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

Marta Wleklińska

16 lipca 2025

1 Cel ćwiczenia

Ćwiczenie polega na zbadaniu transportu elektronowego w diodzie rezonansowo–tunelowej oraz w kwantowym kontakcie punktowym w nanodrucie 2D.

2 Wstęp

Jedną z metod obliczeniowych używanych w celu opisania układu w strukturach o zmiennym potencjale jest metoda macierzy transferu. Polega ona na podziale obszaru o zmiennym potencjale na N cienkich warstw, w których potencjał jest aproksymowany jako stały. Dla każdej z tych warstw rozwiązywane jest niezależne od czasu równanie Schrödingera

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\psi_n(z) + U_n\psi_n(z) = E\psi_n(z), \tag{1}$$

którego rozwiązaniem jest kombinacja liniowa fal płaskich: fal padających i odbitych. Należy jednak zaznaczyć, że funkcja falowa oraz jej pochodna (ważona odwrotnością masy efektywnej) muszą być ciągłe na granicy każdej warstwy, co prowadzi do warunku ciągłości:

$$\psi_n(z_n) = \psi_{n+1}(z_n), \quad \frac{1}{m_n^*}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\psi_n(z_n) = \frac{1}{m_{n+1}^*}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\psi_{n+1}(z_n), \tag{2}$$

gdzie uwzględniamy również możliwość zmiennej masy efektywnej m_n^* w kolejnych warstwach. Warunki te można zapisać w postaci równania macierzowego z użyciem tzw. macierzy monodromii. Pozwala ona na powiązanie współczynników amplitudy fal w pierwszym i ostatnim obszarze. Na jej podstawie można obliczyć współczynniki transmisji i odbicia:

$$T = \frac{k_N m_1}{k_1 m_N}\frac{1}{|M_{1\to N,11}|^2}, \tag{3}$$

$$R = \frac{|M_{1\to N,21}|^2}{|M_{1\to N,11}|^2}, \tag{4}$$

gdzie $M_{1\to N}$ to całkowita macierz transferu opisująca cały układ od pierwszej do ostatniej warstwy.

3 Wyniki

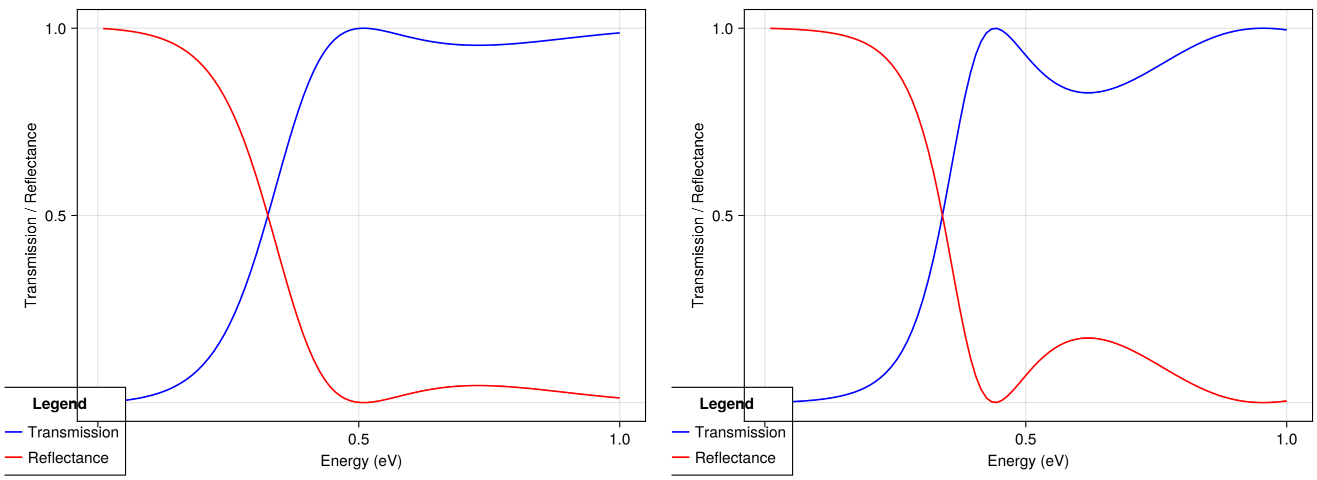
3.1 Dioda rezonansowo–tunelowa

3.1.1 Pojedyncza bariera

Pierwszym krokiem była symulacja transportu elektronowego przez pojedynczą barierę potencjału, w celu przetestowania poprawności implementacji metody macierzy transferu. Bariera była utożsamiana z cienką warstwą materiału o innej strukturze – przykładowo GaAs domieszkowanego Al, czyli Al$_x$Ga$_{1-x}$As. Dla rozpatrywanego przypadku $x = 0{,}3$, masa efektywna wynosiła:

$$m^*_{\mathrm{Al}_{0.3}\mathrm{Ga}_{0.7}\mathrm{As}} = 0.063 + 0.083 \cdot 0.3, \quad m^*_{\mathrm{GaAs}} = 0.063.$$

Na rysunku 1 przedstawiono zależności transmitancji i reflektancji obliczonych z równań (3), (4). Na rysunku 1a przyjęto stałą masę równą masie efektywnej GaAs, natomiast na rysunku 1b użyto różnej masy efektywnej w obszarze bariery.



(a) **(b)**

Rysunek 1: Współczynnik transmisji i odbicia dla układu pojedynczej bariery przy **(a)** stałej masie w układzie, **(b)** zmiennej masy w układzie

Można zauważyć, że przy zmiennej masie bariera staje się bardziej zauważalna — po osiągnięciu maksimum transmitancji, dla wyższych energii współczynnik transmisji maleje szybciej niż w przypadku stałej masy.

3.1.2 Podwójna bariera

Dioda rezonansowo–tunelowa (RTD) to struktura składająca się z dwóch barier oddzielonych cienką warstwą materiału o niższym potencjale. W naszym przypadku były to dwie warstwy Al$_{0.3}$Ga$_{0.7}$As oraz studnia GaAs.

Dla tej struktury również zastosowano metodę macierzy transferu, obliczając zależności współczynników transmisji i odbicia w funkcji energii — wyniki przedstawiono na rysunku 2.

Charakterystyczną cechą jest występowanie ostrych maksimów transmitancji (rezonansów) dla energii mniejszych niż wysokość bariery. Dla wyższych energii obserwujemy oscylacje transmitancji i reflektancji, wynikające z interferencji fal odbitych i transmitowanych.

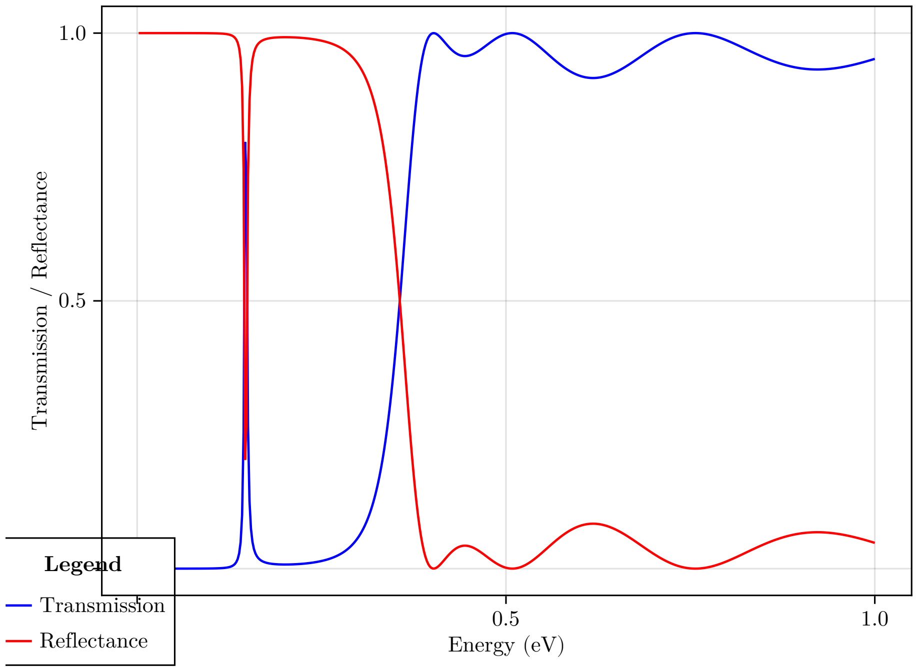
3.1.3 Charakterystyka prądowo–napięciowa

Charakterystykę prądowo–napięciową diody RTD można obliczyć korzystając z formuły Tsu–Esakiego:

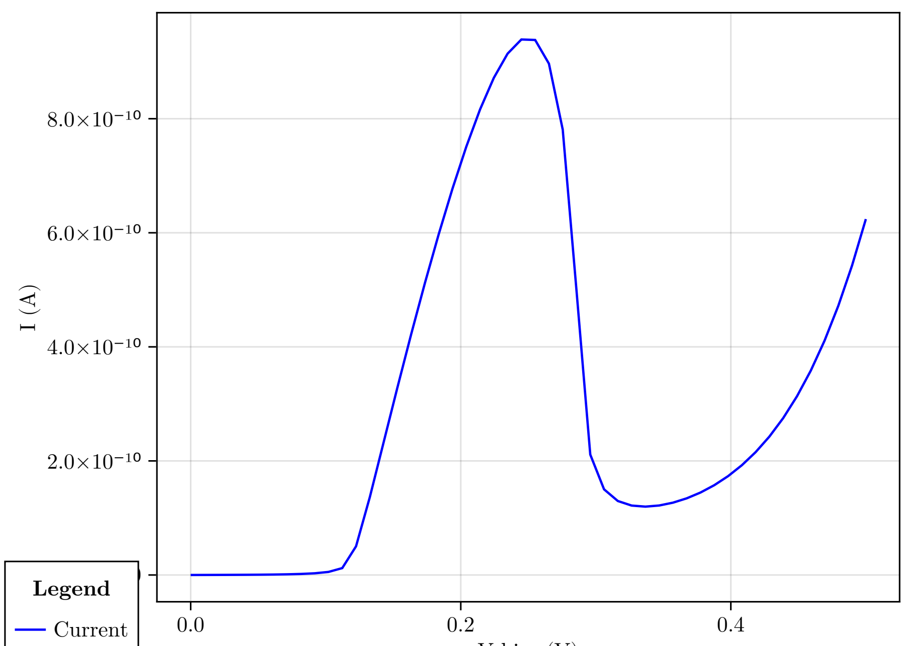
$$j = \frac{em^* k_{\mathrm{B}} T}{3\pi^2 \hbar^2} \int_0^\infty \mathrm{d}E_z \ \mathrm{Trans}(E_z) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{\mu_s - E_z}{k_{\mathrm{B}} T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mu_s - eV_{\mathrm{bias}} - E_z}{k_{\mathrm{B}} T}\right)} \right], \tag{5}$$

gdzie $\mu_s = 0.087$ eV to potencjał chemiczny źródła, V_{bias} to przyłożone napięcie, $T = 10$ K to temperatura układu, a Trans(E_z) to funkcja transmitancji wyznaczona wcześniej metodą macierzy transferu.

Wprowadzenie napięcia V_{bias} powoduje zmianę profilu potencjału — przyjmuje się, że spada on liniowo w obszarze struktury (przybliżenie rampy potencjału). Na rysunku 3 przedstawiono uzyskaną charakterystykę prądowo–napięciową.



Rysunek 2: Współczynnik transmisji i odbicia w funkcji energii przy założeniu zmiennej masy diody rezonansowo–tunelowej



Rysunek 3: Charakterystyka prądowo–napięciowa diody rezonansowo–tunelowej

Krzywa posiada charakterystyczny kształt z obszarem ujemnego oporu różniczkowego. Po przekroczeniu pewnego napięcia, rezonans wypada poza zakres stanów dostępnych w emiterze, co prowadzi do zmniejszenia prądu — pomimo wzrostu napięcia.

3.2 Transport w kwantowym kontakcie punktowym (QPC)

W drugiej części ćwiczenia analizowany był transport elektronowy w kwantowym kontakcie punktowym (QPC), który modelowano jako przewężenie w dwuwymiarowym nanodrucie.

Zadanie polegało na wyznaczeniu efektywnego potencjału $V_{\text{eff}}(x)$, z jakim oddziałuje elektron poruszający się w kierunku transportu (x), dla różnych stanów poprzecznych n. Potencjał generowany w układzie przy przyłożeniu napięcia V_g jest opisywany w postaci

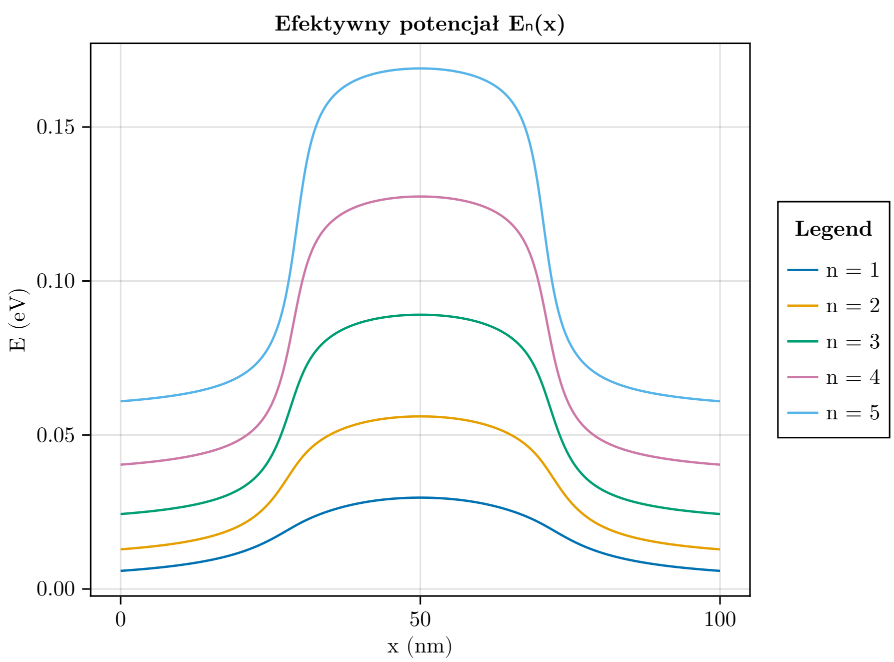
$$V(x, y) = f[x - l, y - b] + f[x - l, t - y] + f[r - x, y - b] + f[r - x, t - y], \tag{6}$$

przy czym

$$f(u, v) = \frac{eV_g}{2\pi\epsilon} \operatorname{arc\,tg}\left(\frac{uv}{d\sqrt{d^2 + u^2 + v^2}}\right), \tag{7}$$

gdzie ϵ to przenikalność elektryczna materiału, l, r - położenia lewego i prawego brzegu bramki, a t, b - położenia graniczne bramki w kierunku pionowym oraz d to odległość pomiędzy bramkami a 2DEG. Potencjał opisywany powyższą funkcją jest opisany w dwóch wymiarach, zatem skorzystaliśmy z przybliżenia adiabatycznego w obliczeniach.

Na rysunku 4 przedstawiono przykładowe profile efektywnego potencjału dla stanów $n = 1$ do $n = 5$.

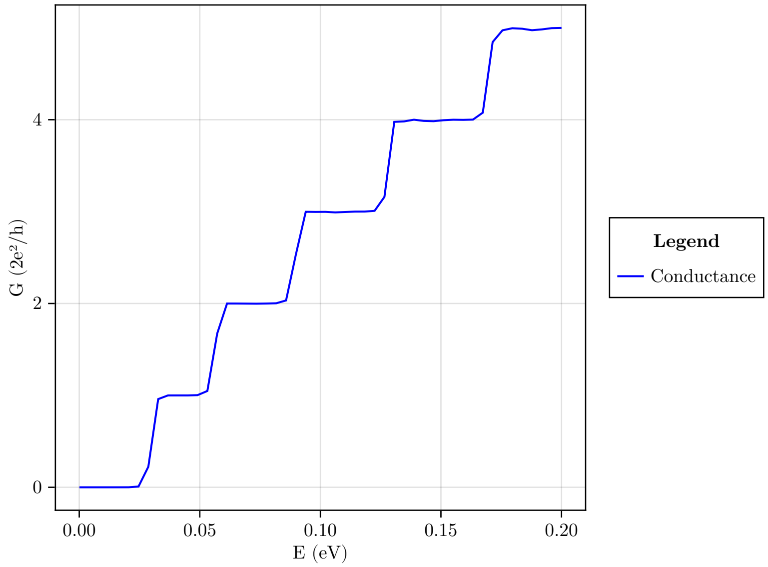


Rysunek 4: Profile kolejnych $n = 5$ energii dla efektywnego potencjału

Na podstawie każdego z tych potencjałów można obliczyć współczynnik transmisji $T(E_n)$ metodą macierzy transferu. Następnie mogliśmy wyznaczyć konduktancję całkowitą zgodnie z formułą Landauera:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E). \tag{8}$$

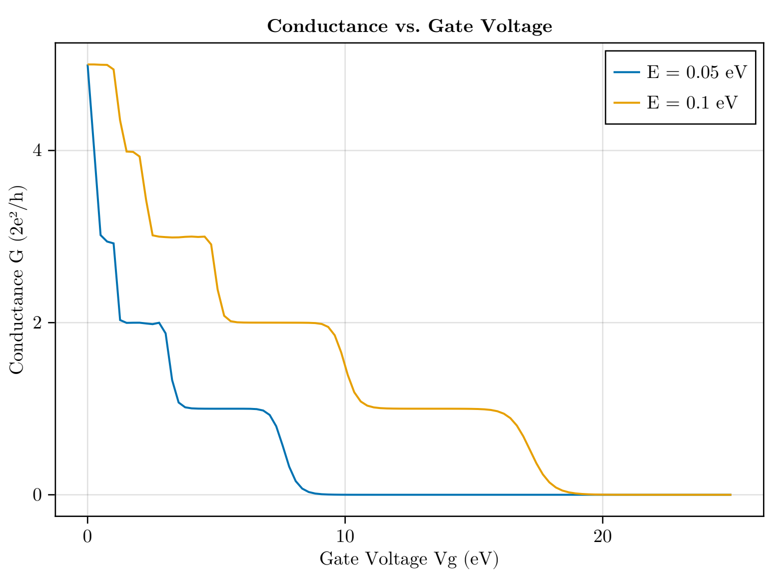
Na rysunku 5 pokazano otrzymane wartości konduktancji G w funkcji energii padającego elektronu.



Rysunek 5: Konduktancja w funkcji energii padającego elektronu wyznaczona dla QPC przy pomocy przybliżenia adiabatycznego

Zauważalne są charakterystyczne *schodki*, czyli dyskretne wartości konduktancji w funkcji energii. Zwiększając energię, dyskretne konduktancje są zwiększane. Obserwowane zjawisko schodkowej konduktancji jest konsekwencją kwantowania liczby modów transmisyjnych – tylko skończona liczba stanów poprzecznych przyczynia się do przenoszenia ładunku, a każdy z nich wnosi dokładnie $\frac{2e^2}{h}$ do całkowitej konduktancji. Przyjęto $n = 5$ stanów w sumie.

Dodatkowo zbadano zależność konduktancji od napięcia bramki V_{g}, dla danych energii Fermiego: $E = \{50, 100\}$ meV. Na rysunku 6 przedstawiono zależność konduktancji od V_{g}. Zauważamy odwrotną zależność: im większe napięcie bram-



Rysunek 6: Konduktancja w funkcji napięcia V_{g} na bramkach. Wyniki dla $E = 50$ meV oraz $E = 100$ meV

ki V_{g}, tym większy jest efektywny potencjał barierowy, co skutkuje wygaszaniem transmisji przez poszczególne kanały. Dla niższej energii Fermiego zauważamy szybsze gaśnięcie konduktancji.

4 Podsumowanie

Ćwiczenie polegało na zbadaniu dwóch nanourządzeń: diody rezonansowo–tunelowej oraz kwantowego kontaktu punktowego. Do każdego z nich użyto metody macierzy transferu w celu znalezienia współczynnika transmisji przez bariery potencjału. W pierwszej części dodatkowo wyznaczono charakterystykę prądowo–napięciową używając formuły Tsu–Esakiego. W drugiej części z kolei badano konduktancję i jej *schodkową* zależność od energii oraz przyłożonego napięcia.