# Wyznaczanie charakterystyki prądowo-napięciowej diody rezonansowo-tunelowej (RTD) oraz zastosowanie przybliżenia adiabatycznego do wyznaczenia zjawiska kwantyzacji konduktancji w kwantowym kontakcie punktowym (QPC).

P. Wójcik

10 czerwca 2021; ostatnia aktualizacja 13 kwietnia 2023

## 1 Wstęp

Zadanie skład się z dwóch części i dotyczy symulacji transportu elektronowego przez dwa nanourządzenia:

- diodę rezonansowo-tunelową,
- kwantowy kontakt punktowy w nanodrucie 2D, w przybliżeniu adiabatycznym.

Obie metody oparte są na obliczeniach współczynnika transmisji, który określa prawdopodobieństwo tego, że elektron wstrzyknięty do lewego kontaktu opuści nanourządzenie przez prawy kontakt. Obliczenia współczynnika transmisji wykonane zostaną w oparciu o metodę macierzy transferu w 1D.

## 2 Metoda macierzy transferu

Rozważmy równanie Schrödingera 1D dla układu otwartego, z masą elektronu zależną od położenia

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m^*(z)}\frac{d}{dz}\psi(z) + U(z)\psi(z) = E\psi(z), \tag{1}$$

gdzie $m^*(z)$ określa masę efektywną w położeniu $z$, zaś $U(z)$ to profil energii potencjalnej. Obszar nanourządzenia $[0, L]$, w którym zdefiniowany jest potencjał podzielmy na $N$ części, tak małych, aby w każdym przedziale $[z_{n-1}, z_n]$ potencjał $U(z)$ i masę elektronu $m^*(z)$ można było traktować jako stałe. Równanie Schrödingera dla obszaru $[z_{n-1}, z_n]$ przyjmuje postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi_n(z) + U_n\psi_n(z) = E\psi_n(z), \tag{2}$$

a jego rozwiązaniem w tym obszarze jest funkcja falowa w postaci

$$\psi_n(z) = A_n e^{ik_n z} + B_n e^{-ik_n z}, \tag{3}$$

gdzie

$$k_n = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_n^*(E - U_n)}, \tag{4}$$

natomiast $A_n$ i $B_n$ są amplitudami fal płaskich biegnących odpowiednio w prawo i w lewo.
Zauważmy jednak, że funkcja falowa na granicy każdego z obszarów musi być ciągła, a zatem

$$\psi_n(z_n) = \psi_{n+1}(z_n). \tag{5}$$

Ciągły musi być również strumień gęstości prawdopodobieństwa

$$j_n = j_z(z_n) = \frac{i\hbar}{2m_n}\left[\psi(z_n)\frac{d\psi^*(z)}{dz}\bigg|_{z=z_n} - \psi^*(z_n)\frac{d\psi(z)}{dz}\bigg|_{z=z_n}\right], \tag{6}$$

co prowadzi do warunku ciągłości

$$\frac{1}{m_n}\frac{d}{dz}\psi_n(z_n) = \frac{1}{m_{n+1}}\frac{d}{dz}\psi_{n+1}(z_n). \tag{7}$$

Stosując warunki ciągłości pomiędzy obszarami $[z_{n-1}, z_n]$ oraz $[z_n, z_{n+1}]$, otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathcal{M}_n \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}, \tag{8}$$

gdzie macierz $\mathcal{M}_n$ nazywamy macierzą monodromii.
Macierz ta jest macierzą kwadratową, której poszczególne elementy to:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{n,11} &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k_{n+1}m_n^*}{k_n m_{n+1}^*}\right)\exp\left(i(k_{n+1}-k_n)z_n\right), \\ \mathcal{M}_{n,12} &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k_{n+1}m_n^*}{k_n m_{n+1}^*}\right)\exp\left(-i(k_{n+1}+k_n)z_n\right), \\ \mathcal{M}_{n,21} &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k_{n+1}m_n^*}{k_n m_{n+1}^*}\right)\exp\left(i(k_{n+1}+k_n)z_n\right), \\ \mathcal{M}_{n,22} &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{k_{n+1}m_n^*}{k_n m_{n+1}^*}\right)\exp\left(-i(k_{n+1}-k_n)z_n\right). \end{aligned} \tag{9}$$

Stosując macierz monodromii kolejno pomiędzy wszystkimi obszarami otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{1\to N} \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix}, \tag{10}$$

gdzie

$$\mathcal{M}_{1\to N} = \mathcal{M}_1\mathcal{M}_2\ldots\mathcal{M}_{N-1}. \tag{11}$$

Zauważmy, że w najbardziej skrajnym lewym obszarze nie ma elektronów odbitych, a zatem $B_N$=0.
Wówczas współczynniki odbicia i transmisji wyrażają się wzorami

$$T = \frac{k_N m_1}{k_1 m_N}\frac{|A_N|^2}{|A_1|^2}, \tag{12}$$

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}, \tag{13}$$

$$\tag{14}$$

Zakładając dodatkowo $A_N$=1 otrzymujemy

$$T = \frac{k_N m_1}{k_1 m_N}\frac{1}{|M_{1\to N,11}|^2}, \tag{15}$$

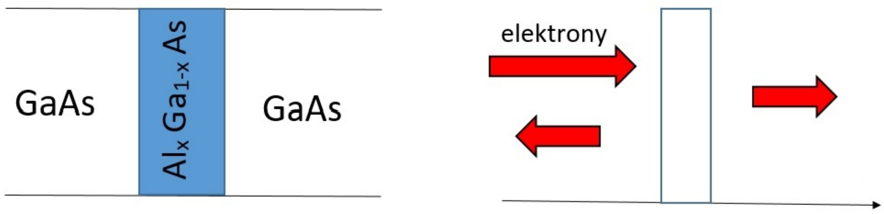
$$R = \frac{|M_{1\to N,21}|^2}{|M_{1\to N,11}|^2}. \tag{16}$$

$$\tag{17}$$

Obliczenia przeprowadzamy zmieniając energię padającego elektronu i otrzymujemy dwie funkcje $R(E)$ oraz $T(E)$ takie, że $T(E) + R(E) = 1$.

## 2.1 Zadania do wykonania

Rozpatrzmy urządzenie przedstawione na rysunku 1. Ponieważ przerwa energetyczna w GaAs rożni się od przerwy energetycznej w AlGaAs, potencjał jaki "widzi" elektron przepływający przez heterostrukturę ma kształt pojedynczej bariery potencjału przedstawionej na rysunku.



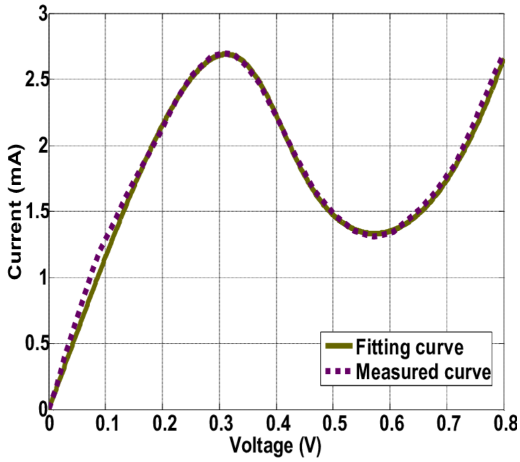

Rysunek 1: Schemat struktury tunelowej GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}$As wraz z efektywnym potencjałem z jakim oddziałuje elektron przepływający przez nanourządzenie.

Załóżmy następujące parametry urządzenia: szerokość warstwy AlGaAs, $d_{AlGaAs} = 5$ nm, masa efektywna w poszczególnych materiałach $m^*_{GaAs} = 0.063m_0$ dla GaAs, oraz $m^*_{AlGaAs} = (0.063 + 0.083x)m_0$ dla $Al_xGa_{1-x}As$. Obliczenia wykonaj dla $x = 0.3$, dla którego wysokość bariery $U = 0.27$ eV.

1. Dla rozpatrywanego urządzenia oblicz współczynniki transmisji oraz odbicia w funkcji energii, zakładając stałą masę efektywną w nanourządzeniu $m^* = m^*_{GaAs} = 0.063$. Wyniki metody numerycznej porównaj z wartościami współczynnika transmisji wyznaczonymi analitycznie.
2. Oblicz współczynnik transmisji oraz odbicia zakładając zmienną masę efektywną różną dla GaAs oraz AlGaAs.

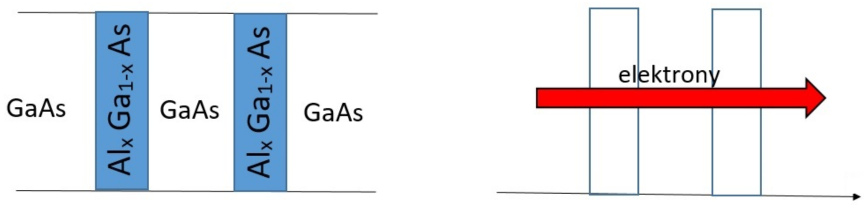
# 3 Dioda rezonansowo-tunelowa

Dioda rezonansowo-tunelowa jest planarnym urządzeniem elektronicznym charakteryzującym się nielinowych zachowaniem prądowo-napięciowych, z charakterystycznym obszarem negatywnego oporu różnicowego - patrz rys. 2




Rysunek 2: Charakterystyka prądowo-napięciowa diody RTD z charakterystycznym obszarem ujemnego oporu różnicowego (NDR - z ang. negative differential resistance).

Typowa struktura RTD przedstawiona została na rys. 3. Zakładając strukturę półprzewodnikową jak na rysunku 3 możemy założyć, że profil potencjału w nanourządzeniu na kształt podwójnej bariery potencjału.




Rysunek 3: Schemat struktury RTD opartej na GaAs/$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ wraz z efektywnym potencjałem z jakim oddziałuje elektron przepływający przez nanourządzenie.

W obliczeniach założymy zmienną od położenia masę efektywną $m^*_{GaAs} = 0.063m_0$ dla GaAs, oraz $m^*_{AlGaAs} = (0.063+0.083x)m_0$ dla $Al_xGa_{1-x}As$. Obliczenia wykonamy dla $x = 0.3$, dla którego wysokość barier $U = 0.27$ eV, szerokość barier $d_{AlGaAs} = 5$ nm oraz szerokość studni kwantowej $d_{GaAs} = 3$ nm.

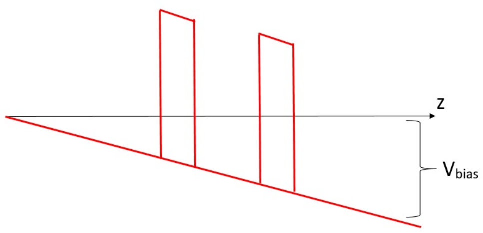
## 3.1 Zadania do wykonania

1. Korzystając w wcześniej opracowanej metody macierzy transferu oblicz współczynnik odbicia oraz transmisji przez rozpatrywany układ. Jaką charakterystyczną cechę transportu kwantowego można dostrzec na wykresie funkcji $T(E)$ ?

2. Oblicz charakterystykę prądowo-napięciową diody RTD korzystając z formuły Tsu-Esakiego

$$j = \frac{em^* k_B T}{2\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty dE_z T(E_z) \ln\left[\frac{1+e^{(\mu_s - E_z)/k_B T}}{1+e^{(\mu_d - eV_{bias} - E_z)/k_B T}}\right], \tag{18}$$

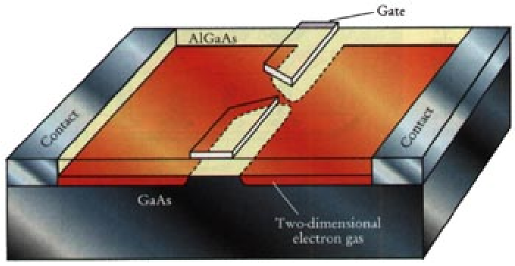
gdzie $\mu_{s,d}$ to potencjał chemiczny źródła i drenu, $V_{bias}$ to przyłożone napięcie, zaś $T$ to temperatura. Proszę założyć $\mu_s = \mu_d = 87$ meV. Proszę pamiętać, że przyłożenie napięcia do układu związane jest również z liniowym spadkiem potencjału w nanostrukturze, jak przedstawiono na rys. 4.




Rysunek 4: Liniowy spadek potencjału w wyniku przyłożenia napięcia $V_{bias}$ do diody RTD.

# 4 Kwantowy kontakt punktowy w przybliżeniu adiabatycznym - kwantyzacja konduktancji.

Rozważmy kwantowy kontakt punktowy (QPC, z ang. quantum point contact) zdefiniowany w dwuwymiarowym gazie elektronowym 2DEG - patrz rys. 5.




Rysunek 5: Kwantowy kontakt punktowy oparty na 2DEG.

Potencjał jaki pojawia się w układzie po przyłożeniu do bramki napięcia $V_g$ można opisać wzorem

$$V(x,y) = f\left[x-l, y-b\right] + f\left[x-l, t-y\right] + f\left[r-x, y-b\right] + f\left[r-x, t-y\right], \tag{19}$$

gdzie

$$f(u,v) = \frac{eV_g}{2\pi\varepsilon}\tan^{-1}\left(\frac{uv}{d\sqrt{d^2+u^2+v^2}}\right), \tag{20}$$

gdzie $\varepsilon$ to przenikalność elektryczna materiału, $l, r$ położenie lewego i prawego brzegu bramki zaś $t, b$ to położenie graniczne bramki w kierunku pionowym, oraz $d$ to odległość pomiędzy bramkami a 2DEG.
W ogólności układ ten jest układem dwuwymiarowym, dla którego równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y) + V(x,y)\psi(x,y) = E\psi(x,y). \tag{21}$$

Przybliżenie adiabatyczne zakłada, że gdy zmiana potencjału w kierunku $x$ jest dużo wolniejsza niż w kierunku poprzecznym $y$. Wtedy możemy założyć, że

$$\psi(x,y) = \sum_n \phi_n(x)\chi_n(y;x) \tag{22}$$

gdzie $\chi(y;x)$ oznacza, że $\chi$ jest funkcją zmiennej $y$ ze stałym parametrem $x$.
Przy tym założeniu równanie Schrödingera możemy rozseparować na dwa równania (szczegóły przedstawiono na wykładzie)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\chi_n(y) + V(y;x)\chi_n(y;x) = E_n\chi_n(y;x) \tag{23}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_n(x)\right]\phi_n(x) = E\phi_n(x) \tag{24}$$

Badanie transportu elektronowego przez rozpatrywany układ polega na rozwiązaniu drugiego z równań dla potencjału $E_n(x)$ gdzie $n = 1, 2, 3, \ldots$, uzyskanego z diagonalizacji pierwszego z nich dla określonych parametrów $x$.

W obliczeniach proszę założyć następujące wartości parametrów materiałowych: masa efektywna $m^*_{GaAs} = 0.063$, stała dielektryczna $\varepsilon = 13.6$ szerokość 2DEG $W = 50$ nm, długość 2DEG $L = 100$ nm, położenie bramek QPC w zakresie $[0.3, 0.7]L$ z odległością między bramkami $0.6W$, zaś $d = 3$ nm oraz $V_g = 4$ eV.

## 4.1 Zadania do wykonania

1. Narysuj efektywny potencjał z jakim oddziałuje elektron przepływający przez QPC, tzn. $E_n(x)$, dla $n = 1, 2, 3, \ldots$

2. Korzystając z formuły Landauera oblicz konduktancje w funkcji padającego elektronu $G(E)$, przy czym

$$G = \frac{2e^2}{h}\sum_n T_n(E) \tag{25}$$

3. Korzystając z formuły Landauera oblicz konduktancje w funkcji napięcia na bramce, dla dwóch wybranych wartości energii Fermiego, $E = 50$ meV oraz $E = 100$ meV.