакого их слияния в простейшей двухбарьерной структуре не происходит [2, 4]. Дело в том, что ширина уровня зависит не только от туннельной прозрачности, но и от энергии: $\gamma \sim vT(E)/d \sim ET(E)$, где v — скорость носителя, d — ширина ямы, $T(E)$ — туннельная прозрачность барьера. При увеличении ширины ямы понижаются как расстояние между уровнями ΔE , так и энергия уровня, что, в свою очередь, приводит к уменьшению ширины уровня.

В настоящей работе исследованы более сложные системы, содержащие дополнительные по сравнению с двухбарьерной структурой степени свободы — инвертированная двухбарьерная (барьеры заменены ямами и наоборот, разд. 2) и симметричная трехбарьерная (разд. 3) структуры. В этих структурах, изменяя их параметры, можно независимо управлять расстояниями между уровнями квазистационарных состояний и их ширинами. Показано, что в симметричных структурах имеет место коллапс резонансов, заключающийся в слиянии двух резонансов с единичной прозрачностью в один резонанс с прозрачностью, меньшей единицы, и сопровождающийся возникновением асимметрии распределения электронной плотности в резонансе (при заданных граничных условиях, соответствующих частице, падающей слева или справа), т. е. происходит переход с нарушением симметрии (в обычных симметричных резонансно-туннельных структурах прозрачность в резонансе строго равна единице [2, 4]). При этом в инвертированной резонансно-туннельной структуре резонансное туннелирование имеет место на одиночном барьере (подбарьерные резонансы) [7]. Заметим также, что на возможность слияния двух резонансов в один с прозрачностью, меньшей единицы (без анализа симметрии распределения электронной плотности), было указано на примере трехбарьерной структуры в работе [4].

Коллапс могут испытывать только два квазистационарных состояния, которые генетически (при изменении параметров модели) можно представить как результат туннельного расщепления исходно двукратно вырожденного уровня. Это условие не выполняется для резонансов в простейшей двухбарьерной структуре или для резонансов Рамзауэра–Таунсенда.

Резонансы Рамзауэра–Таунсенда [4, 8] в гетеро-

структурах (далее интерференционные резонансы, ИР) представляют собой надбарьерные или надъямные резонансы в классически доступной области энергии, возникающие при интерференции электронных волн, отраженных от скачков потенциала. ИР характеризуются широкими резонансными максимумами. Расстоянием между ИР в сложных гетероструктурах можно управлять независимо от их ширины. Однако, как показано в разд. 2, при изменении параметров симметричной системы надъямные резонансы Рамзауэра–Таунсенда демонстрируют не коллапс, а кроссинг, разрушающийся при введении асимметрии. В этом же разделе показано, что отражения электронных волн от скачков потенциала, которые присутствуют в инвертированной резонансно-туннельной структуре, не играют существенной роли в формировании подбарьерных резонансов на одиночном барьере и коллапса резонансов. Подбарьерные резонансы присутствуют и в аналитически точно решаемой модели потенциальной ямы с плавным профилем, разделенной на две части δ -барьером.

Ранее в теории рассеяния были известны резонансы при малых энергиях и резонансы на квазидискретном уровне (резонансное туннелирование), а также ИР — интерференционный резонанс Рамзауэра–Таунсенда. В трехмерном случае резонансы при малых энергиях и на квазидискретном (квазистационарном) уровне отвечают максимуму сечения рассеяния, а ИР — обращению сечения рассеяния в нуль. Спецификой одномерного случая служит то, что коэффициент прохождения $T = |t|^2$ (t — амплитуда прошедшей волны) представляет собой, по сути, сечение рассеяния вперед (на нулевой угол). При этом максимальное значение T достигается как при резонансном туннелировании, так и при ИР.

При малых энергиях зависимость амплитуды рассеяния от волнового вектора (от энергии) определяется требованием унитарности и имеет в трехмерной системе вид [9]

$$f = -\frac{1}{\kappa_0 + ik - \frac{1}{2}r_0k^2}. \quad (1)$$

Здесь $k = (1/\hbar)\sqrt{2mE}$ — волновой вектор, κ_0 — обратная длина рассеяния, r_0 — эффективный радиус взаимодействия потенциала. В трехмерной системе сечение рассеяния имеет максимум при нулевой энергии независимо от знака эффективного радиуса взаимодействия. В настоящей работе на примере инвертированной резонансно-туннельной структуры показано, что в одномерных системах могут

существовать два качественно различных типа резонансов при малых энергиях, различающихся знаком r_0 .

Традиционно для описания резонансов в квантовых системах используется подход, основанный на исследовании аналитических свойств матрицы рассеяния $S = 1 + ikf$ — оператора, переводящего начальное состояние рассматриваемой системы в конечное [10–14]. Эта функция аналитична во всей плоскости комплексных переменных k и E , являющихся аналитическими продолжениями, соответственно, волнового вектора и энергии в комплексную плоскость за исключением, может быть, изолированных точек и разрезов [11]. Непосредственно в эксперименте определяются уровни энергии связанных состояний, а также энергии и сечения рассеяния резонансов на квазидискретных уровнях. Связанные состояния однозначно соответствуют полюсам матрицы рассеяния на верхней мнимой полуоси переменной k . Для резонансов ситуация менее определенная. Сечение рассеяния как функция энергии вблизи резонанса описывается формулой Брейта–Вигнера [15]:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (2)$$

Если полюс матрицы рассеяния в нижней полуплоскости комплексной переменной энергии расположен вблизи действительной оси, а величина его мнимой части E_I много меньше действительной E_R и расстояния до других резонансов, то он может быть связан с резонансными (квазистационарными) состояниями. При этом действительная часть полюса определяет энергию резонансного уровня $E_0 = E_R$, а мнимая — его полуширину $\Gamma/2 = E_I$ и амплитуда рассеяния имеет вид

$$f = \frac{1}{k} \frac{e^{i2\delta} \Gamma/2}{(E - E_0) + i\Gamma/2}. \quad (3)$$

Если же полюс расположен далеко от мнимой оси и величина его мнимой части сравнима с величиной действительной части, то такой полюс в общем случае не связан с какими-либо наблюдаемыми характеристиками системы, как это, например, имеет место в случае ИР. В непосредственной окрестности резонанса сечение рассеяния также может быть записано в виде (2), однако параметры E_0 и Γ в выражениях для сечения (2) и амплитуды (матрицы) рассеяния (3) оказываются различными.

В случае резонансного туннелирования в одномерной системе коэффициент прохождения также имеет брейт-вигнеровский вид:

$$T = |t|^2 = \frac{k^2}{4\pi} \sigma = \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (4)$$

где $t = kf$ — амплитуда прошедшей волны, σ и f — сечение (2) и амплитуда рассеяния (1) в трехмерной системе. При этом в простейшей двухбарьерной структуре такой резонанс соответствует полюсу матрицы рассеяния (амплитуды рассеяния t), расположенному вблизи действительной оси [16–18]. Подобное соответствие сохраняется и для более сложных резонансно-туннельных структур при условии, что ширина резонанса мала (разд. 3). В случае подбарьерного резонансного туннелирования в инвертированной резонансно-туннельной структуре квазистационарные состояния непосредственно погружены в континуум и не отделены от него барьерами, как в обычной резонансно-туннельной структуре. Соответственно, ширина резонанса всегда велика, и, как показано в разд. 2, положение полюса амплитуды рассеяния на действительной оси E_R в этом случае существенно отличается от положения резонанса E_0 . В этом смысле подбарьерный резонанс аналогичен ИР.

Брейт-вигнеровское выражение для сечения рассеяния широко используется в атомной физике для интерпретации экспериментальных данных [15, 19, 20]. При этом основную проблему составляет описание близко расположенных резонансов, для которых обсуждаются различные эмпирические выражения для амплитуды рассеяния, учитывающие взаимодействие резонансов и полюсов [20, 21]. Рассмотренный в настоящей работе коллапс резонансов представляет собой нетривиальный пример взаимодействия резонансов, который может быть описан точно решаемой моделью. Как показано в разд. 3, в трехбарьерной структуре имеется область параметров, где ширины резонансов малы и могут быть непосредственно сопоставлены полюсам амплитуды рассеяния. Получены соответствующие аналитические формулы для амплитуды рассеяния вблизи точки коллапса. В самой точке коллапса выражение для прозрачности имеет существенно не брейт-вигнеровский вид.

2. ИНВЕРТИРОВАННАЯ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНАЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРА

Электронные резонансы в полупроводниковых гетероструктурах представляют собой результат взаимодействия квантовой системы, образованной квантовыми ямами и барьерами, с континуумом

электронных состояний и отражают ее внутреннюю структуру. Ранее [7] была показана возможность существования электронного резонанса нового типа — резонансного туннелирования на одиночном барьере со сложными гетерограницами, описываемыми обобщенными граничными условиями [22, 23]. При этом резонанс на одиночном барьере (подбарьерный резонанс) связан с выходом в непрерывный спектр локализованного состояния за счет туннельного взаимодействия интерфейсных состояний, локализованных на гетерограницах барьера. Одна из возможных интерпретаций сложных граничных условий состоит в наличии на гетерогранице квантовой ямы в виде δ -функции [24]. Для гетероструктур, описываемых стандартными граничными условиями, к числу которых принадлежат наиболее изученные гетеропары GaAs/AlGaAs, аналогичный эффект имеет место в случае, если к границам барьера примыкают две квантовые ямы (вставка на рис. 1). Фактически мы имеем дело с инвертированной (обращенной) структурой обычного резонансно-туннельного диода, в которой барьеры заменены квантовыми ямами и наоборот.

Рассматриваемая структура оказывается более богатой различными резонансными эффектами, чем описанная в работе [7] структура в виде одиночного барьера со сложными граничными условиями. Это связано, во-первых, с тем, что зависимость коэффициента пропускания от энергии при прохождении электрона над квантовой ямой в виде δ -функции является монотонной функцией энергии. В случае же реальной квантовой ямы конечной глубины и ширины имеют место ИР, обусловленные интерференцией электронных волн де Бройля, отраженных от границ областей с различным уровнем потенциала. Во-вторых, особенностью квантовой ямы в виде δ -функции произвольной мощности служит наличие в ней только одного связанного состояния, в прямоугольной же яме связанных состояний может быть несколько и их количество определяется параметрами структуры.

Решая уравнения Шредингера для системы, состоящей из двух прямоугольных туннельно связанных квантовых ям конечной ширины (ширины h_{w1} и h_{w2} , глубина U_w), разделенных туннельно-прозрачным барьером (ширина h_b , высота U_b), получаем энергии локализованных состояний (при $E < 0$), зависимости коэффициентов отражения R и пропускания T от энергии падающей частицы E (при $E > 0$). В случае симметричной структуры, когда $h_{w1} = h_{w2} = h_w$, выражение, описывающее зависимость пропускания от энергии при $E < U_b$, имеет

вид

$$T = \left\{ 1 + \frac{1}{8k_1^2 k_2^4 \varkappa_3^2} [(k_1^2 - k_2^2) \sin(k_2 h_w) Z + k_2^2 (k_1^2 + \varkappa_3^2) \operatorname{sh}(\varkappa_3 h_b)]^2 \right\}^{-1}, \quad (5)$$

$$Z = 2k_2 \varkappa_3 \cos(k_2 h_w) \operatorname{ch}(\varkappa_3 h_b) - (k_2^2 - \varkappa_3^2) \sin(k_2 h_w) \operatorname{sh}(\varkappa_3 h_b),$$

где

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_w)},$$

$$\varkappa_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_b - E)}.$$

Выражение для T при $E > U_b$ получается из (5) заменой

$$\varkappa_3 \rightarrow ik_3, \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_b)},$$

$$\operatorname{ch}(\varkappa_3 h_b) \rightarrow \cos(k_3 h_b), \quad \operatorname{sh}(\varkappa_3 h_b) \rightarrow i \sin(k_3 h_b).$$

Первое слагаемое в выражении, стоящем в квадратных скобках в знаменателе (5), описывает возникновение надъямных резонансов, а второе — влияние барьера.

Учитывая сложный нелинейный характер зависимости пропускания от энергии (5), удобно ее анализировать с помощью так называемых резонансных диаграмм, представляющих собой графики зависимостей энергий максимумов E_{max} и минимумов E_{min} пропускания T от глубины ям при фиксированных ширинах слоев и заданной высоте барьера (или от ширин при фиксированной глубине).

На рис. 1 представлены подобные диаграммы для структуры с $h_w = 50 \text{ \AA}$, $h_b = 15 \text{ \AA}$, $U_b = 0.2 \text{ эВ}$, $m = 0.067m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. Подбарьерные резонансы имеют место для энергий, меньших высоты барьера (0.2 эВ). При $E < 0$ изображены положения уровней размерного квантования в системе. Точки V_1, \dots, V_4 обозначают глубины ям, при которых соответствующие уровни размерного квантования выходят в непрерывный спектр. Как следует из рис. 1, в интервале глубин ям, где нечетное состояние (1 или 3) является локализованным, а следующее уже выходит в непрерывный спектр, значение пропускания в максимуме T_{max} строго равно единице. Линия единичных максимумов образует петлю, начинающуюся и оканчивающуюся в точках

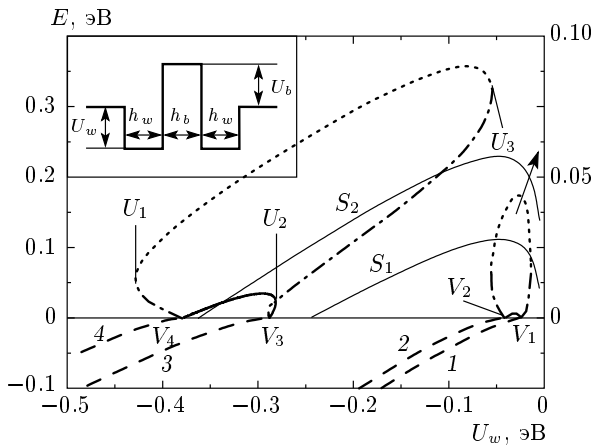


Рис. 1. Положение экстремумов пропускания (сплошные линии — $T_{max} = 1$, штрихпунктирные — $T_{max} < 1$, пунктирные — T_{min}), энергий размерного квантования (штриховые) и действительных частей полюсов матрицы рассеяния (тонкие сплошные) как функций глубины квантовой ямы U_w

выхода локализованных состояний разной четности в непрерывный спектр. Это и есть подбарьерный резонанс, упоминавшийся выше. Обращает на себя внимание особенность в зависимости E_{max} от U_w . В простейшем случае надъямного ИР для одиночной квантовой ямы, определяемого условием $k_2 h_w = \pi n$, где k_2 — волновой вектор электрона в области ямы, эта зависимость должна быть линейной с наклоном, равным единице. В нашем случае для четных резонансов функция $E_{max}(U_w)$ близка к линейной, тогда как для нечетного резонанса наблюдается значительное отклонение от линейности. Это состояние как бы притягивается к локализованному четному. При малых ширинах барьеров, с увеличением глубин ям $|U_w|$, начиная с V_3 , вначале отчетливо проявляются два максимума пропускания, по мере возрастания E_{max} их ширина увеличивается и, наконец, при $U_w = U_2$ максимумы сливаются — имеет место коллапс резонансов. При уменьшении $|U_w|$ пропускание плавно уменьшается. Точки $U_{1,3}$ соответствуют исчезновению максимумов пропускания (максимум и минимум сливаются, формируя точку перегиба на кривой $T(E)$).

Структура резонансной диаграммы обладает рядом важных особенностей. Прежде всего обращает на себя внимание универсальный характер диаграммы в окрестности особых точек на границе континуума (рис. 2). На этой границе в одной точке всегда сходятся одна линия локализованного состояния (LS) и две линии резонансов, одна из которых со-

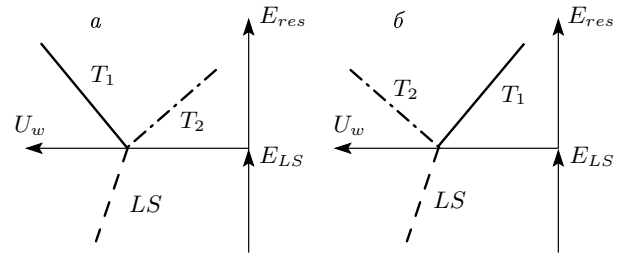


Рис. 2. Структура резонансной диаграммы в окрестности точки выхода локализованного состояния в непрерывный спектр (сплошные линии — $T_{max} = 1$, штрихпунктирные — $T_{max} < 1$)

ответствует резонансу с единичной прозрачностью (T_1), другая — резонансу с прозрачностью, меньшей единицы (T_2). При этом существует два типа таких точек (рис. 2). Один тип (рис. 2а) реализуется в ситуации, когда локализованное состояние и резонанс с единичной прозрачностью сосуществуют в одной области параметров системы (но при разных значениях энергии). В системах другого типа (рис. 2б) локализованное состояние и резонанс с единичной прозрачностью относятся к разным областям значений параметров системы.

Физическая причина существования двух качественно различных резонансов связана со структурой амплитуды прохождения t (амплитуды рассеяния вперед) вблизи границы континуума, т. е. при малых энергиях. Простое выражение для амплитуды рассеяния при малых энергиях (1) справедливо только в трехмерном случае, где оно следует из условия унитарности матрицы рассеяния

$$\text{Im } f^{-1} = k. \tag{6}$$

В одномерном случае условие унитарности имеет вид

$$|t|^2 + |r|^2 = 1, \quad r^* t' = -r' t^*, \tag{7}$$

где r — амплитуда отражения, штрихованные и нештрихованные обозначения относятся к данным рассеяния для волн, распространяющимся, соответственно, слева направо и справа налево. В одномерном случае соотношение (6) уже не выполняется. Общим для одномерного и трехмерного рассеяния служит то, что амплитуда прохождения t и отражения r имеет полюс в верхней полуплоскости переменной k в точках $k = i\kappa_n$, соответствующих локализованным состояниям с энергиями $E_n = -\hbar^2 \kappa_n^2 / 2m$ (n — номер локализованного состояния). При этом в одномерном случае коэффициент прохождения обращается в нуль при $k \rightarrow 0$ ($t \sim k$) [9]. Следовательно, в

одномерной системе амплитуду прохождения t при малых энергиях можно записать в виде

$$t \equiv t(ik) = \frac{ik(1 - ik\zeta)}{\alpha_1 \left(ik + \varkappa_0 - \frac{1}{2}\rho^*k^2 \right)}. \quad (8)$$

Здесь ζ , ρ^* , \varkappa_0 и α_1 — константы, характеризующие потенциал, \varkappa_0 — величина, обратная длине рассеяния в обычной трехмерной задаче рассеяния. При $\varkappa_0 = 0$ длина рассеяния обращается в бесконечность (унитарный предел). Энергия локализованного состояния определяется из условия резонанса при $k = i\varkappa$:

$$-\varkappa + \varkappa_0 + \frac{1}{2}\rho^*\varkappa^2 = 0. \quad (9)$$

Таким образом, если \varkappa_0 мало, то $\varkappa \approx \varkappa_0$. С учетом квадратичных по \varkappa_0 членов имеем

$$\varkappa = \varkappa_0 + \frac{1}{2}\rho^*\varkappa_0^2. \quad (10)$$

В области, где существует локализованное состояние, $\varkappa_0 > 0$ и равно нулю в точке выхода локализованного состояния. Из непрерывности \varkappa_0 как функции параметров системы следует, что в области, где отсутствует локализованное состояние, $\varkappa_0 < 0$.

Структура знаменателя в выражении для коэффициента прохождения в одномерной модели полностью аналогична структуре знаменателя в выражении для трехмерной амплитуды рассеяния (2). Однако физический смысл одномерного «эфффективного размера потенциала» ρ^* иной, чем смысл «эфффективного радиуса потенциала» r_0 в трехмерной системе.

Пусть $|\alpha_1| = 1$ (см. ниже). Для вероятности прохождения (прозрачности) T из формулы (8) с учетом того, что в рамках принятой точности $1 - ik\zeta \approx e^{-ik\zeta}$, получаем

$$T = \frac{k^2}{k^2 + (\varkappa_0 - \rho^*k^2/2)^2}. \quad (11)$$

При $k^2 = |2\varkappa_0/\rho^*|$ величина T в (11) имеет максимум. Значение пропускания в максимуме равно единице, когда знаки \varkappa_0 и ρ^* совпадают, и меньше единицы в противном случае. Таким образом, при $\rho^* > 0$ формула (11) описывает резонансную диаграмму, изображенную на рис. 2а ($T_{max} = 1$ в области, где $\varkappa_0 > 0$, и $T_{max} < 1$ в области, где $\varkappa_0 < 0$), а при $\rho^* < 0$ — диаграмму на рис. 2б. В трехмерном случае в сечении рассеяния в числителе выражения (8) стоит константа (1). Соответственно сечение рассеяния независимо от знака ρ^* всегда (при условии $\varkappa_0\rho^* < 1/2$) имеет максимум при $k = 0$.

В общем случае можно выделить два типа резонансных диаграмм. Первый тип соответствует на рис. 1 поведению резонансной кривой между точками V_1 и V_2 : с изменением глубины (или ширины) ям резонансная кривая начинается в точке, где исчезает одно локализованное состояние, и оканчивается в точке, где исчезает следующее локализованное состояние (точки V_1 и V_2). В окрестностях точек выхода локализованных состояний диаграммы соответствуют разным типам (см. рис. 2) и, следовательно, параметр ρ^* имеет различные знаки. Другой тип поведения (точки V_3 и V_4) имеет место, когда в некоторой области параметров имеется два резонанса с единичной прозрачностью, испытывающие коллапс. Коллапс имеет место только для резонансов, которые относятся к одному типу (рис. 2б) и характеризуются одинаковым знаком коэффициента ρ^* .

Выясним физический смысл констант в выражении (8). Следуя работе [25], введем в пространстве решений уравнения Шредингера два базиса (φ, φ^*) и (ψ, ψ^*) , где φ и ψ — функции, имеющие асимптотику e^{-ikx} при x , стремящемся соответственно к $-\infty$ и $+\infty$. В силу линейности уравнения два базиса связаны друг с другом линейным преобразованием, которое реализуется унитарной матрицей перехода \hat{T} :

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 - |b|^2 = 1. \quad (12)$$

Амплитуды прохождения и отражения выражаются через параметры матрицы \hat{T} соотношениями

$$t = t' = \frac{1}{a}, \quad r = \frac{b}{a}, \quad r' = -\frac{b^*}{a}, \quad (13)$$

автоматически удовлетворяющими условиям унитарности (7). Согласно формуле (13) параметр a имеет простые нули $k = i\kappa_n$ в верхней полуплоскости ($\varkappa > 0$). Для интеграла по всему пространству квадрата ненормированной функции локализованного состояния, имеющей на $-\infty$ асимптотику $e^{\varkappa x}$, можно получить следующее выражение [25]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^2 dx = ia'(i\kappa_n)b(i\kappa_n). \quad (14)$$

Здесь $a'(i\kappa_n)$ — производная по k коэффициента a (12) в точке $k = i\kappa_n$. Для симметричного потенциала $b(i\kappa_n) = (-1)^{n-1}$ ($n = 1$ соответствует основному состоянию). Для функции $a'(i\kappa_n)$, входящей в правую часть (14), согласно (8) и (13) имеем

$$a'(i\kappa_n) = -i\alpha_1 \left(\frac{1}{\kappa_n} - \rho^* - \zeta \right). \quad (15)$$

Для потенциала конечного радиуса действия ($U(|x| > L/2) = 0$) интеграл в левой части (14) можно разбить на интеграл по внешней области ($U = 0$, $\varphi_n = \exp(-\kappa_n|x|)$ — для простоты рассматриваем симметричный потенциал) и по внутренней области. В результате в пределе $\varkappa L \ll 1$ интеграл можно записать как

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^2 dx = \frac{1}{\kappa_n} e^{-2\kappa_n L} + \int_{-L/2}^{L/2} \varphi_n^2 dx \approx \frac{1}{\kappa_n} - r_0. \quad (16)$$

Здесь первый член в правой части равен нормировочному интегралу в случае, если волновая функция локализованного состояния во всем пространстве имеет вид $\varphi_n = \exp(-\kappa_n|x|)$ (потенциал нулевого радиуса), r_0 — параметр размерности длины (эффективный радиус взаимодействия), описывающий изменение вклада в нормировочный интеграл, связанное с областью действия потенциала, по сравнению с потенциалом нулевого радиуса, но с той же энергией связи. В трехмерном случае именно этот параметр фигурирует в качестве коэффициента при квадратичном по k члене в знаменателе амплитуды рассеяния ($r_0 = \rho^*$). Заметим, что в одномерном случае коэффициент ρ^* , определяющий характер резонансного поведения системы при малых энергиях, оказывается не равным параметру r_0 , связанному с пространственным распределением волновой функции локализованного состояния.

Из формулы (14) с учетом (15) и (16) следует, что

$$\alpha_1 = (-1)^{n-1} (1 + O(\varkappa_0)).$$

Заметим, что вблизи линии резонанса имеем $k \sim \sqrt{\varkappa_0}$, поэтому учет членов, пропорциональных \varkappa_0 в выражении для α_1 , будет превышением точности. Аналогичная ситуация имеет место и вблизи границы непрерывного спектра, где $k \sim \varkappa_0$. Таким образом, можно считать, что

$$\alpha_1 = 1 \quad (17)$$

во всем диапазоне применимости формулы (8). Прямым доказательством этого утверждения будет возможность представить разложение выражения для коэффициента прохождения по степеням k с точностью до членов $O(k^4)$ в виде (11). Из сравнения результатов расчета в конкретной микроскопической модели с формулой (11) оказывается возможным сразу же определить конкретные выражения для \varkappa_0 и ρ^* . Однако анализ выражения для коэффициента прохождения не позволяет установить значение ς ,

а следовательно, и r_0 . Для нахождения полного набора параметров, характеризующих рассеяние в заданном потенциале, рассмотрим общее выражение для обратной амплитуды прохождения $a(ik)$, которое при малой энергии с учетом (17) принимает вид

$$a(ik) = \frac{1}{t(ik)} \approx \frac{1}{ik} (1 + i\varsigma k) \left(\varkappa_0 + ik - \frac{1}{2} \rho^* k^2 \right) \approx \frac{1}{ik} \left[\varkappa_0 + ik(1 + \varkappa_0 \varsigma) - \frac{1}{2} k^2 (\rho^* + 2\varsigma) \right]. \quad (18)$$

Выражение для $a(ik)$ в конкретной микроскопической модели можно представить следующим образом:

$$a(ik) = \frac{1}{ik} \left(a_0 + ia_1 k - \frac{1}{2} a_2 k^2 \right). \quad (19)$$

Из сопоставления (18) и (19) получаем следующую пошаговую процедуру для определения неизвестных параметров \varkappa_0 , ς , ρ^* и r_0 :

$$\varkappa_0 = a_0, \quad (20)$$

$$\varsigma = \left(\frac{a_1 - (a_1)_0}{a_0} \right)_0. \quad (21)$$

Здесь и ниже индекс «0» у круглой скобки означает, что выражение в скобках берется на гиперповерхности, определяемой соотношением $\varkappa_0 = 0$. При этом должно выполняться равенство $(a_1)_0 = 1$. Далее

$$\rho^* = (a_2)_0 - 2\varsigma. \quad (22)$$

Для эффективного радиуса взаимодействия r_0 согласно формулам (14)–(16) имеем

$$r_0 = \rho^* + \varsigma. \quad (23)$$

Непосредственный расчет для прямоугольной потенциальной ямы шириной L дает следующие значения для этих параметров:

$$\varsigma = L, \quad \rho^* = -\frac{1}{2}L, \quad r_0 = \frac{1}{2}L. \quad (24)$$

Таким образом, уже в случае простейшего одномерного потенциала знак коэффициента при квадратичном по k члене в полюсной части коэффициента прохождения при малых энергиях оказывается аномальным (отрицательным) по отношению к трехмерному случаю.

Обратимся к исследованию особенностей пропускания в резонансе. На рис. 3 для иллюстрации представлены зависимости пропускания от энергии для набора U_w для обращенного резонансно-туннельного диода, показанного на вставке рис. 1

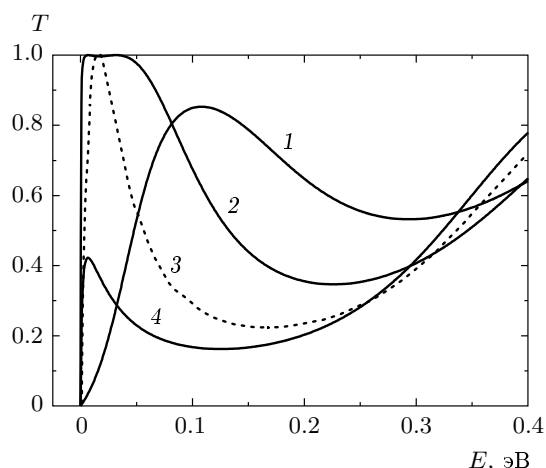


Рис. 3. Зависимости пропускания T от энергии падающего электрона E для $U_w = 0.200$ (1), 0.285 (2), 0.350 (3), 0.390 (4) эВ

($U_b = 0,2$ эВ, $h_w = 50$ Å, $h_b = 15$ Å). Из графиков видно, что в окрестности точки коллапса имеется широкая область энергий (от 4 до 40 мэВ для кривой 2), в которой пропускание близко к единице. Фактически, в этом диапазоне энергий структура ведет себя как безотражательная.

С ростом порядковых номеров состояний, выходящих в непрерывный спектр, подбарьерные резонансы проявляются более отчетливо, увеличивается диапазон глубин ям, в котором имеется единичное пропускание, увеличивается диапазон изменений E_{max} . Кроме большого перепада между максимумом и минимумом пропускания, для экспериментального наблюдения желательно, чтобы значение E_{max} было достаточно велико — много больше энергии тепловых флуктуаций. Все это свидетельствует в пользу выбора глубин и ширин ям, при которых наблюдаются резонансы высоких порядков. Но следует иметь в виду, что при этом в ямах имеются локализованные состояния. В случае их заселения электронами сформируется встроенное электрическое поле, которое может существенно исказить потенциальный профиль.

При соответствующем легировании однобарьерной гетероструктуры можно добиться формирования квантовых ям по его краям за счет встроенных кулоновских полей (подобно тому, как происходит формирование двумерного электронного газа на гетеропереходе) и наблюдать подбарьерные резонансы в системе с единственным барьером.

В случае более сложных структур на резонансной диаграмме появляются новые качественные осо-

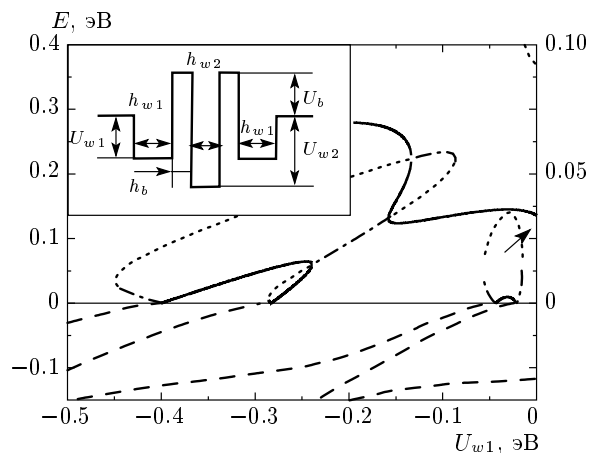


Рис. 4. Положение экстремумов пропускания (сплошные линии — $T_{max} = 1$, штрихпунктирные — $T_{max} < 1$, пунктирные — E_{min}) и энергий размерного квантования (штриховые) как функций глубины крайних квантовых ям U_{w1}

бенности. На рис. 4 приведен пример такой диаграммы для структуры, изображенной на вставке ($h_{w1} = h_{w2} = 50$ Å, $h_b = 8$ Å, $U_b = 0.2$ эВ, $U_{w2} = -0.2$ эВ), в которой имеется дополнительные, по отношению к инвертированной резонансно-туннельной гетероструктуре, квазистационарные состояния, связанные с наличием дополнительной квантовой ямы в барьере. Как следует из рис. 4, при монотонном изменении параметров системы линия резонанса неединичной прозрачности, образовавшегося в результате коллапса двух резонансов с единичной прозрачностью может расщепиться на две линии, соответствующие единичным резонансам. При дальнейшем изменении параметров системы один из образовавшихся резонансов с единичной прозрачностью притягивается к лежащему выше по энергии единичному резонансу и испытывает с ним коллапс. Заметим однако, что структура особых точек на резонансной диаграмме, выявленная нами выше при анализе однобарьерной структуры, сохраняется и для более сложных систем. Так, в точке коллапса (в тройной точке) в непрерывном спектре всегда встречаются две линии резонансов с $T_{max} = 1$ и одна линия резонанса с $T_{max} < 1$.

Существенно, что коллапс резонансов имеет место только для симметричных систем. В качестве примера на рис. 5 приведена диаграмма для несимметричной инвертированной резонансно-туннельной гетероструктуры в которой $h_{w1} = 50$ Å, $h_{w2} = 55$ Å. Хорошо видно, что даже незначительный дисбаланс параметров ям (поряд-

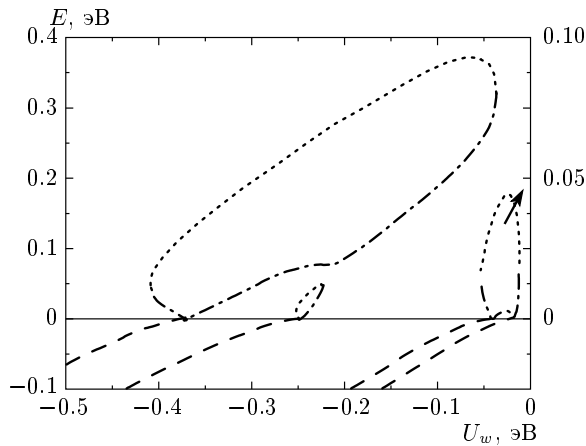


Рис. 5. Положения энергий размерного квантования (штриховые линии), неединичных максимумов (штрихпунктирные) и минимумов (пунктирные) пропускания как функции глубины квантовой ямы U_w для несимметричного инвертированного резонансно-туннельного диода

ка 10 %) приводит к качественному изменению структуры диаграммы: исчезновению резонансов единичной прозрачности и тройных точек. В этом случае локализованное состояние при выходе в непрерывный спектр превращается в неединичный максимум пропускания, а не в резонанс единичной прозрачности, как в симметричной системе. При этом топология диаграммы в окрестности точки выхода локализованного состояния в непрерывный спектр становится подобной топологии резонансной диаграммы для потенциального барьера, к которому только с одной стороны примыкает квантовая яма.

Рассмотрим распределение электронной плотности в инвертированной резонансно-туннельной структуре. Непосредственный расчет показывает, что распределения квадрата амплитуды волновых функций в структуре для резонансных состояний с единичным пропусканием для четных и нечетных квазистационарных состояний, образующих дублет, практически идентичны и симметричны (линия 1 на вставке рис. 6). При слиянии двух резонансов в неединичный максимум волновая функция становится существенно асимметричной (линии 2 и 3 на вставке рис. 6). Для количественной оценки эффекта разрушения симметрии может быть использован коэффициент асимметрии η :

$$\eta = \left| \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} \right|, \quad (25)$$

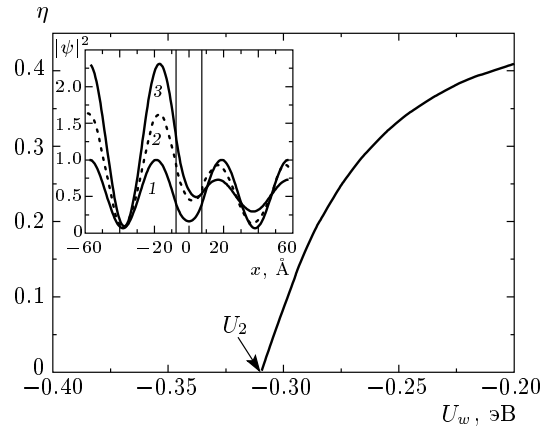


Рис. 6. Зависимости коэффициента асимметрии от глубины квантовой ямы U_w для инвертированного резонансно-туннельного диода; на вставке показаны распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ при $U_w = 0.20$ (1), 0.28 (2), 0.35 (3) эВ

где $p_{1,2}$ — интегральные вероятности обнаружения туннелирующего электрона соответственно в первой и второй квантовых ямах.

На рис. 6 изображена зависимость параметра асимметрии от глубины квантовых ям для симметричной инвертированной резонансно-туннельной гетероструктуры со следующим набором параметров: $U_b = 0.2$ эВ, $h_{w1} = h_{w2} = 50$ Å, $h_b = 15$ Å. На рис. 6 U_2 — точка коллапса резонансов. Из графика видно, что в области параметров квантовой структуры, где имеются два отдельных резонанса с единичной прозрачностью, параметр η равен нулю. Начиная с точки коллапса и далее в области, где остается только один резонанс с прозрачностью $T_{max} < 1$, параметр η монотонно растет от нуля. Такое поведение параметра асимметрии аналогично поведению параметра порядка в системе, испытывающей фазовый переход II рода.

Заметим также, что в отличие от случая двухбарьерной структуры (резонансно-туннельный диод) при подбарьерном резонансе нет роста амплитуды волновой функции в структуре. Таким образом, в рассматриваемой структуре не происходит накопления заряда, что может благоприятно отразиться на динамических свойствах приборов, основанных на эффекте подбарьерного туннелирования.

Такое поведение электронной плотности в резонансе более типично для систем с ИР. Рассмотрим структуру с взаимодействующими ИР, которая получается из структуры, изображенной на вставке рис. 1, при обращении в нуль высоты барьера U_b .

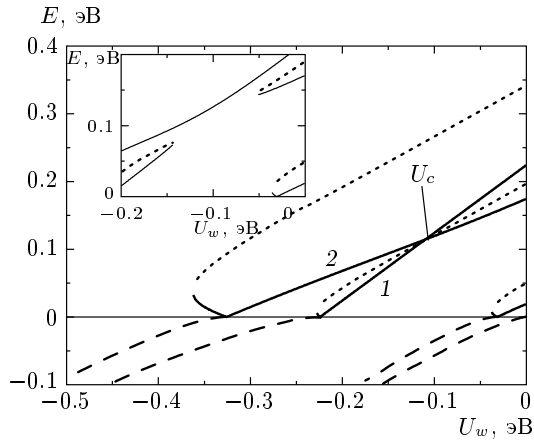


Рис. 7. Положения энергий размерного квантования (штриховые линии), единичных максимумов (сплошные) и минимумов (пунктирные) пропускания как функций глубины квантовой ямы U_w в системе из двух квантовых ям

Резонансная диаграмма для такой структуры приведена на рис. 7 ($h_{w1} = h_{w2} = 50 \text{ \AA}$, $h_b = 15 \text{ \AA}$). Нетрудно убедиться, что на линии 1 выполняется условие ИР $k_2 l = n\pi$, где в качестве l фигурирует ширина квантовой ямы h_w . Поскольку ямы одинаковы, отсутствие отражения от первой ямы автоматически означает отсутствие отражения от второй ямы и от всей структуры в целом. Линия 2 — это также линия ИР, но связанного с интерференцией волн, отраженных от всех четырех границ. Соответственно величина l при этом превышает h_w . В точке U_c линии ИР 1 и 2 пересекаются (имеет место кроссинг состояний). Таким образом, коллапс резонансов в системе с ИР отсутствует. При асимметричном искажении структуры кроссинг исчезает, остается только один резонанс с единичной прозрачностью, соответствующий большей энергии (вставка на рис. 7, $h_{w1} = 50 \text{ \AA}$, $h_{w2} = 55 \text{ \AA}$).

Несмотря на качественное сходство с ИР в распределении электронной плотности в резонансе (отсутствие накопления заряда), подбарьерные резонансы напрямую не связаны с наличием отражения на скачках потенциала. Чтобы доказать это, рассмотрим структуру с плавным профилем потенциала. Рельеф ямы выберем таким, чтобы в отсутствие барьера не существовало надъямных резонансов и зависимость пропускания от энергии являлась монотонно возрастающей функцией:

$$U(x) = \frac{U_0}{\text{ch}^2(\alpha x)} + \beta\delta(x), \quad (26)$$

где α — параметр, определяющий ширину ямы,

β — мощность δ -барьера. Первое слагаемое в правой части (26) соответствует потенциалу, который при определенных значениях параметров становится безотражательным [9, 26].

Следуя [9], сделаем замену переменных $\xi = \text{th}(\alpha x)$ и введем следующие обозначения:

$$\varepsilon = -\frac{i}{\hbar\alpha}\sqrt{2mE}, \quad s = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 - \frac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}} \right).$$

С помощью подстановки $\psi = (1 - \xi^2)^{\varepsilon/2} w(\xi)$ исходное уравнение Шредингера с потенциалом (26) слева и справа от барьера можно свести к гипергеометрическому.

Общее решение уравнения представляет собой линейную комбинацию двух независимых частных решений:

$$\psi_{1,2} = (1 - \xi^2)^{\varepsilon/2} \left(C_{1,3} f_1 \left(\frac{1 - \xi}{2} \right) + C_{2,4} f_2 \left(\frac{1 - \xi}{2} \right) \right),$$

где C_1 и C_2 соответствуют случаю $x < 0$, а C_3 и C_4 — случаю $x > 0$,

$$f_1 \left(\frac{1 - \xi}{2} \right) = F \left[\varepsilon - s, \varepsilon + s + 1, \varepsilon + 1, \frac{1 - \xi}{2} \right],$$

$$f_2 \left(\frac{1 - \xi}{2} \right) = \left(\frac{1 - \xi}{2} \right)^{-\varepsilon} F \left[s + 1, -s, 1 - \varepsilon, \frac{1 - \xi}{2} \right],$$

$F[a, b, c, z]$ — гипергеометрическая функция второго рода [27].

Асимптотический вид волновой функции при $x \rightarrow -\infty$ находится при помощи линейного преобразования гипергеометрических функций [27] от аргумента $(1 - \xi)/2$ к аргументу $(1 + \xi)/2$. При $x \rightarrow -\infty$ ($\xi \rightarrow -1$)

$$(1 + \xi) \sim e^{2\alpha x},$$

а при $x \rightarrow \infty$ ($\xi \rightarrow 1$)

$$(1 - \xi) \sim e^{-2\alpha x}.$$

Таким образом, на бесконечности слева от барьера точное решение имеет асимптотику, являющуюся суперпозицией прошедшей и падающей волн. При $x \rightarrow \infty$

$$\psi_2 \rightarrow 2^\varepsilon (C_3 e^{ikx} + C_4 e^{-ikx}).$$

При $x \rightarrow \infty$ существует только прошедшая волна ($\sim e^{ikx}$), поэтому $C_4 = 0$.

Используя граничные условия в точке $x = 0$

$$\begin{cases} \psi_1(-0) = \psi_2(+0), \\ \psi_1'(-0) = \psi_2'(+0) - \beta\psi_2(+0), \end{cases} \quad (27)$$

выражаем C_2 и C_3 через C_1 .

Вероятность прохождения через барьер определяется как отношение квадратов модулей амплитуд прошедшей и падающей волн, являющихся асимптотиками точного решения на бесконечности, и после ряда преобразований может быть представлена в виде

$$T = \left[1 + \left(\frac{\sin(\pi s)}{\operatorname{sh}(\pi \zeta)} - \frac{\beta}{\zeta} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (28)$$

где $\zeta = k/\alpha$.

При резонансе коэффициент пропускания равен единице. Используя выражение (28) для определения положения резонанса, получаем уравнение

$$\operatorname{sh}(\pi \zeta) = \frac{\sin(\pi s)}{\beta} \zeta. \quad (29)$$

Для существования у данного уравнения нетривиального решения необходимо, чтобы график правой части лежал выше касательной к гиперболическому синусу, проведенной в точке $\zeta = 0$, что эквивалентно условию $\sin(\pi s) \geq \pi \beta$. Таким образом, резонансы наблюдаются в системе при значениях глубины ямы $|U_0|$, лежащих в диапазоне от

$$\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \left[4 \left(-\frac{\arccos(\pi \beta)}{\pi} + 2n - 1 \right)^2 - 1 \right]$$

до

$$\frac{\alpha^2 \hbar^2}{8m} \left[4 \left(\frac{\arccos(\pi \beta)}{\pi} + 2n + 1 \right)^2 - 1 \right],$$

где n — натуральное число. Заметим, что если мощность δ -барьера β будет больше π^{-1} , то в системе не будет существовать резонансных состояний ни при каких значениях глубины ямы U_0 .

Чтобы получить выражение для волновой функции при $E < 0$, необходимо заменить в показателях экспонент k на $i\kappa$. Используя условия убывания волновой функции на бесконечности, после ряда упрощений получаем уравнение для определения энергии связанных состояний:

$$\varepsilon \sin(\pi s) = \beta \sin(\pi \varepsilon). \quad (30)$$

Исчезновение связанного состояния соответствует случаю $\varepsilon \rightarrow 0$. При этом из формулы (30) получим, что $\sin(\pi s) = \pi \beta$. Данное уравнение совпадает с условием, определяющим положение границы области существования резонансов.

Как следует из уравнения (29), при значении глубины ямы $|U_0|$, соответствующем возникновению нового локализованного состояния, происходит каче-

ственная модификация формы графика зависимости коэффициента пропускания от энергии. Возникновение локализованного состояния с ростом $|U_0|$ сопровождается появлением резонансного максимума с единичной прозрачностью в непрерывном спектре. При дальнейшем увеличении глубины ямы энергия резонансного максимума увеличивается. Начиная с некоторого значения U_0 , энергия подбарьерного резонанса начинает уменьшаться и при достижении нуля резонанс переходит во второе локализованное состояние. Такой тип поведения резонанса аналогичен трансформации локализованного состояния в резонанс в инвертированной резонансно-туннельной структуре при больших мощностях барьера.

Для рассматриваемого потенциала (26) точное выражение для обратной амплитуды рассеяния имеет следующий вид:

$$a = \frac{\zeta}{\zeta + is} \frac{\Gamma^2(-i\zeta)}{\Gamma(-i\zeta - s)\Gamma(-i\zeta + s)} \times \left[1 - i \frac{\beta}{\zeta} \frac{\operatorname{sh}(\pi \zeta)}{\operatorname{sh}(\pi \zeta) + i \sin(\pi s)} \right]. \quad (31)$$

Оставляя в разложении (31) по степеням ik члены не выше второго порядка малости, получим в окрестности точки выхода локализованного состояния с номером n в непрерывный спектр следующие выражения для коэффициентов разложения:

$$a_0 = (-1)^{n-1} \left(\beta - \frac{\sin(\pi s)}{\pi} \right),$$

$$a_1 = (-1)^{n-1} + \left[\pi \operatorname{tg}(\pi s) - 2 \left(\epsilon + \frac{1}{s} + \frac{\Gamma'(s)}{\Gamma(s)} \right) \right] a_0,$$

$$a_2 = (-1)^n \left[-\frac{\beta \pi^2}{3} + 2\pi \operatorname{tg}(\pi s) - 4 \left(\epsilon + \frac{1}{s} + \frac{\Gamma'(s)}{\Gamma(s)} \right) \right],$$

где ϵ — постоянная Эйлера ($\epsilon \approx 0.5772$). Для определения параметров потенциала применим алгоритм экстракции параметров потенциала (20)–(23). В результате получим

$$\kappa_0 = (-1)^{n-1} \left(\beta - \frac{\sin(\pi s)}{\pi} \right),$$

$$\varsigma = (-1)^{n-1} \left[\pi \operatorname{tg}(\pi s) - 2 \left(\xi + \frac{1}{s} + \frac{\Gamma'(s)}{\Gamma(s)} \right) \right],$$

$$\rho^* = (-1)^n \frac{\beta \pi^2}{3}.$$

Таким образом, двум соседним локализованным состояниям, образующим дублет, соответствуют «эффективные размеры потенциалов» ρ^* с

различными знаками. В результате в рассматриваемой системе никогда не наблюдается коллапс резонансов.

Как известно, в силу подобия уравнения Шредингера в квантовой механике волновому уравнению в оптике имеется тесная аналогия квантовомеханических и оптических явлений [28–30]. Так, резонансное туннелирование обычно сопоставляют явлению резонансной прозрачности интерферометра Фабри–Перро, которое имеет место при равенстве расстояния между зеркалами целому числу полуволн. В резонансно-туннельной структуре это условие соответствует (с точностью до фазового сдвига при отражении от барьера) условию возникновения квазистационарного состояния для электронных волн аналогично тому, как связанные состояния в квантовой яме можно описать как результат интерференции волн, отраженных от барьеров. Однако природа связанных состояний в квантовой механике носит более общий характер и не обязательно связана с интерференцией волн. Примером может служить связанное состояние в яме в виде δ -функции. Ситуация, когда в потенциале (26) $U_0 > 0$ и $\beta < 0$, соответствует прохождению частицы через потенциальный барьер, разделенный пополам δ -ямой. В этом случае зависимость пропускания от энергии имеет следующий вид:

$$T = \left[1 + \left(\frac{\operatorname{ch}(\pi\tilde{s})}{\operatorname{sh}(\pi\zeta)} + \frac{\beta}{\zeta} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (32)$$

где

$$\tilde{s} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8mU_0}{\alpha^2 \hbar^2} - 1}.$$

Из формулы (32) видно, что зависимость пропускания от энергии имеет резонансные особенности при выполнении условия $\zeta \operatorname{ch}(\pi\tilde{s}) = -\beta \operatorname{sh}(\pi\zeta)$, что соответствует резонансу на квазистационарном состоянии в δ -яме. Таким образом, первичным фактором при возникновении резонансного туннелирования служит именно наличие квазистационарного состояния, а не интерференция волн.

Как отмечено во Введении, теория матрицы рассеяния S , связывающей начальное и конечное состояния квантовой системы, позволяет с единой позиции описывать как резонансы, так и связанные состояния. Для достаточно широкого класса потенциалов, убывающих быстрее экспоненты, ранее было показано [9, 11–14], что полюсы S -матрицы соответствуют брейт-вигнеровским резонансам при $\operatorname{Im} k < 0$, $\operatorname{Im} k \ll \operatorname{Re} k$ и связанным состояниям при $\operatorname{Im} k > 0$, где k — функция, являющаяся ана-

литическим продолжением волнового вектора в комплексную плоскость. Обозначим амплитуды падающих и отраженных волн в левом (правом) полупространствах соответственно A_{in} (B_{in}) и A_{out} (B_{out}). В одномерном случае для одноканального рассеяния S -матрица выражается через амплитуды рассеяния назад r (коэффициент отражения) и вперед t (коэффициент прохождения):

$$\begin{pmatrix} A_{out} \\ B_{out} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_{in} \\ B_{in} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{in} \\ B_{in} \end{pmatrix}, \quad (33)$$

где штрихованные величины относятся к данным рассеяния для волны, падающей слева. Действительные части полюсов матрицы рассеяния изображены на рис. 1 линиями S_n . Видно, что в этом случае данные о полюсе нельзя использовать для описания резонанса.

3. ТРЕХБАРЬЕРНАЯ РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНАЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРА

Условия существования коллапса резонансов — наличие квазистационарных состояний, генетически связанных со связанными состояниями, и возможность управлять в широких пределах их положением на энергетической оси (менять их взаимное расположение), варьируя параметры системы, — выполняются также и в трехбарьерных резонансно-туннельных структурах. При этом толщина центрального барьера определяет, в основном, расстояние между резонансами по энергии, а толщина крайних барьеров — ширину резонансов (квазистационарных уровней квантовой системы). Для упрощения расчетов, не теряя общности полученных выводов, рассмотрим симметричную трехбарьерную структуру с барьерами в виде δ -функций.

Решая уравнение Шредингера для симметричной системы (см. вставку на рис. 9) длины d , состоящей из трех δ -барьеров мощности α , β и α , находим зависимость пропускания T от энергии падающей частицы E (при $E > 0$):

$$T = \frac{1}{1 + \Lambda [g + \sin(kd + \phi)]^2}, \quad (34)$$

где

$$\Lambda = \frac{4\tilde{\alpha}^2}{k^6} (k^2 + \tilde{\alpha}^2) (k^2 + \tilde{\beta}^2),$$

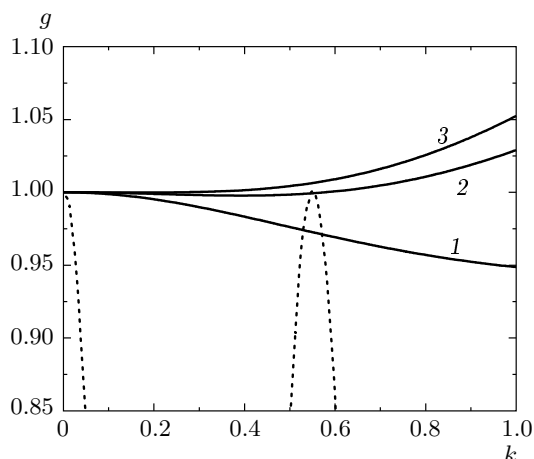


Рис. 8. Графики функций правой (пунктирные линии) и левой (сплошные) частей уравнения (35) при различных значениях отношения мощностей центрального и крайнего барьеров: $\beta = 2\alpha$ (1), 4α (2), 8α (3)

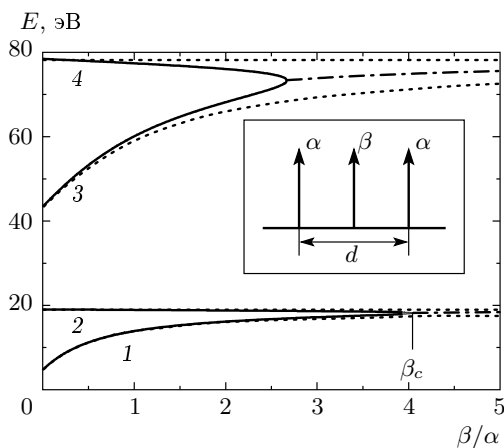


Рис. 9. Положение максимумов пропускания (сплошные линии — $T_{max} = 1$, штрихпунктирные — $T_{max} < 1$) и действительных частей полюсов матрицы рассеяния (пунктирные) как функция отношения мощностей центрального и крайнего барьеров

$$g = \frac{\tilde{\beta}}{2\tilde{\alpha}} \frac{2\tilde{\alpha}^2 + k^2}{\sqrt{(\tilde{\alpha}^2 + k^2)(\tilde{\beta}^2 + k^2)}}$$

$$\phi = \arctg \frac{k^2 - \tilde{\alpha}\tilde{\beta}}{k(\tilde{\alpha} + \tilde{\beta})}, \quad \tilde{\alpha} = \frac{m\alpha}{\hbar^2}, \quad \tilde{\beta} = \frac{m\beta}{\hbar^2}.$$

Для значений энергии, соответствующих резонансам с единичным пропусканием, из формулы (34) получаем

$$g = -\sin(kd + \phi). \tag{35}$$

Данное уравнение имеет решения, если функция $g = g(k)$ принимает значения из диапазона от -1 до 1 . Анализируя поведение функции $g(k)$, отметим, что при k , равном нулю, g равна единице, при возрастании k имеет минимум, меньший единицы, а при $k \rightarrow \infty$ данная функция имеет горизонтальную асимптоту, равную $\beta/2\alpha$. Таким образом, если мощность среднего барьера не превосходит удвоенной мощности крайних, то в системе существует бесконечное число резонансов. В противном случае число резонансов в системе конечно, и при возрастании мощности среднего барьера оно будет уменьшаться. На рис. 8 приведены графики правой и левой частей уравнения (35) как функций от k при различных значениях отношения мощностей центрального и крайнего барьеров (в расчетах мощность крайнего барьера $\tilde{\alpha}$ полагалась равной 1 \AA^{-1}). Учитывая, что функция правой части слабо зависит от значений α и β , на рис. 8 приведен график только для случая когда $\beta = 2\alpha$. Из рис. 8 следует, что при малой мощности центрального барьера существует два решения (кривая 1), при большой мощности кривые не пересекаются, резонансы с единичной прозрачностью отсутствуют (кривая 3). При $\beta = 4\alpha$ кривые касаются, это соответствует точке коллапса.

Для исследования поведения резонансов при изменении параметров задачи будем использовать диаграммы, представляющие зависимость резонансной энергии от отношения мощностей центрального и крайнего барьеров β/α . Большие значения этого параметра соответствуют широким и/или близко расположенным квазистационарным уровням, а малые значения — узким и/или сильно расщепленным уровням. На рис. 9 представлены подобные диаграммы для случая, когда расстояния между крайними барьерами $d = 10 \text{ \AA}$, мощность крайних барьеров $\tilde{\alpha}$ полагалась равной 1 \AA^{-1} . Сплошные линии 1–4 показывают положения соответствующих квазистационарных состояний (с $T = 1$) в непрерывном спектре. Из графиков видно, что при увеличении мощности среднего барьера резонансы притягиваются друг к другу и, наконец, сливаются в одну резонансную кривую с пропусканием, меньшим единицы (точка β_c), т. е. происходит коллапс резонансов — явление, аналогичное наблюдаемому в инвертированных резонансно-туннельных гетероструктурах. Правее точки коллапса на резонансной диаграмме значение коэффициента $g(k)$ по модулю больше единицы и выражение в квадратных скобках в правой части (34) не может обратиться в нуль.

Для изучения поведения резонансов в окрестности точки коллапса исследуем формулу (34) в пределе, соответствующем большим значениям волнового вектора k . При больших k слияние резонансов соответствует тому, что отношение мощности центрального барьера к удвоенной мощности крайнего стремится к единице снизу. Разлагая синус в ряд в окрестности точек максимума, равных $\pi + 2\pi n$, где n — произвольное натуральное число или нуль, и учитывая только члены до второго порядка малости включительно, можно получить простое выражение для пропускания в окрестности точки коллапса:

$$T = \frac{\Gamma^4}{\left[(E - E_0)^2 - \Delta^2\right]^2 + \Gamma^4}, \quad (36)$$

где

$$\Delta^2 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4E_0}{d^2} \mu, \quad \Gamma^4 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{8E_0^3}{\tilde{\alpha}^2 d^4},$$

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2md^2} (\pi + 2\pi n), \quad \mu = 1 - \frac{\beta}{2\alpha}.$$

Следует отметить наглядный физический смысл входящих в формулу (36) переменных. Параметр Δ — это расстояние между соседними резонансами, E_0 — энергия минимума пропускания, расположенного между резонансами, Γ — полуширина резонанса. При увеличении асимметрии между центральным и крайними барьерами соседние резонансы начинают сближаться друг с другом, что выражается в уменьшении величины Δ . Заметим, что при смене знака μ параметр Δ становится мнимой величиной и происходит качественная модификация формы графика биквадратного полинома, стоящего в знаменателе (36). Число экстремумов полинома уменьшается с двух до одного, что отражает процесс слияния резонансов. При этом E_0 соответствует энергии образовавшегося неединичного максимума. В самой точке коллапса выражение для прозрачности имеет вид

$$T = \frac{\Gamma^4}{(E - E_0)^4 + \Gamma^4},$$

т. е. существенно отличается от формулы Брейта–Вигнера (2).

Таким образом, формула (36) позволяет корректно описать поведение перекрывающихся резонансов в окрестности точки коллапса, принимая в качестве исходных данных непосредственно измеряемые в ходе эксперимента параметры: расстояние между резонансами и полуширина резонанса.

На рис. 9 пунктирная линия показывает зависимость действительной части полюса S -матрицы от

параметра β/α . Как следует из рис. 8, в трехбарьерных резонансно-туннельных гетероструктурах при малых мощностях центрального барьера полюсы матрицы рассеяния и резонансы практически совпадают (так, как это имеет место в двухбарьерных резонансно-туннельных структурах). При дальнейшем увеличении асимметрии мощностей центрального и крайнего барьеров это соответствие нарушается. Как отмечено во Введении, применимость теории матрицы рассеяния для описания резонансов на квазидискретных уровнях ограничена случаем, когда ширина резонансного пика много меньше расстояния между соседними резонансами [9, 11]. В окрестности же точки коллапса, где ширина резонансного пика сравнима с расстоянием между соседними резонансами, это условие заведомо невыполнимо. Поэтому коллапс резонансов не может быть описан на языке полюсов матрицы рассеяния.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренный в настоящей работе коллапс резонансов допускает аналогию с исследованным в модели Калдейры–Легетта [31, 32] квантовым фазовым переходом. В случае модели Калдейры–Легетта, описывающей пространственно-ограниченную квантовую систему с диссипацией, было показано, что диссипация может подавлять туннелирование и приводить к нарушению симметрии распределения электронной плотности в геометрически симметричной системе двух туннельно-связанных квантовых ям, ограниченных непроницаемыми барьерами [33]. Однако механизм этого явления может быть также связан с уширением уровней электронных состояний вследствие диссипации и их слиянием при условии, что величина уширения превышает начальное расстояние между уровнями в отсутствие диссипации [34]. В симметричной системе каждый из уровней обладает определенной четностью. Поэтому слияние соседних симметричного и антисимметричного состояний с неизбежностью приводит к нарушению симметрии распределения электронной плотности. При такой трактовке определяющим фактором данного механизма «квантового фазового перехода» служит именно уширение уровней энергии. Но уширение уровней не обязательно обусловлено диссипацией. Уширенные уровни в квантовой механике связаны с квазистационарными состояниями, в которых частица имеет возможность туннелировать в континуум. В рассеянии подобные состояния проявляют себя как резонансы.

Полученные в настоящей работе результаты показывают, что некоторые особенности открытых квантовых систем, а именно подавление туннелирования и нарушение симметрии распределения электронной плотности, которые обычно связывают со сложным многочастичным характером диссипативного взаимодействия открытых квантовых систем с окружением, могут проявлять себя уже в рамках одночастичного описания в относительно простых квантовых системах, таких как резонансно-туннельные структуры, роль окружения в которых играет континуум электронных состояний. В эксперименте нарушение симметрии в геометрически симметричной системе проявляет себя как слияние двух резонансов единичной прозрачности в один с прозрачностью, меньшей единицы (это необычно, поскольку ранее считалось, что прозрачность симметричной системы в резонансе должна быть равна единице). Поэтому мы и используем термин «коллапс». В точке коллапса система становится асимметричной в результате возникновения асимметрии распределения электронной плотности. Параметр асимметрии ведет себя подобно параметру порядка при фазовом переходе второго рода. В многочастичной задаче о квантовой системе с диссипацией [34] нарушение симметрии распределения электронной плотности может быть также объяснено как разрушение туннелирования, связанное со сбоем фазы волновой функции из-за взаимодействия с окружением. По-видимому, в квантовой системе с диссипацией существуют оба эффекта: уширение уровня и сбой фазы. Подобная ситуация имеет место в спиновых системах, взаимодействующих с окружением, релаксация которых характеризуется двумя временами: продольной и поперечной релаксации. Относительный вклад каждого из этих механизмов в возникновение асимметрии распределения волновой функции требует дополнительного исследования.

Существенное отличие описанного нами эффекта от случая нарушения симметрии в квантовой системе с диссипацией связано с тем, что в последнем случае квантовая система сама по себе замкнута. В нашей же ситуации роль инфинитного характера квантовой системы, который проявляется в наличии континуума непрерывных состояний, принципиальна, поскольку в нашем случае переход с нарушением симметрии связан с изменением ширины уровня квазистационарного состояния из-за взаимодействия с континуумом. В замкнутой же системе все уровни (без учета диссипации) имеют ширину, равную нулю по определению.

Другой важный момент связан с тем, что пере-

ход с нарушением симметрии возникает при вполне определенном виде граничных условий — соответствующих волне, падающей слева или же справа. При этом до точки коллапса в резонансе с единичной прозрачностью распределение электронной плотности в структуре строго симметрично. После точки коллапса характер асимметрии определяется направлением падения носителей: максимум распределения электронной плотности всегда формируется со стороны падения волны.

Заметим, что рассмотренный в настоящей работе коллапс резонансов принципиально не может быть описан на языке полюсов матрицы рассеяния. Полюс матрицы рассеяния соответствует резонансу, только если его мнимая часть, определяющая ширину резонанса, много меньше, чем расстояние между другими полюсами и резонансами. Коллапс резонансов происходит тогда, когда расстояние между резонансами по энергии становится сравнимо с шириной резонанса.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки. Авторы признательны за полезные обсуждения Ю. В. Копаеву, И. В. Токатлы и Д. Е. Хмельницкому.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
2. B. Ricco and M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. B* **29**, 1970 (1984).
3. *Resonant Tunneling in Semiconductors*, ed. by L. L. Chang, E. E. Mendez, and C. Tejedor, Plenum Press, New York (1991).
4. В. П. Драгунов, И. Г. Неизвестный, В. А. Гридчин, *Основы наноэлектроники*, Изд-во НГТУ, Новосибирск (2004).
5. F. Capasso, K. Mohamed, and A. Cho, *IEEE J. Quant. Electron.* **22**, 1853 (1986).
6. Е. О. Кейн, *Туннельные явления в твердых телах*, Мир, Москва (1973).
7. I. V. Tokatly, A. G. Tsibizov, and A. A. Gorbatsevich, *Phys. Rev. B* **65**, 165328 (2002).
8. Л. И. Шифф, *Квантовая механика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1959).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2002).

10. Л. Д. Фаддеев, УМН **14**, 57 (1959).
11. В. де Альфаро, Т. Редже, *Потенциальное рассеяние*, Мир, Москва (1966).
12. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).
13. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
14. Дж. Тейлор, *Квантовая теория нерелятивистских столкновений*, Мир, Москва (1975).
15. E. Wigner and G. Breit, *Phys. Rev.* **50**, 1191 (1936).
16. Н. М. Nussenzveig, *Nucl. Phys.* **11**, 499 (1959).
17. Т. В. Bahder, С. А. Morrison, and J. D. Bruno, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 14 (1987).
18. Р. J. Price, *Phys. Rev. B* **38**, 1994 (1988).
19. И. С. Шапиро, в сб. *Проблемы современной ядерной физики*, под ред. В. М. Колыбасова, Наука, Москва (1971), с. 273.
20. Т. С. Белозерова, В. К. Хеннер, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **29**, 148 (1998).
21. Wim Vanroose, *Phys. Rev. A* **64**, 062708 (2001).
22. Т. Ando and S. Mori, *Surf. Sci.* **113**, 124 (1982).
23. Т. Ando, S. Wakahara, and H. Akera, *Phys. Rev. B* **40**, 11609 (1989).
24. R. Balian, D. Bessis, and G. A. Mezincescu, *Phys. Rev. B* **51**, 17624 (1995).
25. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов: метод обратной задачи*, Наука, Москва (1980).
26. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, Москва (1974).
27. М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами*, Наука, Москва (1979).
28. L. P. Kouwenhoven, B. J. van Wees, F. W. J. Hekking et al., in *Localization and Confinement of Electrons in Semiconductors*, ed. by F. Kuchar, H. Heinrich, and G. Bauer, Springer-Verlag, Berlin (1990), p. 77.
29. С. А. Ахманов, С. Ю. Никитин, *Физическая оптика*, Изд-во МГУ, Москва (1998).
30. *Analog in Optics and Micro Electronics*, ed. by W. van Haeringen and D. Lenstra, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (1990).
31. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211 (1981).
32. A. J. Legget, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, Matthey P. A. Fisher, Anupam Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
33. A. J. Bray and M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1545 (1982).
34. К. Fujikawa, S. Iso, M. Sasaki, and H. Suzuki, *Phys. Rev. B* **46**, 10295 (1992).