Akademia Górniczo-Hutnicza



im. Stanisława Staszica w Krakowie



Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Symulacje komputerowe transportu kwantowego w warstwowych nanostrukturach półprzewodnikowych

Paweł Wójcik

Rozprawa doktorska wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. Janusza Adamowskiego w Katedrze Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej

Kraków, marzec 2012





FNP Foundation for Polish Science



Podziękowania

Chciałbym serdecznie podziękować Panu Profesorowi Januszowi Adamowskiemu oraz Doktorowi Bartłomiejowi Spisakowi za sprawowanie opieki naukowej oraz liczne dyskusje dotyczące rozprawy. Dziękuję również dr. Tomaszowi Chwiejowi, dr. Maciejowi Wołoszynowi oraz dr. hab. inż. Bartłomiejowi Szafranowi za cenne uwagi oraz pomoc techniczną, którą uzyskałem podczas wykonywania pracy. Pragnę również podziękować prof. Bryanowi Hickey z Uniwersytetu w Leeds oraz prof. Francois Peetersowi z Uniwersytetu w Antwerpii za opiekę naukową podczas staży zagranicznych. Podziękowania kieruję także do wszystkich pracowników oraz doktorantów Zespołu Teorii Nanostruktur i Nanourządzeń za wytworzenie przyjemnej i pomocnej atmosfery sprzyjającej pracy, a szczególnie chciałbym podziękować Annie Broniec za wsparcie, które uzyskałem podczas całego okresu doktoratu.

Rozprawa była finansowana przez Fundację na Rzecz Nauki Polskiej przy udziale Funduszu Rozwoju Regionalnego Unii Europejskiej w ramach programu "Interdisciplinary PhD-Project in Nanoscience and Advanced Nanostructures", prowadzonego na Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie.





FNP Foundation for Polish Science

EUROPEAN REGIONAL

Spis treści

Po	odzię	kowania	ii	
Spis treści				
1	Wstęp		1	
	1.1	Col as a second struktury warstwowe	1	
	1.2 1.3	Układ rozprawy	0 7	
ე	Fun	kain Wignorn	8	
4	9 1	Definicia funkcii Wignera	8	
	2.1 2.2	Równanie ruchu dla funkcji Wignera	9	
3	Met	oda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego w półprze-		
	wod	Inikowych strukturach rezonansowo-tunelowych	13	
	3.1	Kilka uwag o metodzie Wignera-Poissona w zastosowaniu do heterostruktur pół-		
		przewodnikowych typu mesa	14	
	3.2	Metoda Wignera-Poissona	14	
	3.3	Warunki brzegowe dla równania Wignera	17	
	3.4	Zalety oraz ograniczenia metody Wignera-Poissona	19	
4	Transport elektronowy w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-			
	tun	elowej	21	
	4.1	Model nanostruktury	21	
	4.2	Własności transportu elektronowego	22	
		4.2.1 Charakterystyka prądowo-napięciowa	22	
		4.2.2 Zakres 'plateau'	27	
	4.3	Bistabilność w układach rezonansowo-tunelowych	32	
		4.3.1 Bistabilność	33	
		4.3.2 Wpływ parametrów geometrycznych na zjawisko bistabilności	42	
	4.4	Oscylacje prądu o wysokiej częstotliwości	45	
	4.5	Wpływ temperatury oraz rozpraszania na transport elektronowy	52	
	4.6	Podsumowanie	54	

5	Transport elektronowy w strukturze trójbarierowej diody rezonansowo)-		
	tunelowej	56		
	5.1 Model nanostruktury	56		
	5.2 Własności transportu elektronowego	58		
	5.2.1 Charakterystyka prądowo-napięciowa	58		
	5.2.2 Zakres 'plateau'	61		
	5.3 Bistabilność prądu	66		
	5.4 Oscylacje prądu	71		
	5.5 Wpływ struktury geometrycznej na oscylacje prądu	77		
	5.6 Podsumowanie	81		
6	Metoda Wignera-Poissona transportu elektronowego w półprzewodnikowyc	h		
	magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych	83		
	6.1 Oddziaływanie elektronu z domieszką magnetyczną	83		
	6.1.1 Oddziaływanie elektronu przewodnictwa z domieszkami magnetycznymi			
	w zewnętrznym polu magnetycznym	83		
	6.1.2 Model pola średniego	84		
	6.2 Równanie Wignera dla paramagnetycznych struktur rezonansowo-tunelowych	86		
	6.3 Metoda Wignera-Poissona zależna od spinu	88		
	6.4 Warunki brzegowe	91		
7	Spinowa polaryzacja prądu w strukturze paramagnetycznej diody			
	rezonansowo-tunelowej, filtr spinowy	92		
	7.1 Model nanourządzenia	92		
	7.2 Spinowa polaryzacja prądu	94		
	7.3 Wpływ oscylacji prądu na jego spinową polaryzację	99		
	7.4 Wpływ bistabilności na spinową polaryzację prądu	106		
	7.5 Podsumowanie	111		
8	Spinowa polaryzacja prądu w strukturze ferromagnetycznej diody			
	rezonansowo-tunelowej	113		
	8.1 Model nanourządzenia	113		
	8.2 Spinowa polaryzacja prądu	115		
	8.3 Podsumowanie	118		
9	Podsumowanie	120		
\mathbf{A}	Wyprowadznie kinetycznego równania ruchu Wignera dla układu 1D	125		
в	Numeryczna implementacja metody Wignera-Poissona	128		
	B.1 Dyskretyzacja równania Wignera	128		
	B.2 Dyskretyzacja równania Poissona	134		
С	Metoda stabilizacji	135		

Bibliografia

Rozdział 1

Wstęp

1.1 Półprzewodnikowe struktury warstwowe

Rozwój nanotechnologii oraz metod wytwarzania struktur półprzewodnikowych (homoepitaksji oraz heteroepitaksji) [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10], który dokonuje się od początku lat 80-tych, pozwala na wytwarzanie struktur oraz urządzeń półprzewodnikowych o rozmiarach rzędu kilku nanometrów, w których istotną rolę zaczynają odgrywać efekty kwantowe. Wśród tych struktur bardzo duże znaczenie aplikacyjne mają półprzewodnikowe struktury warstwowe.

Przedmiotem niniejszej rozprawy doktorskiej są zjawiska transportu kwantowego w półprzewodnikowych strukturach warstwowych typu diody rezonansowo-tunelowej.

Struktura diody rezonansowo-tunelowej została wynaleziona przez Tsu i Esakiego [11, 12] w latach 70-tych XX wieku i znalazła szerokie zastosowanie zarówno w elektronice cyfrowej do budowy układów logicznych oraz komórek pamięci [13, 14], jak i w elektronice analogowej [15, 16]. Najczęściej struktury rezonansowo-tunelowe wytwarzane są w układzie typu mesa [11, 16]. W strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa poszczególne warstwy półprzewodnikowe o szerokości rzędu nanometrów nanoszone są na podłoże za pomocą metody epitaksji. Tak wytworzona heterostruktura jest następnie wytrawiana, w wyniku czego na powierzchni układu powstaje mały słupek (mesa) o rozmiarach poprzecznych od kilku do kilkudziesięciu mikrometrów. Schemat struktury rezonansowo-tunelowej typu mesa przedstawiony został na Rys. 1.1. Struktury rezonansowo-tunelowe moga być również wytwarzane w układach jednowymiarowych. Ostatnio Björk i in. [17] przedstawili eksperymentalne badania dotyczące transportu elektronowego w diodzie rezonansowo-tunelowej wytworzonej w drucie kwantowym. Zasada działania diody rezonansowo-tunelowej oparta jest na zjawisku tunelowania rezonansowego elektronów przewodnictwa przez stany rezonansowe w studni kwantowej. Zjawisko tunelowania rezonansowego jest zjawiskiem kwantowym, które zachodzi wtedy, gdy energia padającego elektronu równa jest energii stanu rezonansowego w studni kwantowej. Gdy spełniony jest warunek tunelowania rezonansowego, prawdopodobieństwo tunelowania elektronu przez heterostrukturę gwałtownie rośnie. Zjawisko to prowadzi do wzrostu prądu w zakresie napięć, w którym spełnione są warunki tunelowania rezonansowego oraz pojawienia



Rysunek 1.1: Schemat struktury rezonansowo-tunelowej typu mesa. Po lewej stronie rysunku przedstawiony został profil energii potencjalnej w typowej strukturze rezonansowo-tunelowej, zaś po prawej stronie rysunku jej charakterystyka prądowo-napięciowa.

się ujemnego oporu różniczkowego (NDR z ang. Negative Differential Resistance) w zakresie napięć, w którym układ wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego (patrz charakterystyka $I - V_b$ na Rys. 1.1). Intensywne badania dotyczące transportu w strukturach rezonansowotunelowych [18, 19, 20, 21, 22] pokazały, że w strukturach tych pojawia się bardzo interesujące zjawisko bistabilności prądu. Zjawisko bistabilności prądu w diodzie rezonansowo-tunelowej opartej na GaAs/AlGaAs zostało po raz pierwszy zaprezentowane eksperymentalnie przez Goldmana i in. [18] i wywołało wiele kontrowersji dotyczących natury oraz pochodzenia tego zjawiska. W swoich pracach Goldman i in. [18, 23] postawili hipotezę, że zjawisko bistabilności prądu ma charakter wewnętrzny i związane jest z akumulacją ładunku w studni kwantowej. Całkiem odmienny pogląd na zjawisko bistabilności prądu przedstawił Sollner [19], który argumentował, że bistabilność prądu związana jest z niestabilnym zakresem charakterystyki pradowo-napięciowej, wywołanym obecnością zewnętrznego obwodu elektronicznego. Zdaniem Sollnera bistabilność związana jest raczej z charakterystyką całego obwodu niż z procesami zachodzącymi wewnątrz struktury rezonansowo-tunelowej. Spór o naturę i pochodzenie zjawiska bistabilności prądu do tej pory nie został w pełni rozstrzygnięty. W swojej pracy Foster i in. [21] pokazali, że dołączenie kondensatora do układu pomiarowego powoduje zanik bistabilności pradu, potwierdzając tym samym tezę o zewnętrznym pochodzeniu zjawiska bistabilności. Podobny eksperyment został wykonany przez Chen i in. [24], którzy pokazali, że bistabilność pradu zanika wraz ze wzrostem rozmiarów poprzecznych struktury rezonansowej. Z drugiej strony, w swoich pracach Sheard i Toombs [25] oraz Sofo i in. [26] wykazali teoretycznie, że efekt

oddziaływania elektronów zakumulowanych w studni kwantowej może prowadzić do zjawiska bistabilności prądu. Inne podejście do problemu zostało zaprezentowane w pracy Dai i in. [27], w której autorzy pokazali, że w układzie występują dwa zakresy bistabilności, jeden związany z akumulacją ładunku w studni kwantowej oraz drugi związany z oscylacjami prądu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Nieco później zjawisko bistabilności prądu zostało odkryte eksperymentalnie w strukturze rezonansowo-tunelowej typu p [28]. Mimo całego szeregu prac zarówno teoretycznych, jak i eksperymentalnych natura oraz pochodzenie zjawiska bistabilności w strukturach rezonansowo-tunelowych do tej pory nie została rozstrzygnięta i nadal wzbudza wiele kontrowersji.

Innym bardzo interesującym efektem, obserwowanym eksperymentalnie w strukturach rezonansowo-tunelowych jest zjawisko oscylacji prądu o częstotliwości rzędu THz [29, 30, 31, 32]. Badania eksperymentalne dotyczace transportu elektronowego w strukturach rezonansowotunelowych pokazały, że w zakresie ujemnego oporu różniczkowego prad w strukturze nie osiąga stanu równowagi, lecz oscyluje z bardzo wysoką częstotliwością. Z opisywanym zjawiskiem oscylacji prądu wiąże się obecnie duże nadzieje, związane z wykorzystaniem struktur rezonansowo-tunelowych do wytwarzania generatorów sygnału o częstotliwości rzędu THz [15, 16, 33]. Mimo iż zjawisko oscylacji pradu w strukturach rezonansowo-tunelowych jest znane od lat 80-tych, natura oraz pochodzenie oscylacji jest przedmiotem wielu kontrowersji. Pierwsza próba wyjaśnienia zjawiska oscylacji pradu w strukturze diody rezonansowo-tunelowej została podjęta przez Ricco i Azbel [34]. W swojej pracy [34] autorzy sugerowali, że oscylacje prądu związane są z procesem cyklicznego wchodzenia układu do oraz wychodzenia układu z obszaru tunelowania rezonansowego. Jeżeli energia padających elektronów odpowiada energii stanu rezonansowego w studni kwantowej, spełnione są warunki tunelowania rezonansowego, w związku z czym wartość prądu rośnie. Tunelowanie rezonansowe elektronów przewodnictwa prowadzi do akumulacji elektronów w studni kwantowej. Ujemny ładunek elektronów zlokalizowanych w studni kwantowej powoduje wzrost energii stanu rezonansowego. w związku z czym warunki tunelowania rezonansowego przestają być spełnione. Wartość prądu oraz koncentracja ładunku w studni kwantowej maleją, powodując obniżenie energii stanu rezonansowego. Energia stanu rezonansowego w studni kwantowej ponownie staje się równa energii padających elektronów, co rozpoczyna nowy cykl oscylacji. Zgodnie z teorią przedstawioną w publikacji [34] oscylacje powinny być obserwowane w zakresie napięć, w których stan rezonansowy w studni kwantowej spełnia warunki tunelowania rezonansowego. Badania eksperymentalne [29, 32] oraz symulacje numeryczne [35] pokazały jednak, że zjawisko oscylacji występuje jedynie w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce $I - V_b$. A zatem teoria przedstawiona przez Ricco i Azbel [34] nie wyjaśniała poprawnie obserwowanego zjawiska. W innej pracy Presilla i in. [36] argumentowali, że źródłem zjawiska oscylacji jest sprzężenie zwrotne, które zachodzi pomiędzy przepływającym prądem oraz ładunkiem zgromadzonym w studni kwantowej. Podobnie jak w poprzednim przypadku, teoria zaproponowana przez Presilla i in. [36] nie wyjaśniała dlaczego oscylacje obserwowane są jedynie w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Z drugiej strony Woolard i in. [37] w swojej pracy zasugerowali, że oscylacje prądu związane są z fluktuacjami ładunku w bliskim sąsiedztwie bariery emitera. Niestety przyczyna owych fluktuacji nie została do końca wyjaśniona. Innym, alternatywnym podejściem stosowanym w celu wyznaczenia zakresu oscylacji prądu w strukturach rezonansowo-tunelowych jest zastosowanie elektrycznego obwodu zastępczego [38, 39]. Model ten nie wyjaśnia jednak pochodzenia oscylacji. Ostatnie prace dotyczące oscylacji prądu w strukturach rezonansowo-tunelowych [40, 41, 42, 43] pokazują, że zjawisko oscylacji związane jest ze sprzężeniem stanów zlokalizowanych w obszarze emitera, które zachodzi dla napięć z tzn. zakresu 'plateau', który pojawia się w obszarze ujemnego oporu różniczkowego. Prace te nie odpowiadają jednak na istotne pytania: dlaczego oscylacje prądu nie występują w całym zakresie 'plateau'? jaki jest wpływ rozpraszania na zjawisko oscylacji oraz w jakich temperaturach możemy je zaobserwować? czy zjawisko oscylacji prądu w strukturze diody rezonansowo-tunelowej związane jest nieodłącznie z zakresem 'plateau' oraz czy zjawisko to może występować również w innych strukturach rezonansowo-tunelowych, a jeśli tak, to czy zawsze występuje ono w zakresie ujemnego oporu różniczkowego?

W ostatnich latach transport w strukturach rezonansowo-tunelowych stał się szczególne ważny w zwiazku z zastosowaniem struktur rezonansowo-tunelowych z warstwami magnetycznymi do budowy urządzeń spintroniki. Ponowne zainteresowanie strukturami rezonansowo-tunelowymi związane jest z rozwojem fizyki półprzewodników magnetycznych. Prace nad materiałami półprzewodnikowymi o własnościach magnetycznych rozpoczęły się w latach 70-tych [44, 45] i do dnia dzisiejszego zjawisko magnetyzmu w półprzewodnikach jest jednym w najbardziej interesujących zagadnień fizyki półprzewodników. Jedną z metod stosowanych w celu uzyskania własności magnetycznych materiałów półprzewodnikowych jest wprowadzenie do struktury domieszek posiadających momenty magnetyczne. W rezultacie uzyskuje się nową klasę materiałów zwana rozcieńczonymi półprzewodnikami magnetycznymi (DMS z ang. Diluted Magnetic Semiconductors) lub półprzewodnikami półmagnetycznymi. Badania eksperymentalne pokazały, że silne domieszkowanie niektórych półprzewodników III-V domieszka Mn prowadzi do ich ferromagnetycznych własności, obserwowanych w temperaturach powyżej 100 K [46, 3, 2, 4]. Szczególnie obiecującymi materiałami półprzewodnikowymi, wykazującymi własności ferromagnetyczne są GaMnAs [1, 47, 48, 49, 50, 51] oraz InMnAs [46, 49, 52]. W materiałach tych ferromagnetyzm związany jest ze sprzężeniem momentów magnetycznych domieszek Mn, które odbywa się za pośrednictwem elektronów przewodnictwa lub dziur [53, 54]. Obecnie w badaniach nad półprzewodnikami magnetycznymi możemy wyróżnić trzy główne kierunki: (i) rozwój teorii półprzewodników magnetycznych w celu opracowania mikroskopowego modelu magnetyzmu w półprzewodnikach, (ii) rozwój metod wytwarzania półprzewodników magnetycznych [4, 5, 7, 5, 9, 8, 6] oraz (iii) zastosowanie półprzewodników magnetycznych do konstrukcji nanourządzeń spintroniki. Szczególnie obiecujące jest zastosowanie półprzewodników magnetycznych do konstrukcji filtra spinowego.

Zastosowanie rozcieńczonych półprzewodników magnetycznych do budowy filtra spinowego zostało po raz pierwszy zaproponowane teoretycznie przez Eguesa [55]. W pracy [55] zaproponowana została struktura warstwowa ZnSe/ZnMnSe/ZnSe oparta na półprzewodniku ZnMnSe o własnościach paramagnetycznych. W obecności zewnętrznego pola magnetycznego oddziaływanie pomiedzy jonami Mn²⁺ oraz elektronami przewodnictwa prowadzi do gigantycznego rozszczepienia Zeemana ($\Delta E \sim 10 \text{ meV}$) dna pasma przewodnictwa w warstwie ZnMnSe [56, 57]. Zjawisko gigantycznego rozszczepienia Zeemana prowadzi do sytuacji, w której warunki transportu elektronów przewodnictwa przez warstwę ZnMnSe są różne dla elektronów o różnej składowej z-towej spinu s_z : elektrony o $s_z = -\hbar/2$ oddziałują z efektywną studnią potencjału, podczas gdy elektrony o $s_z=\hbar/2$ oddziałują z efektywną barierą potencjału. W wyniku rozszczepienia Zeemana całkowity prąd przepływający przez nanourządzenie zdominowany jest przez elektrony o spinie $s_z = -\hbar/2$. Nanourządzenie zaproponowane przez Eguesa [55] może zatem pracować jako efektywny filtr spinowy, w którym spinowa polaryzacja pradu kontrolowana jest przez zewnętrzne pole magnetyczne. Rozwiązanie zaproponowane w pracy [55] zostało następnie rozwiniete na przypadek struktury zbudowanej z dwóch warstw paramagnetycznych ZnMnSe [58] oraz diody rezonansowo-tunelowej z paramagnetyczną studnią kwantową ZnMnSe [59]. W strukturze diody rezonansowo-tunelowej z paramagnetyczną studnią kwantową zjawisko gigantycznego rozszczepienia Zeemana stanu rezonansowego w studni powoduje, że warunek tunelowania rezonansowego dla elektronów o różnych spinach spełniony jest dla różnych napięć zewnętrznych. Efekt ten prowadzi do rozszczepienia rezonansowego maksimum prądu na charakterystyce prądowo-napięciowej. Filtr spinowy oparty na paramagnetycznej diodzie rezonansowo-tunelowej jest znacznie lepszym rozwiązaniem niż struktura zaproponowana przez Eguesa [55], gdyż pozwala na kontrolowanie spinowej polaryzacji prądu poprzez zmianę napięcia w ustalonym, zewnętrznym polu magnetycznym. Możliwość uzyskania spinowej polaryzacji prądu w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe została potwierdzona eksperymentalnie przez Slobodskyy'ego i in. [60]. W pracy [60] przedstawiono spinowe rozszczepienie rezonansowego maksimum prądu dla różnych wartości pola magnetycznego oraz koncentracji domieszek Mn. Wyniki eksperymentalne uzyskane w pracy [60] zostały następnie opisane teoretycznie przez Havu i in. [61]. Ostatnio ta sama grupa eksperymentalna przedstawiła również możliwość uzyskania spinowej polaryzacji prądu w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej bez obecności zewnętrznego pola magnetycznego [62, 63, 64]. Ponadto wpływ kwantowych efektów rozmiarowych na czas tunelowania w opisywanej strukturze magnetycznej zaprezentowany został w pracy [65].

Konstrukcja filtra spinowego oparta na paramagnetycznej diodzie rezonansowo-tunelowej posiada jednak dwie zasadnicze wady, istotne z punktu widzenia zastosowań. Pierwszą z nich jest konieczność zastosowania zewnętrznego pola magnetycznego, zaś drugą niska temperatura pracy. W celu pokonania wspomnianych trudności w ostatnich latach rozpoczęły się intensywne prace dotyczące zastosowania półprzewodników ferromagnetycznych do konstrukcji

filtrów spinowych opartych na strukturach rezonansowo-tunelowych. Zależny od spinu transport w strukturze diody Zenera opartej na GaMnAs został zaprezentowany przez Sankowskiego i in. [66, 67], a także w pracy Van Drope i in. [68]. Z drugiej strony wzrost magnetorezystancji tunelowej (TMR- Tunnelling Magneto Resistance) w magnetycznej strukturze rezonansowotunelowej zbudowanej z niemagnetycznej studni kwantowej podłączonej do ferromagnetycznych elektrod został zaobserwowany przez Tanaka i in. [69, 70, 71]. W ostatnich latach badania nad ferromagnetycznymi strukturami rezonansowo-tunelowymi skoncentrowały się jednak na zastosowaniu innego półprzewodnika magnetycznego, a mianowicie GaMnN. Ogromne zainteresowanie GaMnN związane jest z badaniami teoretycznymi, zgodnie z którymi ferromagnetyzm w GaMnN może być obserwowany w temperaturach bliskich temperaturze pokojowej [54]. Wyniki eksperymentów przeprowadzonych dla GaMnN pokazywały, że temperatura Curie dla niektórych próbek osiąga wartość 1000 K [72]. Zastosowanie struktur rezonansowo-tunelowych opartych na GaN/InGaN/GaMnN w celu uzyskania spinowej polaryzacji pradu zostało zaprezentowane przez Li i in. [73] w strukturze dwubarierowej oraz przez Liu i in. [74] w strukturze trójbarierowej. Z drugiej strony Qiu i in. [75] oraz Wang i in. [76] pokazali, że w strukturze opartej na GaN/AlGaN/GaMnN domieszkowanie typu delta studni kwantowej oraz polaryzacja ładunku na złączach GaN/AlGaN [77] prowadzi do zwiększenia spinowej polaryzacji prądu otrzymywanej w rozpatrywanych nanourządzeniach. Zastosowanie ferromagnetycznych diod rezonansowo-tunelowych do budowy elementów logicznych nazywanych MOBILE (MOnostable-BIstable Transition Logic Element) zostało zaproponowane przez Ertlera oraz Fabiana [13, 78]. Ta sama grupa badała również możliwość uzyskania magnetorezystancji w trójbarierowej strukturze rezonansowo-tunelowej z ferromagnetycznymi barierami potencjału [79]. Ostatnie badania dotyczące ferromagnetycznych struktur rezonansowo-tunelowych koncentrują się na wykorzystaniu półprzewodników ferromagnetycznych ZnMnO o własnościach ferroelektrycznych [80, 81, 82] do budowy filtrów spinowych.

1.2 Cel rozprawy

Celem niniejszej rozprawy jest opracowanie jednolitego opisu transportu elektronowego w strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa oraz zaprojektowanie modelu efektywnego filtra spinowego opartego na magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. W rozprawie podejmę próbę wyjaśnienia kontrowersji związanych z naturą zjawisk bistabilności oraz oscylacji prądu o wysokiej częstotliwości. Wspomniane zjawiska rozpatrywane będą w strukturach rezonansowotunelowych dwu oraz trójbarierowych. Ponadto w niniejszej rozprawie przedstawię wyniki badań spinowej polaryzacji prądu w magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. Przebadany zostanie wpływ zjawisk bistabilności oraz oscylacji na spinową polaryzację prądu uzyskiwaną w filtrach spinowych opartych na magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. Celem niniejszej rozprawy jest również zaprojektowanie modelu magnetycznej struktury rezonansowotunelowej, która może być wykorzystana jako efektywny filtr spinowy.

1.3 Układ rozprawy

Niniejsza rozprawa składa się z dwóch głównych części. Pierwsza część rozprawy dotyczy symulacji komputerowych transportu elektronowego w niemagnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych, podczas gdy w drugiej części przedstawione zostaną wyniki symulacji komputerowych zależnego od spinu transportu elektronowego w magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. W badaniach transportu elektronowego zastosowana została metoda Wignera-Poissona.

W rozdziale 2 przedstawione zostaną podstawowe informacje dotyczące formalizmu funkcji Wignera. Wprowadzone zostanie pojęcie transformaty Wignera-Weyla, na podstawie której zdefiniowana zostanie funkcja Wignera. Ponadto wyprowadzone zostanie równanie ruchu Wignera, które poprzez analogię do równania Boltzmanna wzbogacone będzie o wyraz odpowiedzialny za rozpraszanie w przybliżeniu czasu relaksacji. Samouzgodniona metoda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego w strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa przedstawiona zostanie w rozdziale 3. W rozdziale 3 opiszemy podstawowe założenia metody Wignera-Poissona oraz przedstawimy jej zalety oraz ograniczenia. Wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego w strukturze dwubarierowej diody rezonansowotunelowej opartej na AlGaAs/GaAs przedstawione zostaną w rozdziale 4, w którym szczególna uwaga poświęcona zostanie analizie zjawisk bistabilności oraz oscylacji prądu. Wyniki symulacji transportu elektronowego w trójbarierowej strukturze rezonansowo-tunelowej typu mesa przedstawione zostaną w rozdziale 5.

W drugiej części rozprawy, dotyczącej transportu elektronowego w magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych, zaprezentowana zostanie metoda Wignera-Poissona zależna od spinu (rozdział 6). Wyniki symulacji zależnego od spinu transportu elektronowego w paramagnetycznej strukturze rezonansowo-tunelowej opartej na BeZnSe/ZnMnSe/ZnSe przedstawione zostaną w rozdziale 7. W rozdziale tym szczególną uwagę koncentrujemy na możliwości otrzymywania spinowej polaryzacji prądu w magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. Natomiast w rozdziale 8 zaproponowana zostanie struktura ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na AlGaN/GaMnN/GaN, która prowadzi do niemal całkowitej spinowej polaryzacji prądu. Rozdział 9 stanowi podsumowanie rozprawy. W dodatkach przedstawione zostaną: (A) wyprowadzenie równania Wignera, (B) implementacja numeryczna metody Wignera-Poissona oraz (C) metoda stabilizacji.

Rozdział 2 Funkcja Wignera

Standardowe sformułowanie mechaniki kwantowej oparte na przestrzeni Hilberta, wydaje się być odległe od sformułowania mechaniki klasycznej, w której układ opisywany jest w przestrzeni fazowej. Jednak już od początku rozwoju teorii zjawisk kwantowych podejmowane były próby sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej. Zauważmy, że sformułowanie mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej wymaga - poza wprowadzeniem pojęć probabilistycznych do opisu układu - spełnienia zasady nieokreśloności Heisenberga, która mówi, że wielkości fizyczne kanonicznie sprzężone, np. położenie x i pęd p_x , nie mogą być jednocześnie mierzalne z dowolną dokładnością. W roku 1932 Eugene Wigner [83] zaproponował procedurę kwantyzacji nie odnoszącą sie do przestrzeni Hilberta, lecz sformułowaną w przestrzeni fazowej. Formalizm ten oparty jest na reprezentacji operatora gęstości za pomocą kwazi-rozkładu prawdopodobieństwa, zwanego funkcją Wignera.

W niniejszym rozdziale przedstawiona zostanie definicja funkcji Wignera oraz wprowadzone zostanie równanie opisujące jej ewolucję w czasie.

2.1 Definicja funkcji Wignera

Zanim wprowadzona zostanie definicja funkcji Wignera wprowadźmy pojęcie transformaty Wignera-Weyla [84]. Transformatą Wignera-Weyla nazywamy odwzorowanie przekształcające dowolny operator $\hat{\mathcal{O}}$ w przestrzeni Hilberta na funkcję $g(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ w przestrzeni fazowej. Transformata Wignera-Weyla zdefiniowana jest wzorem

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \xi \; e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\xi}}{\hbar}} \langle \mathbf{r} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} | \hat{\mathcal{O}} | \mathbf{r} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \rangle, \qquad (2.1.1)$$

gdzie ${\bf r}$ jest wektorem położenia, a ${\bf p}$ wektorem pędu cząstki. Transformata do niej odwrotna wyraża się poprzez

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\mathcal{O}} | \mathbf{y} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3 p \, e^{i\mathbf{p} \cdot \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{\hbar}} g\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{2}, \mathbf{p}\right).$$
(2.1.2)

Transformata Wignera-Weyla z matematycznego punktu widzenia jest transformatą Fouriera elementu macierzowego operatora $\hat{\mathcal{O}}$ w reprezentacji położeniowej po odpowiedniej zamianie

zmiennych. Transformatę Wignera-Weyla wyrażoną wzorami (2.1.1) oraz (2.1.2) można zapisać również za pomocą wektora falowego \mathbf{k} , korzystając z relacji $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$.

Definicja funkcji Wignera

Funkcję Wignera $f^{\mathcal{W}}({\bf r},{\bf k},t)$ definiujemy jako transformatę Wignera-Weyla operatora gęstości wyrażonego wzorem

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i} w_i |i(t)\rangle \langle i(t)|, \qquad (2.1.3)$$

gdzie $|i(t)\rangle$ to zbiór wszystkich stanów własnych, zaś w_i oznacza prawdopodobieństwo wystąpienia określonego stanu $|i(t)\rangle$.

A zatem

$$f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\xi \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\xi}} \langle \mathbf{r} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} |\hat{\rho}(t)|\mathbf{r} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \rangle.$$
(2.1.4)

Korzystając z postaci operatora gęstości w reprezentacji położeniowej, czyli macierzy gęstości

$$\rho(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}, t) = \sum_i w_i \langle \mathbf{r_1} | i(t) \rangle \langle i(t) | \mathbf{r_2} \rangle, \qquad (2.1.5)$$

otrzymujemy

$$f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3\xi \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\xi}}\rho\left(\mathbf{r}+\frac{\boldsymbol{\xi}}{2},\mathbf{r}-\frac{\boldsymbol{\xi}}{2},t\right).$$
(2.1.6)

Wzór (2.1.6) definiuje funkcję Wignera oraz określa jej relację w stosunku do macierzy gęstości. Transformata odwrotna wyraża się wzorem

$$\rho\left(\mathbf{r} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, \mathbf{r} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, t\right) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k' e^{i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\xi}} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t).$$
(2.1.7)

2.2 Równanie ruchu dla funkcji Wignera

Jednocząstkowe równanie ruchu dla funkcji Wignera wyprowadza się dokonując transformaty Wignera-Weyla równania ruchu dla operatora gęstości. Równanie ruchu dla operatora gęstości

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \qquad (2.2.1)$$

w reprezentacji położeniowej przyjmuje postać

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2},t) = \hat{H}(\mathbf{r_1})\rho(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2},t) - \rho(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2},t)\hat{H}(\mathbf{r_2}), \qquad (2.2.2)$$

gdzie $\hat{H}(\mathbf{r}_i)$ jest hamiltonianem jednocząstkowym (Dodatek A).

Dokonując transformaty Wignera-Weyla równania ruchu dla macierzy gęstości otrzymujemy równanie

$$\frac{f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \bigtriangledown_{\mathbf{r}} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) + \frac{i}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k' \,\mathcal{U}(\mathbf{r},\mathbf{k}-\mathbf{k}') f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) = 0, \qquad (2.2.3)$$

zwane równaniem ruchu Wignera.

Jądro całkowe $\mathcal{U}(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ w równaniu (2.2.3) nazywane jest potencjałem nielokalnym i wyraża się wzorem

$$\mathcal{U}(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \xi \ e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\xi}} \left[U\left(\mathbf{r} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}\right) - U\left(\mathbf{r} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}\right) \right], \tag{2.2.4}$$

gdzie $U(\mathbf{r})$ jest energią potencjalną.

Zauważmy, że równanie ruchu Wignera (2.2.3) jest kwantowym odpowiednikiem klasycznego równania Boltzmana [85]

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \bigtriangledown_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) + \bigtriangledown_{\mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} \bigg|_{s}, \qquad (2.2.5)$$

gdzie $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ jest rozkładem gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w elemencie przestrzeni fazowej ($\mathbf{r} + \mathbf{dr}, \mathbf{p} + \mathbf{dp}$), zaś \mathbf{F} oznacza siłę działającą na cząstkę o masie m. Wszystkie wyrazy po lewej stronie równania (2.2.5) nazywane są wyrazami dryftowymi, podczas gdy wyraz występujący po prawej stronie równania Boltzmana odpowiedzialny jest za procesy rozpraszania. Porównując równanie Wignera (2.2.3) z równaniem Boltzmana (2.2.5) widzimy, że kwantowy charakter równania Wignera związany jest z nielokalnością potencjału zawartą w operatorze całkowym $\mathcal{U}(\mathbf{r}, \mathbf{k} - \mathbf{k'})$. Ze wzgledu na analogie obu równań oraz podobna interpreta-

cję fizyczną funkcji Wignera oraz rozkładu Boltzmana, równanie Wignera często wzbogaca się o wyraz związany z rozpraszaniem, analogiczny do wyrazu występującego w równaniu Boltzmana. Równanie Wignera przyjmuje wtedy postać

$$\frac{f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{m} \bigtriangledown_{\mathbf{r}} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) + \frac{i}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k' \,\mathcal{U}(\mathbf{r},\mathbf{k}-\mathbf{k}') f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) = \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t} \bigg|_{s}.$$
(2.2.6)

Wyraz odpowiedzialny za rozpraszanie w jego najbardziej ogólnej formie możemy zapisać w postaci

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\Big|_{s} = -\frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}k' \Big\{ [1-f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)] w_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) \\
- [1-f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t)] w_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \Big\},$$
(2.2.7)

gdzie $w_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}$ oznacza częstotliwość rozproszeń cząstki ze stanu o wektorze falowym \mathbf{k} do stanu o wektorze falowym \mathbf{k}' , zaś V to objetość.

Pierwszy wyraz w równaniu (2.2.7) opisuje wszystkie procesy rozpraszania z obsadzonego stanu \mathbf{k}' do nieobsadzonego stanu \mathbf{k} , podczas gdy drugi wyraz odpowiada za rozpraszanie z obsadzonego stanu \mathbf{k} do nieobsadzonego stanu \mathbf{k}' .

Zdefiniuj
my częstości rozproszeń ze stanu o wektorze falowym k d
o \mathbf{k}' oraz ze stanu o wektorze falowym k' do stanu k w określonej chwili czasu t
 na jednostkę objętości V w postaci

$$\frac{W_{k'\leftarrow k}}{V} = [1 - f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)]w_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}, \qquad (2.2.8)$$

$$\frac{W_{k\leftarrow k'}}{V} = [1 - f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \qquad (2.2.9)$$

Równanie (2.2.7) przyjmuje postać

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\Big|_{s} = -\frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}k' \bigg\{ W_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) - W_{\mathbf{k}'\leftarrow\mathbf{k}} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \bigg\}.$$
 (2.2.10)

Jeżeli czas rozpraszania τ zdefiniujemy poprzez wyrażenie

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k' \, W_{\mathbf{k}' \leftarrow \mathbf{k}},\tag{2.2.11}$$

otrzymujemy

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\Big|_{s} = -\frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{\infty} d^{3}k' W_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'} f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) + f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\frac{1}{\tau}.$$
(2.2.12)

Ponadto założmy, że wielkość $W_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'}$ nie zależy od \mathbf{k}' . Wtedy równanie (2.2.12) możemy zapisać w postaci

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)}{\partial t}\bigg|_{s} = -\frac{W_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'}}{(2\pi)^{3}}\int_{-\infty}^{\infty} d^{3}k' f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) + f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t)\frac{1}{\tau}.$$
(2.2.13)

Korzystając z wyrażenia na koncentrację ładunku $n(\mathbf{r}, t)$

$$n(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r},\mathbf{k},t),$$
 (2.2.14)

otrzymujemy

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \bigg|_{s} = -W_{\mathbf{k} \leftarrow \mathbf{k}'} n(\mathbf{r}, t) + f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{1}{\tau}.$$
(2.2.15)

Wyraz odpowiedzialny za rozpraszanie powinien znikać w stanie równowagi, co prowadzi do warunku

$$W_{\mathbf{k}\leftarrow\mathbf{k}'} = \frac{1}{\tau} \frac{f_0^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{n_0(\mathbf{r})},$$
(2.2.16)

gdzie $f_0^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ oraz $n_0(\mathbf{r})$ to odpowiednio funkcja Wignera oraz koncentracja ładunku w stanie równowagi.

Ostatecznie wyraz odpowiedzialny za rozpraszanie przyjmuje postać

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \bigg|_{s} = \frac{1}{\tau} \left[f^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{f_{0}^{\mathcal{W}}(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{n_{0}(\mathbf{r})} n(\mathbf{r}, t) \right].$$
(2.2.17)

Zapiszmy równanie Wignera dla układu jednowymiarowego (1D). W dalszych rozważaniach mówiąc o równaniu Wignera 1D będziemy stosować uproszczenie zapisu polegające na zastąpieniu z-towej składowej wektora falowego k_z symbolem k. Wtedy $f^{\mathcal{W}}(z, k_z, t) = f^{\mathcal{W}}(z, k, t)$. Równanie Wignera 1D przyjmuje postać

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial z} + \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}(z,k-k') f^{\mathcal{W}}(z,k',t) = \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} \bigg|_{s}, \quad (2.2.18)$$

gdzie potencjał nielokalny

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right]$$
(2.2.19)

oraz wyraz związany z rozpraszaniem

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t}\Big|_{s} = \frac{1}{\tau} \left[f^{\mathcal{W}}(z,k,t) - \frac{f_{0}^{\mathcal{W}}(z,k)}{n_{0}(z)} n(z,t) \right].$$
(2.2.20)

Pełne wyprowadzenie równania ruchu Wignera dla układu 1D znajduje się w Dodatku A na końcu pracy.

Rozdział 3

Metoda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego w półprzewodnikowych strukturach rezonansowo-tunelowych

Mimo iż formalizm funkcji Wignera został opracowany w latach 30 wieku XX [83], ze względu na złożoność obliczeniową formalizm ten został po raz pierwszy użyty do badań transportu w heterostrukturach półprzewodnikowych dopiero 60 lat później. Stało się to możliwe dzięki ogromnemu rozwojowi technologii obliczeniowej jaki nastąpił w latach 90-tych. Pierwsze symulacje transportu elektronowego metodą funkcji Wignera przeprowadzone zostały dla struktury diody rezonansowo-tunelowej [86, 87] (RTD - z ang. Resonant Tunnelling Diode). W swojej pracy Frensley [86, 87] przedstawił symulacje prostej struktury RTD opartej na GaAs/AlGaAs, wyprowadzając postać różnicową równania Wignera oraz postulując warunki brzegowe odpowiednie do opisu kontaktów omowych [86, 87, 88]. Zastosowanie formalizmu funkcji Wignera do symulacji ruchu pakietu gausowskiego w prostym modelu rozpraszania zaprezentowane zostało następnie przez Kluksdahla i in. [89]. W celu uwzględnienia oddziaływania elektrostatycznego obie grupy w swoich późniejszych pracach opracowały samouzgodnioną metodę Wignera-Poissona [90]. Schemat różnicowy dla równania ruchu Wignera został następnie udoskonalony przez Jensena i in. [91]. Ulepszona metoda numeryczna została użyta do symulacji kwantowej trajektorii elektronu podczas transportu przez heterostrukturę RTD [91, 92, 93]. Dalsze prace dotyczące zastosowania formalizmu Wignera do symulacji transportu kwantowego uwzględniały zmienną masę efektywną [94, 95].

W niniejszym rozdziale opisana zostanie metoda symulacji transportu elektronowego za pomocą formalizmu Wignera. Opisywana metoda Wignera-Poissona ukierunkowana będzie na symulacje transportu elektronowego w półprzewodnikowych strukturach warstwowych typu mesa.

3.1 Kilka uwag o metodzie Wignera-Poissona w zastosowaniu do heterostruktur półprzewodnikowych typu mesa

Zanim przejdziemy do opisu metody Wignera-Poissona, przedstawmy ogólny model nanostruktur rozpatrywanych w niniejszej pracy. Znajomość takiego modelu jest szczególnie ważna ze względu na fakt, iż przedstawiona metoda Wignera-Poissona dotyczyć będzie symulacji transportu elektronowego w konkretnych typach heterostruktur półprzewodnikowych, w których spełnione są założenia zawarte w opisywanej metodzie numerycznej.

Przedmiotem badań jest transport elektronowy w półprzewodnikowych strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa. W strukturach typu mesa, rozmiary poprzeczne heterostruktury ograniczone sa przez fizyczne usuniecie materiału, co pozostawia mały słupek, zwany mesa o rozmiarach poprzecznych rzędu kilkudziesięciu μ m. W strukturach rezonansowotunelowych typu mesa o rozmiarach poprzecznych rzędu kilkudziesięciu μ m wytwarzane są warstwy studni oraz barier potencjału o grubościach rzędu nm, które stanowią warstwę aktywną nanourządzenia. Stosunek rozmiarów poprzecznych struktury do rozmiarów warstwy aktywnej sprawia, że z dobrym przybliżeniem możemy założyć, iż ruch elektronów w kierunkach poprzecznych jest nieograniczony, a zatem widmo energetyczne dla ruchu elektronów w kierunku poprzecznym jest widmem ciągłym. Takie założenie pozwala na separację ruchu elektronu w kierunkach poprzecznych oraz w kierunku wzrostu warstw. Zakładając symetrię translacyjną ruchu elektronu w kierunkach poprzecznych, problem transportu elektronowego w półprzewodnikowych strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa możemy sprowadzić do problemu transportu jednowymiarowego w kierunku wzrostu warstw, uśrednionego odpowiednio po kierunkach poprzecznych. Zauważmy, że stosowane przybliżenie dotyczy jedynie struktur typu mesa, w których rozmiary poprzeczne nanourządzenia są znacznie wieksze od rozmiarów warstwy aktywnej. W innych nanostrukturach tj. druty kwantowe, założenie to nie jest spełnione. Symulacje transportu elektronowego przeprowadzone w niniejszej pracy opierają się ponadto na przybliżeniu masy efektywnej, używanym powszechnie w modelach transportu.

3.2 Metoda Wignera-Poissona

Metoda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego oparta jest na przybliżeniu pola średniego, w którym oddziaływanie elektrostatyczne pomiędzy elektronami zastąpione jest oddziaływaniem elektronu z efektywnym polem średnim. Pole średnie w metodzie Wignera-Poissona uzyskiwane jest z rozwiązania równania Poissona. Zastosowanie przybliżenia pola średniego pozwala uprościć problem N oddziałujących elektronów do problemu N niezależnych elektronów oddziałujących z efektywnym polem średnim. Następnie równanie ruchu dla N-elektronowej funkcji Wignera można rozseparować na układ N równań dla jednoelektronowej funkcji Wignera, sprowadzając w ten sposób problem Wignera-Poissona do problemu jednoelektronowego [96, 97]. W rezultacie ruch elektronu przewodnictwa opisany jest jednoelektronowym równaniem ruchu Wignera (2.2.6). Jeżeli założymy, że kierunek z wyznacza kierunek wzrostu warstw półprzewodnikowych, a układ posiada symetrię translacyjną w płaszczyźnie (x, y)problem transportu elektronowego 3D możemy sprawdzić do problemu transportu jednowymiarowego w kierunku z.

Równanie Wignera sprowadza się do postaci 1D wyrażonej wzorem

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial z} + \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \mathcal{U}(z,k-k';t) f^{\mathcal{W}}(z,k',t) = \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} \bigg|_{s}, \quad (3.2.1)$$

gdzie $f^{\mathcal{W}}(z, k, t)$ to funkcja Wignera, z oraz k to odpowiednio położenie i z-owa składowa wektora falowego, m to masa efektywna elektronu, zaś $\mathcal{U}(z, k - k'; t)$ to potencjał nielokalny w postaci

$$\mathcal{U}(z,k-k';t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2};t\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2};t\right) \right], \tag{3.2.2}$$

gdzie U(z;t) jest energią potencjalną w nanostrukturze.

W równaniu (3.2.1) wyrażenie po prawej stronie równania odpowiedzialne jest za rozpraszanie i w przybliżeniu czasu relaksacji wyrażone jest wzorem

$$\left. \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} \right|_{s} = \frac{1}{\tau} \left(f^{\mathcal{W}}(z,k,t) - \frac{f_{0}^{\mathcal{W}}(z,k)}{n_{0}(z)} n(z,t) \right),$$
(3.2.3)

gdzie $f_0^{\mathcal{W}}(z,k)$ oraz $n_0(z)$ to odpowiednio funkcja Wignera oraz koncentracja elektronów w stanie równowagi, czyli dla napięcia $V_b = 0$, zaś τ oznacza czas relaksacji.

W oparciu o funkcję Wignera koncentrację elektronów przewodnictwa oraz gęstość prądu możemy wyznaczyć korzystając z wyrażeń

$$n(z,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f^{\mathcal{W}}(z,k,t), \qquad (3.2.4)$$

$$j(z,t) = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\hbar k}{m} f^{\mathcal{W}}(z,k,t). \qquad (3.2.5)$$

Energia potencjalna U(z;t) w wyrażeniu (3.2.2) jest sumą energii $U^B(z)$, wynikającej z nieciągłości dna pasma przewodnictwa w rozpatrywanej heterostrukturze półprzewodnikowej oraz energii $U^C(z;t)$, wynikającej z przyłożonych napięć zewnętrznych oraz oddziaływania elektronelektron. A zatem

$$U(z;t) = U^{B}(z) + U^{C}(z;t).$$
(3.2.6)

W przypadku heterostruktur rezonansowo-tunelowych profil energii potencjalnej związany z nieciągłością dna pasma przewodnictwa $U^B(z)$ możemy wyrazić w ogólnej postaci jako

$$U^{B}(z) = \sum_{i=1}^{N} U_{i} \Theta(z - z_{i}) \Theta(z_{i+1} - z), \qquad (3.2.7)$$

gdzie z_i wyznacza położenie granic poszczególnych warstw półprzewodnikowych, U_i jest energią potencjalną w *i*-tej warstwie, zaś $\Theta(z)$ to funkcja schodkowa Heaviside'a.

Profil energii potencjalnej $U^{C}(z;t)$ możemy wyznaczyć korzystając z równania Poissona oraz pamiętając, że $U^{C}(z,t) = -e\varphi(z,t)$, gdzie $\varphi(z,t)$ to potencjałem skalarnym pola elektromagnetycznego. Równanie Poissona dla energii potencjalnej ma postać

$$\frac{d^2}{dz^2} U^C(z;t) = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon} \left[N_D(z) - n(z,t) \right], \qquad (3.2.8)$$

gdzie ϵ_0 jest przenikalnością elektryczną próżni, ϵ to przenikalności elektryczna półprzewodnika, $N_D(z)$ oznacza koncentrację zjonizowanych donorów, zaś n(z) to koncentracja elektronów przewodnictwa w rozpatrywanej heterostrukturze.

Zastosowanie równania Poissona w celu wyznaczenia profilu energii potencjalnej $U^{C}(z;t)$ w oparciu o rozkład gęstości ładunku zmienny w czasie wymaga pewnego komentarza z punktu widzenia elektrodynamiki. W przypadku ładunku zmiennego w czasie poprawnym równaniem pozwalającym na wyznacznie potencjału skalarnego $\varphi(z,t)$ jest równanie d'Alemberta [98]. Jednak dla rozkładów gęstości ładunku wolno zmiennych w czasie, równanie Poissona jest dobrym, nierelatywistycznym przybliżeniem równania d'Alemberta i może być wykorzystywane do wyznaczenia potencjału skalarnego. A zatem przy rozwiązywaniu równania Poissona czas traktowany jest parametrycznie, co oznaczone zostało poprzez oddzielenie zmiennej t średnikiem w argumencie funkcji $U^{C}(z;t)$.

Równania (3.2.1) oraz (3.2.8) tworzą układ równań, który definiuje samouzgodnioną metodę Wignera-Poissona. W każdej iteracji, w oparciu o profil energii potencjalnej U(z;t) oraz korzystając z równania Wignera wyznaczamy rozkład koncentracji elektronowej w nanostrukturze n(z,t). Następnie rozkład koncentracji elektronów n(z,t) służy do wyznaczenia energii potencjalnej z równania Poissona. Takie naprzemienne rozwiązywanie równania Wignera i Poissona trwa aż do momentu uzyskania samouzgodnienia.

Wyróżnia się dwie metody Wignera-Poissona:

- metodę Wignera-Poissona niezależną od czasu $(\partial f^W(z,k,t)/\partial t = 0)$, która pozwala na wyznaczenie statycznych charakterystyk prądowo-napięciowych, rozkładów koncentracji elektronowej w nanourządzeniu oraz profili energii potencjalnej,
- metodę Wignera-Poissona zależną od czasu, która dodatkowo pozwala na wyznaczenie charakterystyk czasowych transportu elektronowego.

Wyznaczanie charakterystyki prądowo-napięciowej w metodzie Wignera-Poissona polega na obliczeniu gęstości prądu dla poszczególnych napięć V_b , począwszy od napięcia zerowego aż do pewnej maksymalnej wartość napięcia $V_{b,max}$. Dla każdej wartości napięcia V_b równania Wignera oraz Poissona rozwiązywane są naprzemiennie aż do uzyskania samouzgodnienia. Po spełnieniu kryteriów zbieżności napięcie zmieniane jest o niewielką wartość ΔV_b . Zauważmy, że obliczenia samouzgodnioną metodą Wignera-Poissona wymagają zadania początkowego profilu energii potencjalnej. Jako początkowy profil energii potencjalnej dla napięcia V_b przyjmuje się samouzgodnioną profil energii wyznaczony dla napięcia $V_b - \Delta V_b$, przy czym dla napięcia $V_b = 0$, początkowy profil energii potencjalnej to profil energii związany z nieciągłością dna pasma przewodnictwa $U(z; t = 0) = U^B(z)$. Schemat blokowy przedstawiający obliczenia charakterystyki prądowo-napięciowej metodą Wignera-Poissona zaprezentowany został na Rys. 3.1. Kryteria zbieżności metody w przedstawionym schemacie Wignera-Poissona dotyczą zarówno



Rysunek 3.1: Schemat blokowy przedstawiający obliczenia charakterystyki prądowo-napięciowej metodą Wignera-Poissona.

energii potencjalnej, jak i gęstości prądu i przyjmują postać

$$\forall z : \delta U(z) < 10^{-6} \,\mathrm{eV},$$
 (3.2.9)

$$\forall z : \delta j(z) < 100 \,\mathrm{Acm}^{-2},$$
 (3.2.10)

gdzie δX oznacza różnice pomiędzy wartościami wielkości fizycznej X w dwóch kolejnych iteracjach.

Szczegóły dotyczące numerycznej implementacji metody Wignera-Poissona znajdują się w Dodatku B.

3.3 Warunki brzegowe dla równania Wignera

Symulacje komputerowe procesów transportu przez dowolny układ fizyczny wymagają, aby rozpatrywany układ był układem otwartym, a zatem miał możliwość wymiany cząstek z otoczeniem. W przypadku nanourządzeń elektronicznych, rozpatrywany układ podłączony jest zazwyczaj do zewnętrznego obwodu elektrycznego, z którym ma możliwość wymiany ładunku. Z punktu widzenia symulacji procesów transportu elektronowego w nanourządzeniach elektronicznych wygodnie jest jednak zastąpić zewnętrzny obwód elektroniczny idealnymi rezerwuarami ładunku, do których podłączone jest rozpatrywane nanourządzenie. Oddziaływanie pomiędzy rezerwuarami ładunku oraz nanourządzeniem determinuje prąd przepływający przez rozpatrywany układ.

W metodzie Wignera-Poissona zakłada się, że heterostruktura półprzewodnikowa podłączona jest do idealnych kontaktów omowych będących w stanie kwazi-równowagi termodynamicznej z nanourządzeniem. Jak wspomnieliśmy, specyfika rozpatrywanych heterostruktur półprzewodnikowych typu mesa pozwala na sprowadzenie problemu Wignera-Poissona do problemu jednowymiarowego, uśrednionego po energiach związanych z ruchem ładunku w kierunkach poprzecznych. Uśrednienie po energii związanej z ruchem ładunku w kierunkach poprzecznych odbywa poprzez odpowiednio zadane warunki brzegowe. W związku z tym rozkład elektronów w kontaktach omowych opisany jest funkcją Fermiego-Diraca, uśrednioną po poprzecznych składowych wektora falowego (k_x, k_y) [99]

$$f_{E,C}(k) = \frac{mk_B T}{\pi\hbar^2} \ln\left\{1 + \exp\left[-\frac{1}{k_B T}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_{E,C}\right)\right]\right\},$$
(3.3.1)

gdzie k_B to stała Boltzmana, T to temperatura, μ to potencjał chemiczny, zaś indeksy E oraz C dotyczą odpowiednio elektrody emitera oraz kolektora.

Wykres funkcji $f_{E,C}(k)$ określonej wzorem (3.3.1) dla różnych wartości temperatur T oraz potencjału chemicznego $\mu_E = \mu_C = \mu$ przedstawiony został na Rys. 3.2. Postać warunków brzegowych



Rysunek 3.2: Wykres funkcji $f_{E,C}(k)$ dla różnych wartości (a) temperatur oraz (b) potencjału chemicznego.

dla równania Wignera zaproponowana została przez Frensley'a [88] i wyraża się wzorami

$$f^{\mathcal{W}}(0,k,t)|_{k>0} = f_E(k),$$

$$f^{\mathcal{W}}(L,k,t)|_{k<0} = f_C(k),$$
 (3.3.2)

gdzie L to długość nanostruktury.

Potencjał chemiczny emitera oraz kolektora dla określonej koncentracji elektronowej obliczany jest w oparciu o przybliżenie Joyce-Dixona [100], przy czym dla napięcia $V_b = 0$ potencjał chemiczny w określonym rezerwuarze jest właściwy, gdy koncentracja elektronów w tym rezerwuarze wyznaczona z równania Wignera równa jest koncentracji zjonizowanych donorów.

Zauważmy, że warunek brzegowy dla równania Wignera w postaci (3.3.2) dotyczy jedynie rozkładu ładunków wchodzących do nanostruktury. Rozkład ładunków wychodzących z nanostruktury określony jest przez rozwiązanie równania Wignera. Ponadto warunki brzegowe opisywane równaniem (3.3.2) zakładają, że zarówno ładunki wstrzykiwane z rezerwuaru do nanostruktury, jak i z nanostruktury do rezerwuaru nie ulegają odbiciu na złączu rezerwuar/nanostruktura.

3.4 Zalety oraz ograniczenia metody Wignera-Poissona

Jedną z głównych zalet metody Wignera-Poissona, w stosunku do innych metod obliczania transportu elektronowego tj. metody macierzy transferu jest możliwość wykonywania symulacji transportu elektronowego w funkcji czasu i temperatury. W oparciu o metodę Wignera-Poissona zależną od czasu możemy obliczyć między innymi, jak szybko układ dochodzi do stanu ustalonego w wyniku przełączenia napięcia pomiędzy dwiema wartościami. Ponadto, symulacje zależne od czasu pozwalają na wyznaczenie tych zakresów charakterystyki $j(V_b)$, w których gęstość prądu nie osiąga stanu równowagi, lecz oscyluje z pewną częstotliwością. Niewątpliwą zaletą metody Wignera-Poissona jest również możliwość uwzględnienia wpływu temperatury. Wpływ temperatury w rozpatrywanej metodzie symulacji transportu elektronowego możemy uwzględnić zarówno w warunkach brzegowych, jak i poprzez zastosowanie macierzy gęstości zależnej od temperatury. Ponadto metoda Wignera-Poissona daje możliwość uwzględnienia procesów rozpraszania w przybliżeniu czasu relaksacji. Wymienione zalety metody Wignera-Poissona powodują, że metoda ta, mimo iż znacznie bardziej skomplikowana numerycznie w stosunku do np. metody macierzy transferu jest z powodzeniem stosowana w symulacjach transportu elektronowego w heterostrukturach półprzewodnikowych.

Największe ograniczenie opisywanej metody związane jest z problemami technicznymi, wynikającymi ze strony numerycznej. Metoda Wignera-Poissona jest bowiem metodą wyjątkowo wymagajacą zarówno pod względem pamięci operacyjnej jak i czasu obliczeń. Zauważmy, że nawet w przypadku prostego modelu jednowymiarowego, równanie Wignera określone jest w dwuwymiarowej przestrzeni fazowej (z, k). A zatem liczba wymiarów w równaniu Wignera podwaja się wraz z dodaniem kolejnego wymiaru przestrzennego. Numeryczne wyznaczenie funkcji Wignera w przypadku 1D sprowadza się do rozwiązania układu równań liniowych o wymiarach $N_z N_k \times N_z N_k$, gdzie N_z oraz N_k to odpowiednio liczba węzłów dyskretnej siatki zmiennych z oraz k. Nawet dla stosunkowo małej siatki w przestrzeni fazowej, dla której $N_z = N_k = 100$ otrzymujemy układ równań o wymiarach $10^4 \times 10^4$. Jeżeli każdy element macierzy będziemy przechowywać w zmiennej typu 'float' (8 bitów), to potrzebujemy $8 \times 10^8 = 800$ MB pamięci operacyjnej, przy czym czas obliczeń dla tak dużego układu równań staje się bardzo długi. Dlatego w obliczeniach, nawet w prostym modelu jednowymiarowym, aby zapobiec przeładowaniu pamięci operacyjnej stosowane są metody przechowywania macierzy rzadkich, zaś układ równań rozwiązywany jest metodami iteracyjnymi. Powyższe uwagi pokazują, że symulacje transportu elektronowego za pomocą metody Wignera-Poissona, na obecnie dostępnych komputerach wykonalne są jedynie dla układów jednowymiarowych. Rozszerzenie metody Wignera-Poissona na układy 2D oraz 3D jest niemożliwe, gdyż wymaga zasobów pamięci operacyjnej oraz algorytmów rozwiązywania układów równań niedostępnych we współczesnej technologii komputerowej.

Rozdział 4

Transport elektronowy w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej

W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej (RTD z ang. Resonant Tunnelling Diode) opartej na GaAs/AlGaAs. Zaprezentowane zostaną zarówno podstawowe własności transportu elektronowego, jak i zjawiska bistabilności oraz oscylacji prądu, które zachodzą w procesie transportu przez opisywane heterostruktury półprzewodnikowe. Symulacje transportu elektronowego dla rozpatrywanej nanostruktury przeprowadzone zostaną dla różnych parametrów geometrycznych. Ponadto zbadany zostanie wpływ rozpraszania na transport elektronowy.

4.1 Model nanostruktury

Przedmiotem niniejszego rozdziału są własności transportowe dwubarierowej diody rezonasowotunelowej opartej na GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As [Rys. 4.1 (b)]. Różnica energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy GaAs oraz Al_{0.3}Ga_{0.7}As prowadzi do powstania efektywnego potencjału składającego się ze studni kwantowej GaAs, ograniczonej barierami potencjału Al_{0.3}Ga_{0.7}As. Aktywny obszar nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-GaAs) obszarami bufora GaAs. Na Rys. 4.1 (a) przedstawiony został profil energii potencjalnej w nanourządzeniu otrzymany przy zerowym napięciu zewnętrznym $V_b = 0$. Symulacje transportu elektronowego w strukturze RTD przeprowadzone zostały dla następujących parametrów geometrycznych: szerokość studni potencjału GaAs wynosi 5 nm, szerokość barier potencjału Al_{0.3}Ga_{0.7}As wynosi 3 nm, szerokość obszarów bufora GaAs wynosi 3 nm, zaś długość kontaktów wynosi 17 nm, przy koncentracji zjonizowanych donorów $N_D = 2 \times 10^{18}$ cm⁻³. Całkowita długość nanourządzenia wynosi zatem 51 nm. Wysokość barier potencjału $U_0 = 0.27$ eV odpowiada różnicy energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy Al_{0.3}Ga_{0.7}As oraz GaAs.



Rysunek 4.1: (a) Profil energii potencjalnej dla dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As. Aktywny obszar nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-GaAs) obszarami bufora z GaAs. Kierunek z wyznacza kierunek wzrostu warstw półprzewodnikowych, $\mu_{E,C}$ to potencjał chemiczny odpowiednio emitera oraz kolektora, zaś $s_{E,C}$ oraz $d_{E,C}$ oznaczają szerokość obszarów bufora oraz barier potencjału odpowiednio po stronie emitera oraz kolektora. (b) Schemat rozpatrywanej diody rezonansowotunelowej.

Ze względu na małą szerokość barier potencjału Al_{0.3}Ga_{0.7}As symulacje przeprowadzone zostały w przybliżeniu stałej masy efektywnej elektronu dla całego obszaru nanourządzenia, równej masie elektronu w GaAs, $m = 0.0667 m_0$, gdzie m_0 to masa spoczynkowa elektronu. Podobnie stała elektryczna dla całego obszaru nanourządzenia odpowiada stałej ektrycznej dla GaAs i wynosi $\epsilon = 12.9$. Symulacje przeprowadzone zostały w temperaturze 4.2 K, na dyskretnej siatce w przestrzeni fazowej o liczbie węzłów $N_z = 100$ oraz $N_k = 72$, przy czym $\Delta_z = a$, gdzie a = 0.565 nm odpowiada stałej sieci dla GaAs, zaś zero energii potencjalnej odpowiada energii dna pasma przewodnictwa w elektrodzie emitera $E_C^E = 0$.

4.2 Własności transportu elektronowego

4.2.1 Charakterystyka prądowo-napięciowa

Na Rys. 4.2 przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa $j(V_b)$ za pomocą metody Wignera-Poissona wyznaczona dla rozpatrywanej diody rezonansowo-tunelowej (krzywa czerwona). Dla porównania, na Rys. 4.2 umieszczona została również charakterystyka prądowonapięciowa obliczona metodą Wignera bez samouzgodnienia z równaniem Poissona (krzywa niebieska). W przypadku obliczeń metodą Wignera bez samouzgodnienia, przyłożone napięcie zewnętrzne uwzględnione zostało poprzez liniowy spadek potencjału w aktywnej części nanourządzenia. Charakterystyki prądowo-napięciowe $j(V_b)$ przedstawione na Rys. 4.2 wykazują wła-



Rysunek 4.2: Charakterystyka prądowo-napięciowa dla dwubarierowej diody rezonansowotunelowej opartej na GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, obliczona przy użyciu metody Wignera bez samouzgodnienia z równaniem Poissona (krzywa niebieska) oraz po uwzględnieniu samouzgodnienia metodą Wignera-Poissona (krzywa czerwona). Współczynnik PVR dla rozpatrywanej struktury wynosi 3.8.

sności typowe dla struktur rezonansowo-tunelowych. Na Rys. 4.2 możemy wyróżnić maksimum gęstości prądu związane z procesem tunelowania rezonansowego oraz zakres ujemnego oporu różniczkowego (NDR z ang. Negative Differential Resistance), w którym wartość gęstości prądu spada w funkcji wzrastającego napięcia. Zauważmy, że uwzględnienie oddziaływania elektrostatycznego poprzez samouzgodnienie z równaniem Poissona istotnie zmienia kształt charakterystyki prądowo-napięciowej, przesuwając maksimum gęstości prądu w stronę wyższych napięć. Ponadto w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce prądowo-napięciowej pojawia się zakres wzrostu gęstości prądu, zwany umownie zakresem 'plateau'.

Własności transportowe struktur rezonansowo-tunelowych związane są ze zjawiskiem tunelowania nośników ładunku przez stany rezonansowe w studni kwantowej. Energie stanów rezonansowych możemy wyrazić wzorem $E_0 - i\Gamma/2$ [101], w którym część rzeczywistą nazywać będziemy energią stanu rezonansowego, zaś Γ to rozmycie energetyczne poziomu rezonansowego. Ze względu na dyskretny charakter widma stanów rezonansowych oraz ich lokalizaję przestrzenną, stany te nazywać będziemy również stanami kwazi-związanymi. Tunelowanie rezonansowe występuje wtedy, gdy energia padającego nośnika odpowiada energii jednego ze stanów rezonansowych w studni kwantowej. Gdy spełniony jest warunek tunelowania rezonansowego, prawdopodobień-stwo transmisji nośników przez układ gwałtownie rośnie. W przypadku struktur rezonansowo-tunelowych, przedział energii elektronów biorących udział w procesie transportu ograniczony jest od dołu energią dna pasma przewodnictwa E_C , zaś od góry energią $E_C + \mu$, gdzie μ jest potencjałem chemicznym kontaktu. Przedział energii $E_C \leq E \leq E_C + \mu$ w określonym kontakcie nazywać będziemy oknem transportu. Tunelowanie rezonansowe w opisywanych heterostrukturach półprzewodnikowych zachodzi tylko wtedy, gdy energia stanu rezonansowego E_0 w studni kwantowej zawiera się w przedziale $E_C \leq E_0 \leq E_C + \mu$, przy czym całkowity prąd przepływający przez nanourządzenie jest różnicą prądu płynącego od obszaru emitera do obszaru kolektora oraz prądu płynącego w przeciwnym kierunku. Przeanalizujmy teraz zmiany rozkładu gęstości elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji napięcia zewnętrznego V_b oraz położenia z (Rys. 4.3). Na Rys. 4.3 granice barier potencjału zaznaczone zostały białymi liniami przerywanymi. Zauważmy, że dla zakresu napięć $0 < V_b < 0.23$ V obserwuje-



Rysunek 4.3: (a) Rozkład koncentracji elektronowej oraz (b) profil energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji napięcia zewnętrznego V_b . Białymi liniami przerywanymi zaznaczone zostały granice barier potencjału z Al_{0.3}Ga_{0.7}As.

my stopniowy wzrost koncentracji elektronowej w obszarze studni kwantowej, który związany jest z tunelowaniem elektronów przewodnictwa przez stan rezonansowy w studni. Na charakterystyce prądowo-napięciowej gęstość prądu dla napięcia $V_b = 0.23$ V osiąga wartość maksymalną (Rys. 4.2). Aby dokładnie przeanalizować zjawisko tunelowania rezonansowego przez stan rezonansowy w studni kwantowej, na Rys. 4.4 przedstawione zostały rozkłady koncentracji elektronowej w nanourządzeniu wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej wyznaczone dla napięć: (a) $V_b = 0$, (b) $V_b = 0.23$ V odpowiadającego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$, (c) $V_b = 0.24$ V z zakresu 'plateau' oraz (d) $V_b = 0.32$ V odpowiadającego minimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$. Punkty charakterystyki prądowo-napięciowej, których dotyczą kolejno Rys. 4.4 (a)-(d) zaznaczone zostały zielonymi punktami a-d na Rys. 4.2. Ponadto po prawej stronie każdego z wykresów na Rys. 4.4 (a)-(d)



Rysunek 4.4: Rozkłady koncentracji elektronowej w nanourządzeniu wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej oraz współczynnikami transmisji (prawy wykres) dla napięć: (a) $V_b = 0$, (b) $V_b = 0.23$ V odpowiadającego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$, (c) $V_b = 0.24$ V z zakresu 'plateau' oraz (d) $V_b = 0.32$ V odpowiadającego minimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$.

przedstawiony został współczynnik transmisji w funkcji energii T(E), obliczony metodą macierzy transferu dla profilu energii potencjalnej przedstawionego na rysunku obok. Położenia poszczególnych maksimów współczynnika transmisji na wykresie T(E) odpowiadają energiom kolejnych stanów rezonansowych w studni kwantowej. Na wykresach 4.4 zaznaczony został również potencjał chemiczny emitera μ_E oraz kolektora μ_C . Funkcje Wignera dla rozpatrywanych napięć pokazane zostały na Rys. 4.5. Dla napięcia $V_b = 0$ [Rys. 4.4 (a)] energia pierwszego stanu rezonansowego w studni kwantowej jest większa od energii $E_C^{E(C)} + \mu_{E(C)}$ w obszarze emitera oraz kolektora. Warunek tunelowania rezonansowego nie jest spełniony, w związku z czym koncentracja elektronów w studni kwantowej jest mała. Ponieważ różnica potencjałów chemicznych pomiędzy emiterem oraz kolektorem równa jest zeru, prąd nie płynie. Stopniowe zwiększanie napięcia powoduje obniżanie energii stanu rezonansowego w studni kwantowej. W pewnym zakresie napięć warunek tunelowania rezonansowego zaczyna być spełniony, co skutkuje wzrostem



Rysunek 4.5: Funkcje Wignera dla struktury RTD wyznaczone dla napięć: (a) $V_b = 0$, (b) $V_b = 0.23$ V odpowiadającego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$, (c) $V_b = 0.24$ V z zakresu 'plateau' oraz (d) $V_b = 0.32$ V odpowiadającego minimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$.

prądu przepływającego przez nanourządzenie. Tunelowaniu rezonansowemu towarzyszy wzrost koncentracji elektronów w studni kwantowej. Dla napięcia $V_b = 0.23$ V [Rys. 4.4 (b)] gęstość prądu na charakterystyce $j(V_b)$ oraz koncentracja elektronów w studni kwantowej osiągają wartości maksymalne. Zauważmy, że dla napięcia $V_b = 0.23$ V [Rys. 4.4 (b)] energia pierwszego stanu rezonansowego w studni kwantowej jest niewiele większa od energii dna pasma przewodnictwa w obszarze emitera. Dalszy wzrost napięcia, powyżej $V_b = 0.23$ V powoduje, że pierwszy stan rezonansowy w studni kwantowej wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego, co prowadzi do gwałtownego spadku gęstości prądu (Rys. 4.2). Dla $V_b = 0.32$ V gęstość prądu oraz koncentracja elektronów w studni kwantowej osiągają minimum [Rys. 4.4 (d)]. Analiza współczynnika transmisji dla napięcia $V_b = 0.32$ V [Rys. 4.4 (d)] pozwala zauważyć, że dalszy wzrost gęstości prądu dla napięć $V_b > 0.32$ V związany jest z tunelowaniem elektronów przez drugi stan rezonansowy w studni kwantowej. Zauważmy jednak, że dla napięć z zakresu ujemnego oporu różniczkowego, na charakterystyce $j(V_b)$ powstaje zakres 'plateau'. Na Rys. 4.4 (c) widzimy, że zakres 'plateau' związany jest z charakterystycznym rozkładem gęstości elektronowej oraz płytką studnią potencjału w obszarze emitera. Mimo iż współczynniki transmisji dla napięcia odpowiadającego minimum gęstości prądu [Rys. 4.4 (d)] oraz napięcia z zakresu 'plateau' [Rys. 4.4 (c)] są niemal identyczne w przedziale okna transportu, gęstość prądu w zakresie 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ jest niemal dwa razy większa (Rys. 4.2). Widzimy więc, że w zakresie 'plateau' tunelowanie przez drugi stan rezonansowy w studni kwantowej nie jest jedynym procesem transportu elektronowego w opisywanym nanourządzeniu. Szczegółowa analiza procesów transportu w zakresie 'plateau' będzie przedmiotem następnej części niniejszego rozdziału.

Wielkością charakteryzującą użyteczność struktury RTD w zastosowaniu do budowy elementów elektronicznych jest tzw. współczynnik PVR (z ang. Peak to Valley Ratio), zdefiniowany jako stosunek gęstości prądu w maksimum rezonansowym do minimalnej gęstości prądu, obserwowanej po wyjściu układu z obszaru tunelowania rezonansowego. Współczynnik PVR dla rozpatrywanej struktury RTD wynosi 3.8

Na końcu tego podrozdziału skomentuj
my krótko różnicę w charakterystykach prądowonapięciowych otrzymanych metodą Wignera-Poissona oraz metodą Wignera bez samouzgodnienia. Różnica pomiędzy obiema charakterystykami prądowymi wynika z uwzględnienia oddziaływania elektrostatycznego w metodzie Wignera-Poissona. W
spomniane oddziaływanie odpowiada zarówno za powstawanie 'plateau' w zakresie ujemnego oporu różniczkowego (proces ten zostanie omówiony w następnym podrozdziale), jak i za przesunięcie maksimum gęstości prądu w stronę wyższych napięć. Przesunięcie maksimum gęstości prądu w stronę wyższych napięć związane jest z oddziaływaniem elektronów w studni kwantowej. W
spomnieliśmy, że podczas tunelowania rezonansowego obserwujemy silną akumulację elektronów w studni kwantowej. Wzajemne od-
działywanie elektronów w studni podczas procesu tunelowania rezonansowego spełniony jest dla
 wyższych wartości napięć, powodując przesunięcie maksimum gęstości prądu na charakterystyce
 $j(V_b)$.

4.2.2 Zakres 'plateau'

W poprzednim podrozdziale stwierdziliśmy, że wartość gęstości prądu w zakresie 'plateau' nie może być związana jedynie z efektem tunelowania przez drugi stan rezonansowy w studni kwantowej, ponieważ współczynniki transmisji policzone dla napięcia z zakresu 'plateau' [Rys. 4.4 (c)] oraz napięcia odpowiadającego minimum gęstości prądu [Rys. 4.4 (d)] są niemal identyczne w przedziale okna transportu, a mimo tego wartość gęstości prądu w zakresie 'plateau' jest niemal dwa razy większa (Rys. 4.2). W tej części rozdziału dokonamy szczegółowej analizy procesów transportu zachodzących w zakresie 'plateau' oraz wyjaśnimy jakie procesy fizyczne odpowiadają za pojawienie się tej części charakterystyki prądowo-napięciowej. W tym celu porównajmy profile energii potencjalnej oraz rozkłady koncentracji elektronowej w nanourządzeniu (Rys. 4.6) dla dwóch wartości napięć: (a) napięcia z początku zakresu 'plateau' ($V_b = 0.24$ V) oraz (b) napięcia z końca zakresu 'plateau' ($V_b = 0.28$ V). Dla obu wartości napięć obserwujemy płytką



Rysunek 4.6: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej otrzymane dla dwóch wartości napięć: (a) napięcia z początku zakresu 'plateau' ($V_b = 0.24$ V) oraz (b) napięcia z końca zakresu 'plateau' ($V_b = 0.28$ V).

studnie potencjału w obszarze emitera oraz charakterystyczny rozkład gestości elektronowej z obszarem zubożenia przed barierą emitera. Aby wyjaśnić powstawanie 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$ opiszmy procesy fizyczne zachodzące w nanourządzeniu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. W zakresie ujemnego oporu różniczkowego warunki tunelowania przez pierwszy stan rezonansowy, zlokalizowany w centralnej studni kwantowej przestają być spełnione. Prawdopodobieństwo transmisji elektronów przez rozpatrywana heterostrukture gwałtownie maleje. W wyniku interferencji, w obszarze emitera powstaje charakterystyczny rozkład gęstości elektronowej z obszarem zubożenia elektronowego. Efektywny ładunek dodatni, który powstaje w obszarze emitera prowadzi do powstania płytkiej studni potencjału, w której tworzą się stany kwazi-związane. Poniżej pokażemy, że powstawanie stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz ich czynny udział w procesie transportu elektronowego jest źródłem występowania zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. W celu przeanalizowania procesu tworzenia się studni potencjału oraz stanów kwazi-związanych w obszarze emitera, wykonane zostały obliczenia w czasie, przedstawiające zmiany gęstości prądu w funkcji czasu w przypadku przełączenia napięcia od wartości odpowiadającej maksimum gęstości prądu do wartości odpowiadającej początkowi zakresu 'plateau' (Rys. 4.7). Rys. 4.7 pokazuje proces dochodzenia układu do stanu ustalonego. Na Rys. 4.7 widzimy, że gestość pradu podlega fluktuacjom i po czasie ~ 20 ps dochodzi do stanu równowagi. Przeanalizujmy zatem zmiany rozkładu gestości elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w procesie dochodzenia układu do stanu równowagi. Na Rys. 4.7 zaznaczone zostały chwile czasu t_1, \dots, t_8 , dla których rozkłady gęstości elektronowej oraz profile



Rysunek 4.7: Wykres gęstości prądu w funkcji czasu wyznaczony w przypadku przełączenia napięcia od wartości odpowiadającej maksimum gęstości prądu do wartości odpowiadającej początkowi zakresu 'plateau'. Wykres pokazuje proces dochodzenia układu do stanu równowagi. Na wykresie zaznaczone zostały chwile czasu $t_1,...,t_8$, dla których rozkłady koncentracji elektronowej oraz profile energii potencjalnej przedstawione zostały na Rys. 4.8.

energii potencjalnej w nanourządzeniu przedstawione zostały na Rys. 4.8. Na Rys. 4.8 zaznaczone zostały również energie odpowiadające maksimom średniej gestości stanów rezonansowych w poszczególnych obszarach nanourządzenia, wyznaczone za pomocą metody stabilizacji [102] (Dodatek C). W chwili czasu t_1 [Rys. 4.8 (a)] możemy zaobserwować akumulację elektronów w centralnej studni kwantowej, co oznacza, że układ znajduje się w obszarze tunelowania rezonansowego. Po upływie czasu t_1 układ wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego, w związku z czym gęstość prądu na wykresie j(t) (Rys. 4.7) gwałtownie maleje. Kiedy układ wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego prawdopodobieństwo odbicia elektronów od bariery emitera drastycznie rośnie. Na Rys. 4.8 (b) obserwujemy niewielkie obniżenie dna pasma przewodnictwa tuż przed lewą barierą potencjału. W obszarze emitera tworzy się stan kwazi-związany. Powstanie stanu kwazi-związanego w obszarze emitera otwiera nowy kanał transportu elektronowego. Elektrony mogą tunelować rezonansowo kolejno przez stan kwazi-związany w obszarze emitera, stan kwazi-związany w obszarze centralnej studni kwantowej do obszaru kolektora. W związku z tunelowaniem przez stan kwazi-związany zlokalizowany w obszarze emitera, gęstość prądu stopniowo wzrasta. Począwszy od chwili czasu t_2 średnia gęstość stanów rezonansowych oscyluje w czasie, prowadząc do kolejnych wzrostów oraz spadków gęstości prądu. Zauważmy, że wzrost gęstości prądu na wykresie j(t) obserwowany jest tylko wtedy, gdy pierwszy stan kwazi-związany w



Rysunek 4.8: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej wyznaczone dla kolejnych chwil czasu $t_1,...,t_8$ zaznaczonych na Rys. 4.7. Na rysunku zaznaczone zostały również energie odpowiadające maksimom średniej gęstości stanów rezonansowych w poszczególnych obszarach nanourządzenia, wyznaczone za pomocą metody stabilizacji.

obszarze emitera położony jest na skali energii poniżej pierwszego stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej [Rys. 4.8 (c) oraz (e)]. Z drugiej strony gęstość prądu na wykresie j(t)maleje, gdy wzajemne położenie stanów na skali energii jest odwrotne [Rys. 4.8 (d) oraz (f)]. W wyniku opisywanych procesów dno studni potencjalnej w obszarze emitera stopniowo przesuwa się w stronę niższych energii, co prowadzi do wytworzenia się drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera [Rys. 4.8 (e)]. W chwili czasu t_8 układ osiąga stan równowagi [Rys. 4.8 (h)]. Przeanalizujmy teraz zmiany energii stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej w funkcji napięcia w całym zakresie 'plateau'. W tym celu w oparciu o samouzgodniony profil energii potencjalnej dla wartości napięć: $V_b = 0.24$ V oraz $V_b = 0.28$ V, odpowiadających poczatkowej oraz końcowej części zakresu 'plateau', policzone zostały energie stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz głównej studni kwantowej. Na Rys. 4.9 przedstawione zostały wykresy średniej gęstości stanów rezonansowych (Dodatek C) w funkcji energii, policzone dla napięć: (a) $V_b = 0.24$ V oraz (b) $V_b = 0.28$ V. Położenia poszczególnych pików średniej gęstości stanów rezonansowych na Rys. 4.9 (a) oraz (b) odpowiadają kolejno energiom: E_{E1} - pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera, E_{QW1} - pierwszego stanu kwazizwiązanego w obszarze centralnej studni kwantowej oraz E_{E2} - drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera. Na Rys. 4.9 (c) oraz (d) przedstawiony został samouzgodniony profil energii potencjalnej wraz z energiami poszczególnych stanów kwazi-związanych oraz ich funkcjami falowymi dla obu wartości napięć. Zauważmy, że w miarę wzrostu napięcia energie E_{E1} oraz E_{E2} stanów kwazi-związanych w obszarze emitera praktycznie nie ulegają zmianie, podczas



Rysunek 4.9: Šrednia gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii wyznaczona dla napięć (a) $V_b = 0.24$ V oraz (b) $V_b = 0.28$ V. Położenie poszczególnych pików średniej gęstości stanów rezonansowych odpowiada kolejno energiom: E_{E1} - pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera, E_{QW1} - pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowej oraz E_{E2} - drugiego poziomu kwazi-związanego w obszarze emitera. Rysunki (c) i (d): samouzgodniony profil energii potencjalnej z zaznaczonymi energiami stanów kwazi-związanych oraz ich funkcjami falowymi, odpowiednio dla napięć: (c) $V_b = 0.24$ V oraz (d) $V_b = 0.28$ V.

gdy energia E_{QW1} stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej przesuwa sie wraz ze wzrostem napięcia w stronę niższych wartości. Różnica energii pomiędzy pierwszym stanem kwazi-związanym w obszarze emitera E_{E1} oraz pierwszym stanem kwazi-związanym w centralnej studni kwantowej E_{QW1} maleje w funkcji napięcia aż do zrównania się energii obu stanów. Aby pokazać, jak zmieniają się energie obu stanów kwazi-związanych, na Rys. 4.10 (a) przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii oraz napięcia zewnętrznego, wyznaczony dla zakresu napięć odpowiadającego 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Zauważmy, że w miarę wzrostu napięcia różnica pomiędzy energiami E_{E1} oraz E_{QW1} maleje od wartości 19 meV dla $V_b = 0.24$ V do wartości 5 meV dla napięcia $V_b = 0.285$ V, przy czym dla całego zakresu napięć, w którym występuje 'plateau', energia E_{QW1} pierwszego stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej jest większa od energii E_{E1} pierwszego


Rysunek 4.10: (a) Šrednia gęstość stanów rezonansowych ρ w funkcji energii E oraz napięcia zewnętrznego V_b , wyznaczona dla napięć odpowiadających zakresowi 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. (b) Schematyczny rysunek przedstawiający proces tunelowania rezonansowego przez stan kwazi-związany w obszarze emitera.

stanu kwazi-związanego w obszarze emitera. Ponieważ różnica energii pomiędzy rozpatrywanymi stanami jest mała i porównywalna z energetycznym rozmyciem obu tych stanów, elektrony mogą tunelować rezonansowo z obszaru emitera kolejno przez pierwszy stan kwazi-związany w obszarze emitera o energii E_{E1} , następnie przez pierwszy stan kwazi-związany w centralnej studni kwantowej o energii E_{QW1} do obszaru kolektora, jak zostało pokazane schematycznie na Rys. 4.10 (b). Proces tunelowania przez stan kwazi-związany w obszarze emitera skutkuje wzrostem gęstości prądu w zakresie 'plateau'. Proces ten trwa dopóki energia E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera jest mniejsza od energii E_{QW1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowej.

Podsumowując, wartość gęstości prądu w zakresie 'plateau' zdeterminowana jest przez dwa główne kanały transportu. Pierwszym z nich jest tunelowanie rezonansowe przez stan kwazi-związany w obszarze emitera, zaś drugim, tunelowanie przez drugi stan rezonansowy w obszarze centralnej studni kwantowej (patrz współczynnik transmisji na Rys. 4.4 (c)).

4.3 Bistabilność w układach rezonansowo-tunelowych

Badania eksperymentalne dotyczące transportu elektronowego w strukturach rezonansowotunelowych pokazały, że w strukturach tych pojawia się bardzo interesujące zjawisko bistabilności prądu [18, 23]. W tej części pracy, na przykładzie rozpatrywanej dwubarierowej struktury rezonansowo-tunelowej przedstawimy zjawisko bistabilności oraz przeanalizujemy wpływ zmian struktury geometrycznej nanourządzenia na bistabilność prądu.

4.3.1 Bistabilność

Charakterystyka prądowo-napięciowa dla rozpatrywanej struktury RTD (patrz 4.1) wyznaczona została w dwóch przypadkach: pierwszym, polegającym na stopniowym zwiększaniu napięcia od wartości $V_b = 0$ do $V_b = 0.4$ V z krokiem $\Delta V_b = 0.005$ V oraz drugim, polegającym na stopniowym zmniejszaniu napięcia od wartości $V_b = 0.4$ V do $V_b = 0$ z krokiem $\Delta V_b = -0.005$ V. Rozpatrywane sposoby wyznaczania charakterystyki prądowo-napięciowej oznaczmy skrótowo FBS (z ang. Forward Bias Sweeping), w przypadku stopniowego zwiększania napięcia oraz BBS (z ang. Backward Bias Sweeping), w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia. Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane w obu przypadkach przedstawione zostały na Rys. 4.11. Zauważmy, że charakterystyki $j(V_b)$ otrzymane w przypadku FBS oraz BBS są istotnie różne,



Rysunek 4.11: Charakterystyki prądowo-napięciowe wyznaczone w przypadku stopniowego zwiększania napięcia od wartości $V_b = 0$ V do $V_b = 0.4$ V (FBS, linia niebieska) oraz stopniowego zmniejszania napięcia od wartości $V_b = 0.4$ V do $V_b = 0$ V (BBS, linia czerwona).

co prowadzi do powstania dwóch pętli histerezy prądu zaznaczonych na Rys. 4.11 jako (I) oraz (II). Maksimum gęstości prądu wraz z obszarem ujemnego oporu różniczkowego oraz zakresem 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ otrzymanej w przypadku BBS przesunięte jest w stosunku do maksimum gęstości prądu oraz zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ otrzymanej w przypadku FBS w stronę niższych wartości napięć. W celu porównania wyników symulacji komputerowych z danymi eksperymentalnymi, na Rys. 4.12 przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As otrzymana eksperymentalnie przez Goldmana i in. [18]. Zauważmy, że wyniki symulacji komputerowych są jakościowo zgodne z danymi eksperymentalnymi. Otrzymana eksperymentalnie charakterystyka

 $j(V_b)$, podobnie do krzywej teoretycznej, charakteryzuje się występowaniem dwóch pętli histerezy związanych ze zjawiskiem bistabilności prądu. Aby dokonać szczegółowej analizy opisywanego



Rysunek 4.12: Bistabilność charakterystyki prądowo-napięciowej i związane z nią pętle histerezy otrzymane eksperymentalnie przez Goldmana i in. [18] dla struktury RTD opartej na GaAs/AlGaAs.

zjawiska bistabilności, na Rys. 4.13 przedstawione zostały rozkłady gestości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej wyznaczone w przypadku FBS oraz BBS dla wartości napięć odpowiadających pętlom histerezy oznaczonym odpowiednio jako (I) oraz (II) na Rys. 4.11. Dla napięcia $V_b = 0.22$ V [Rys. 4.13 (a)] rozkład gęstości elektronowej w przypadku FBS z akumulacją elektronów w centralnej studni kwantowej odpowiada tunelowaniu rezonansowemu elektronów przez stan rezonansowy w centralnej studni kwantowej, podczas gdy rozkład gestości elektronowej w przypadku BBS z charakterystycznym obszarem zubożenia elektronowego w obszarze emitera odpowiada zakresowi 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Z drugiej strony, dla napięcia $V_b = 0.28$ V [Rys. 4.13 (b)] rozkład gęstości elektronowej w przypadku FBS odpowiada zakresowi 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$, podczas gdy w przypadku BBS, rozkład gestości elektronowej wskazuje na zakres minimum gestości pradu na charakterystyce $i(V_b)$. W dalszej części rozdziału pokażemy, że zjawisko bistabilności prądu związane jest z oddziaływaniem elektron-elektron zachodzącym w obszarze studni kwantowej. W tym celu opiszmy procesy zachodzące w nanourządzeniu w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia zewnętrznego (patrz schemat na Rys. 4.14). W pierwszej kolejności rozważmy przypadek stopniowego zwiększania napięcia. Załóżmy, że dla napięcia $V_b = 0$ energia E_0



Rysunek 4.13: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej w przypadku FBS oraz BBS wyznaczone dla napięć: (a) $V_b = 0.22$ V oraz (b) $V_b = 28$ V, odpowiadających występowaniu pętli histerezy oznaczonych jako (I) oraz (II) na Rys. 4.11.

stanu rezonansowego w studni kwantowej jest większa od energii $E_C + \mu$ w obu kontaktach [Rys. 4.14 (a)]. Stopniowe zwiększanie napięcia powoduje obniżanie energii dna pasma przewodnictwa, a tym samym energii stanu rezonansowego w obszarze studni kwantowej. Dla napięcia $V_b = V_r$ [Rys. 4.14 (b)] energia stanu rezonansowego E_0 osiąga wartość $E_C^E + \mu_E$. Warunek tunelowania rezonansowego przez stan zlokalizowany w studni kwantowej zaczyna być spełniony. Wartość gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$ rośnie [Rys. 4.14 (e)]. Warunek tunelowania rezonansowego i związany z nim wzrost gęstości prądu spełniony jest dla całego zakresu napięć, w którym energia stanu rezonansowego w studni kwantowej leży w oknie transportu. Ujemny ładunek zakumulowany w studni kwantowej podczas procesu tunelowania rezonansowego prowadzi do przesunięcia energii stanu rezonansowego w studni o wartość U^H (energia potencjalna Hartree) [Rys. 4.14 (c)]. Oddziaływanie elektron-elektron w studni kwantowej powoduje zatem efekt przeciwny do efektu związanego z obniżaniem napięcia, w związku z czym warunek tunelowania rezonansowego może być spełniony dla zakresu napięć większego o wartość ΔV_b [Rys. 4.14 (e)]. Dalsze zwiększanie napięcia powoduje stopniowe obniżanie energii stanu rezonansowego w studni kwantowej aż do momentu, gdy energia stanu rezonansowego w studni przestaje spełniać warunki tunelowania rezonansowego, co skutkuje gwałtownym spadkiem gestości prądu w nanourządzeniu. W przypadku stopniowego zwiększania napięcia układ wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego dopiero dla napięcia $V_b = V_s + \Delta V_b$ [Rys. 4.14 (d)].

W dalszej kolejności rozważmy przypadek stopniowego zmniejszania napięcia [Rys. 4.14 (f-i)]. W przypadku stopniowego zmniejszania napięcia energia stanu rezonansowego w studni przesuwa się w stronę wyższych wartości. Ponieważ poza obszarem tunelowania rezonansowego koncentracja elektronów w studni kwantowej jest mała, efekt związany z oddziaływaniem elektronów w studni kwantowej jest zaniedbywalny. W związku z tym warunek tunelowania rezonansowego nie jest spełniony w zakresie napięć $V_s < V_b < V_s + \Delta V_b$, a zaczyna być spełniony dopiero wtedy,



Rysunek 4.14: Schemat pomocniczy pokazujący procesy zachodzące w strukturze RTD podczas stopniowego zwiększania (FBS - lewa część rysunku) oraz zmniejszania (BBS - prawa część rysunku) napięcia zewnętrznego. Wstawka środkowa przedstawia schematyczny wykres charakterystyki prądowo-napięciowej uzyskanej w przypadku FBS oraz BBS. Rysunek ilustruje źródło bistabilności w strukturze RTD.

gdy napięcie osiągnie wartość V_s [Rys. 4.14 (h)].

Podsumowując, wypadkowa procesów oddziaływania pomiędzy elektronami w studni kwantowej, zachodzących w przypadku stopniowego zwiększania oraz zmniejszania napięcia prowadzi do zjawiska bistabilności i związanej z nią pętli histerezy na charakterystyce $j(V_b)$ [Rys. 4.14 (e)].

Półklasyczny model bistabilności prądu

Przedstawmy zjawisko bistabilności prądu w ujęciu ilościowym w ramach modelu półklasycznego. W tym celu pokażemy, że ładunek zgromadzony w studni kwantowej dla pewnego zakresu napięć wykazuje cechy bistabilności. Gęstość prądu przez opisywaną heterostrukturę RTD możemy wyznaczyć w oparciu o formułę Tsu-Esakiego [99] w postaci

$$j = \frac{em}{2\pi\hbar^3} \int_0^\infty T(E)N(E)dE,$$
(4.3.1)

gdzie m to masa efektywna, T(E) jest współczynnikiem transmisji przez opisywaną heterostrukturę półprzewodnikową, zaś N(E) to funkcja rozkładu Fermiego-Diraca wycałkowana po energiach związanych z ruchem elektronu w kierunkach poprzecznych (x, y) (z ang. Supply Function). Przypomnijmy, że formuła Tsu-Esakiego zakłada, iż opisywana struktura znajduje się w stanie kwazi-równowagi termodynamicznej z rezerwuarami ładunku, w związku z czym rezerwuary te opisywane są rozkładem Fermiego-Diraca.

Funkcja N(E) ma postać [99]

$$N(E) = k_B T \ln \left[\frac{1 + \exp\left(-\frac{E - \mu_E}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E - (\mu_C - eV_b)}{k_B T}\right)} \right],$$
(4.3.2)

gdzie k_B jest stałą Boltzmana, T to temperatura, V_b oznacza napięcie emiter-kolektor, zaś $\mu_{E,C}$ to odpowiednio potencjał chemiczny emitera oraz kolektora.

Dla uproszczenia problemu rozważmy tunelowanie przez pojedynczy stan rezonansowy w studni kwantowej oraz założymy, że inne procesy tunelowania przez strukturę mogą zostań całkowicie pominięte. Współczynnik transmisji przez rozpatrywaną heterostrukturę może być wówczas wyrażony funkcją Lorentza [99] w postaci

$$T(E) = T_0 \left[1 + \left(\frac{E - E'_0}{\Gamma} \right)^2 \right]^{-1}, \qquad (4.3.3)$$

gdzie T_0 to maksymalna wartość współczynnika transmisji osiągana dla $E = E'_0$, E'_0 to energia stanu rezonansowego w studni kwantowej mierzona względem energii dna pasma przewodnictwa w obszarze emitera (energię E'_0 należy odróżnić od energii stanu rezonansowego E_0 mierzonej względem dna pasma przewodnictwa w studni kwantowej), zaś Γ to rozmycie energetyczne poziomu rezonansowego w studni kwantowej.

Ostatecznie gęstość prądu wyraża się wzorem

$$j = \frac{em}{2\pi\hbar^3} k_B T \int_0^\infty T_0 \left[1 + \left(\frac{E - E_0'}{\Gamma}\right)^2 \right]^{-1} \ln \left[\frac{1 + \exp\left(-\frac{E - \mu_E}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E - (\mu_C - eV_b)}{k_B T}\right)} \right] dE.$$
(4.3.4)

Gęstość prądu wyrażona wzorem (4.3.4) jest różnicą prądu $j_{E\to C}$ płynącego z obszaru emitera do obszaru kolektora oraz prądu $j_{C\to E}$ płynącego w kierunku przeciwnym

$$j = j_{E \to C} - j_{C \to E}. \tag{4.3.5}$$

Gęstość prądu $j_{E(C)\to C(E)}$ płynącego w określonym kierunku przez stan rezonansowy o energii E_0 możemy wyrazić wzorem

$$j_{E(C)\to C(E)} = nT_{E(C)\to C(E)}\upsilon = nT_{E(C)\to C(E)}\frac{\hbar k_0}{m},$$
(4.3.6)

gdzie *n* to koncentracja ładunku, v oznacza prędkość nośników w kierunku transportu, zaś k_0 to wektor falowy odpowiadający energii E_0 stanu rezonansowego w studni kwantowej mierzonej względem dna pasma przewodnictwa w studni ($E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$).

Jeżeli założymy, że $j_{E\to C} \gg j_{C\to E}$ oraz że bariera potencjału po stronie emitera charakteryzuje się współczynnikiem transmisji T_c , który nie zależny od przyłożonego napięcia zewnętrznego, to korzystając z równań (4.3.5) oraz (4.3.6) koncentrację ładunku zgromadzonego w studni kwantowej na jednostkę powierzchni możemy otrzymać korzystając z przybliżonego wyrażenia

$$Q = w \frac{m}{\hbar k_0} \frac{1}{T_c} j, \tag{4.3.7}$$

gdzie w to szerokość studni kwantowej.

Z drugiej strony energię E'_0 stanu rezonansowego w studni kwantowej, mierzoną względem dna pasma przewodnictwa w obszarze emitera możemy wyrazić za pomocą energii E_0 stanu rezonansowego, mierzonej względem dna pasma przewodnictwa w studni kwantowej korzystając z wyrażenia

$$E'_{0} = E_{0} - feV_{b} + \frac{eQ}{2C}, \qquad (4.3.8)$$

gdzie C jest pojemnością elektryczną na jednostkę powierzchni rozpatrywanej heterostruktury półprzewodnikowej, zaś f oznacza współczynnik skalujący (z ang. Lever Arm), który związany jest z geometrią nanourządzenia i wyrażony jest wzorem

$$f = \frac{s_E + b_E + 0.5w}{(s_C + b_C + 0.5w) + (s_E + b_E + 0.5w)}$$
(4.3.9)

gdzie $s_{E,C}$, $b_{E,C}$ to odpowiednio szerokość obszaru bufora oraz bariery potencjału po stronie emitera oraz kolektora, zaś w oznacza szerokość studni kwantowej.

Ostatni wyraz we wzorze (4.3.8) uwzględnia oddziaływanie pomiędzy elektronami w studni kwantowej i jest klasycznym oszacowaniem energii Hartree. Jeżeli pominiemy wpływ obszarów akumulacji oraz zubożenia elektronowego w obrębie barier potencjału, opisywany układ można traktować w przybliżeniu, jak układ dwóch kondensatorów płaskich połączonych równolegle. Wtedy pojemność heterostruktury na jednostkę powierzchni wyraża się wzorem

$$C = \epsilon_0 \epsilon \left(\frac{1}{b_E + 0.5w} + \frac{1}{b_C + 0.5w} \right).$$
(4.3.10)

Wyliczając Q z wyrażenia (4.3.8), otrzymujemy

$$Q = \frac{2C}{e} (E'_0 - E_0 + feV_b).$$
(4.3.11)

Równania (4.3.7) oraz (4.3.11) tworzą układ równań, który może zostać rozwiązany graficznie. Na Rys. 4.15 przedstawiony został wykres ładunku Q zakumulowanego w studni kwantowej na jednostkę powierzchni w funkcji energii E'_0 stanu rezonansowego w studni mierzonej względem dna pasma przewodnictwa emitera. Wykresy przedstawione na Rys. 4.15 otrzymane zostały dla kilku wartości napięć V_b . W obliczeniach przyjęto parametry geometryczne zgodne z parametrami opisywanej struktury RTD. Energia E_0 stanu rezonansowego w studni kwantowej oraz jej energetyczne rozmycie Γ zostały wyznaczone przy pomocy metody macierzy transferu i



Rysunek 4.15: Ładunek Q na jednostkę powierzchni zakumulowany w studni kwantowej w funkcji energii E'_0 stanu rezonansowego w studni kwantowej mierzonej względem dna pasma przewodnictwa w emiterze. Rysunek przedstawia graficzne rozwiązanie układu równań (4.3.7) i (4.3.11).

wynoszą: $E_0 = 73.4$ meV oraz $\Gamma = 2.7$ meV. Jedynym parametrem dopasowania w rozpatrywanym modelu jest współczynnik transmisji przez barierę potencjału emitera T_c , którego wartość wynosiła $T_c = 0.022$. Rys. 4.15 pokazuje, że dla napięć $V_b < 0.18$ V oraz $V_b > 0.24$ V układ równań $\left(4.3.7\right)$ i $\left(4.3.11\right)$ posiada dokładnie jedno rozwiązanie, podczas gdy dla zakresu napięć $0.18 \text{ V} < V_b < 0.24 \text{ V}$ układ równań posiada dwa stabilne rozwiązania, które związane są z bistabilnością układu. Przykładowo, dla napięcia $V_b = 0.21$ V rozwiązania układu równań (4.3.7) i (4.3.11) oznaczone zostały odpowiednio jako Q_1 oraz Q_2 . Zauważmy jednak, że zaprezentowany model bistabilności nie uwzględnia powstawania 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$. Model ten uwzględnia jedynie efekt akumulacji ładunku w centralnej studni kwantowej i pokazuje, że oddziaływanie pomiędzy elektronami w studni kwantowej prowadzi do zjawiska bistabilności. Charakterystyka $j(V_b)$ przedstawiona na Rys. 4.11 pokazuje jednak, że źródłem bistabilności, poza efektem opisanym powyżej może być również efekt związany z występowaniem zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Zauważmy, że zakres bistabilności 0.18 V< V_b < 0.24 V, otrzymany w wyniku rozwiązania układu równań (4.3.7) i (4.3.11) odpowiada zakresowi bistabilności na charakterystyce pradowo-napieciowej (Rys. 4.11) w przypadku, w którym pominelibyśmy występowanie zakresów 'plateau'. Prosty model bistabilności przedstawiony powyżej pozwala również na przebadanie wpływu rozmycia energetycznego Γ stanu rezonansowego zlokalizowanego w studni kwantowej na zjawisko bistabilności oraz wyznaczenie warunków, dla których bistabilność w rozpatrywanej strukturze RTD nie występuje. Na Rys. 4.16 (a) przedstawiony został wykres $Q(E'_0)$ wyznaczony dla trzech różnych wartości rozmycia energetycznego Γ stanu rezonansowego oraz wartości napięć $V_b = 0.18$ V oraz $V_b = 0.24$ V, odpowiadających zakresowi bistabilności dla rozpatrywanej struktury RTD. Zauważmy, że wzrost rozmycia energetycznego Γ stanu rezonansowego w studni kwantowej powoduje zwiększenie zakresu napięć, w którym obserwowane jest zjawisko bistabilności. Ponadto zauważmy, że dla odpowiednio dużej wartości rozmycia energetycznego Γ poziomu rezonansowego w studni oraz odpowiednio dobranej struktury geometrycznej możemy otrzymać aż trzy rozwiązania układu równań (4.3.7) i (4.3.11) zaznaczone na Rys. 4.16 (b) odpowiednio przez Q_1 , Q_2 oraz Q_3 . Widzimy więc, że zarówno rozmycie energetyczne Γ stanu rezonansowego w studni kwantowej, jak i geometria układu (pojemność elektryczna C) determinują zjawisko bistabilności prądu. Dla przykładu, na Rys. 4.16 (c) przedstawiony został przypadek, w którym bistabilność nie występuje.

Podsumowując, wykazaliśmy, że bistabilność prądu w strukturach rezonansowo-tunelowych związana jest występowaniem dwóch zjawisk: pierwszym z nich jest oddziaływanie pomiędzy elektronami zakumulowanymi w studni kwantowej, które zmienia energię stanu rezonansowego w studni, zaś drugim, zjawisko tunelowania rezonansowego przez stan kwazi-związany zlokalizowany w obszarze emitera, któremu towarzyszy powstawanie zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$.



Rysunek 4.16: Ładunek Q na jednostkę powierzchni zakumulowany w studni kwantowej w funkcji energii E'_0 stanu rezonansowego w studni kwantowej mierzonej względem dna pasma przewodnictwa emitera. Wykresy przedstawiają graficzne rozwiązania układu równań (4.3.7) i (4.3.11) (a) dla różnych wartości rozmycia energetycznego Γ poziomu rezonansowego w studni kwantowej, (b) w przypadku, w którym układ równań posiada trzy rozwiązania oraz (c) w przypadku, w którym bistabilność nie występuje.

4.3.2 Wpływ parametrów geometrycznych na zjawisko bistabilności

Zanim przejdziemy do prezentacji wyników obliczeń otrzymanych dla różnych parametrów geometrycznych struktury RTD zastanówmy się, jak zmiana parametrów geometrycznych może wpłynąć na wspomniane procesy odpowiedzialne za bistabilność prądu. Zjawiska fizyczne odpo-



Rysunek 4.17: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla czterech różnych szerokości bufora (a) $s_E = s_C = 5$ ML, (b) $s_E = s_C = 7$ ML, (c) $s_E = s_C = 10$ ML oraz (d) $s_E = s_C = 15$ ML, gdzie ML oznacza szerokość pojedynczej warstwy atomowej dla GaAs, 1 ML = 0.565 nm.

wiedzialne za powstawanie zakresu 'plateau' sugerują, że bistabilność związana z tym zakresem może ulegać zmianie przy zmianie warunków akumulacji elektronów w obszarze emitera. Zmiana koncentracji elektronów w obszarze emitera może być uzyskana poprzez zmianę szerokości bufora lub bariery potencjału znajdującej się po stronie emitera. Z drugiej strony bistabilność związana z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej może ulegać zmianie głównie w wyniku zmiany szerokości bariery potencjału znajdującej się po stronie kolektora oraz obszarów buforów, ponieważ zmiana tych wielkości geometrycznych prowadzi do zwiększenia akumulacji elektronów w centralnej studni kwantowej.

Wpływ szerokości bufora

Na Rys. 4.17 (a)-(d) przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla czterech różnych szerokości bufora $s_E=s_C=5$, 7, 10, 15 ML, gdzie ML oznacza szerokość pojedynczej warstwy atomowej, która odpowiada stałej sieci dla GaAs, 1 ML= a = 0.565 nm. Zauważmy, że dla małej szerokości obszaru bufora $s_E=s_C=5$ ML zakres napięć odpowiadających



Rysunek 4.18: Rozkłady gęstości ładunku wraz z profilami energii potencjalnej wyznaczone dla wartości napięć odpowiadających maksimum gęstości prądu na charakterystykach przedstawionych na wykresie 4.17(a)-(d) w przypadku FBS.

bistabilności związanej z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej oraz zakres napieć odpowiadających 'plateau' na charakterystyce prądowo-napięciowej jest znacznie szerszy. Wraz ze wzrostem szerokości bufora, zakres 'plateau' zarówno w przypadku FBS jak i BBS zmniejsza się i zanika całkowicie dla szerokości bufora $s_E=s_C=10$ ML. Równocześnie wraz ze wzrostem obszaru bufora zanika bistabilność układu związana z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej. Dla szerokości bufora $s_E=s_C=15$ ML zjawisko bistabilności prawie nie występuje [Rys. 4.17 (d)]. Aby pokazać dlaczego zjawisko bistabilności zanika dla większych szerokości bufora, na Rys. 4.18 przedstawione zostały rozkłady gęstości elektronowej wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej, otrzymane dla wartości napięć odpowiadających maksimum gęstości prądu na charakterystykach $j(V_b)$ przedstawionych na wykresach 4.17 (a)-(d) w przypadku FBS. Zauważmy, że wzrost szerokości bufora powoduje zmniejszenie koncentracji elektronów w centralnej studni kwantowej oraz wzrost energii potencjalnej w obszarze emitera. Wspomniane efekty przyczyniają się do zaniku zjawiska bistabilności.



Rysunek 4.19: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla asymetrycznej struktury RTD, w której szerokość barier potencjału wynosi: (a) $b_E = 5$ ML, $b_C = 4$ ML oraz (b) $b_E = 5$ ML, $b_C = 7$ ML. Rysunek (c) przedstawia rozkłady gęstości ładunku wraz z profilami energii potencjalnej dla wartości napięć odpowiadających maksimum gęstości prądu na charakterystykach przedstawionych na wykresach (a) oraz (b) w przypadku FBS.

Wpływ asymetrii struktury

Na Rys. 4.19 (a) oraz (b) przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla asymetrycznej struktury RTD, w której szerokość barier potencjału wynosi odpowiednio: (a) $b_E = 5$ ML, $b_C = 4$ ML oraz (b) $b_E = 5$ ML, $b_C = 7$ ML. Zauważmy, że w przypadku, w którym szerokość bariery emitera jest większa od szerokości bariery kolektora obserwujemy znaczne poszerzenie zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Z drugiej strony, zwiększenie szerokości bariery po stronie kolektora powoduje zanik 'plateau' oraz zwiększenie zakresu bistabilności związanej z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej. Na Rys. 4.19 (c) przedstawione zostały rozkłady gęstości ładunku wraz z profilami energii potencjalnej dla wartości napięć odpowiadających maksimum gęstości prądu na charakterystykach przedstawionych na wykresie 4.19 (a) oraz (b) w przypadku FBS. Zauważmy, że koncentracja elektronów w centralnej studni kwantowej jest niemal dwa razy większa w przypadku, gdy szerokość bariery kolektora jest większa od szerokości bariery emitera. Taki rodzaj asymetrii układu skutkuje poszerzeniem zakresu napięć odpowiadających bistabilności związanej z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej. Z drugiej strony w przypadku, w którym bariera po stronie emitera jest szersza od bariery po stronie kolektora obserwujemy poszerzenie zakresu napięć odpowiadających bistabilności związanej z występowaniem 'plateau' na charakterystyce prądowo-napięciowej.

4.4 Oscylacje prądu o wysokiej częstotliwości

Nieliniowość procesów transportu w strukturach rezonansowo-tunelowych, poza zjawiskiem bistabilności, objawia się również występowaniem oscylacji prądu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Na Rys. 4.20 (a) przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa otrzymana metodą Wignera-Poissona zależną od czasu. Dla porównania, linią niebieską nanie-



Rysunek 4.20: (a) Charakterystyka prądowo-napięciowa otrzymana metodą Wignera-Poissona zależną od czasu. Dla porównania, linią niebieską naniesiona została charakterystyka $j(V_b)$ uzyskana metodą Wignera-Poissona niezależną od czasu. Na charakterystyce $j(V_b)$ wartość gęstości prądu w zakresie oscylacji wyznaczona została poprzez uśrednienie gęstości prądu w nanourządzeniu w czasie jednego, pełnego okresu oscylacji. Amplituda oscylacji zaznaczona została natomiast w postaci pionowych słupków błędu. Wstawka wewnętrzna przedstawia zależność częstotliwości oscylacji w funkcji napięcia. (b) Wykres średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu uzyskany dla napięcia $V_b = 0.1$ V, dla którego układ dochodzi do stanu ustalonego. (c) Oscylacje średniej gęstości prądu w nanourządzeniu uzyskane dla napięcia $V_b = 0.22$ V.

siona została również charakterystyka $j(V_b)$ otrzymana metodą Wignera-Poissona niezależną od czasu. Symulacje transportu elektronowego metodą zależną od czasu pokazały, że w zakresie



Rysunek 4.21: Oscylacje średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu uzyskane dla napięcia $V_b = 0.233$ V.

napieć, w których układ wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego pojawiaja się oscylacje prądu o częstotliwości rzędu 7.5 THz. Zakres napięć, w których występują oscylacje prądu zaznaczony został na Rys 4.20 (a) pionowymi liniami przerywanymi. W zakresie tym gęstość prądu w nanourządzeniu nie jest stała, lecz zmienia się wraz z położeniem. Na Rys. 4.20 (a) wartość gęstości prądu w zakresie oscylacji obliczona została poprzez uśrednienie gęstości prądu w nanourządzeniu w czasie jednego, pełnego okresu oscylacji, zaś amplituda oscylacji naniesiona została w postaci pionowych słupków błędu. Rys. 4.20 przedstawia również wykresy średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu uzyskane dla napięcia: (b) $V_b = 0.1$ V, dla którego układ dochodzi do stanu ustalonego oraz (c) $V_b = 0.22$ V, dla którego obserwujemy oscylacje prądu o wysokiej częstotliwości. Zauważmy, że w zakresie napięć, w których występują oscylacje prądu, częstotliwość oscylacji nie jest stała, lecz zmienia się w sposób niemal liniowy w funkcji napiecia. co zostało pokazane na wstawce wewnętąrz Rys. 4.20 (a). Aby dokładnie przeanalizować zjawisko oscylacji prądu w rozpatrywanym nanourządzeniu rozważmy oscylacje uzyskane dla wartości napięcia $V_b = 0.233$ V (Rys. 4.21). W zakresie oscylacji prądu rozkład gęstości elektronów w nanourządzeniu oscyluje w funkcji czasu. Na Rys. 4.22 przedstawiony został wykres koncentracji elektronowej w funkcji położenia z oraz czasu t uzyskany dla napięcia $V_b = 0.233$ V. Rys. 4.22 przedstawia oscylacyjny charakter zmian gęstości elektronowej w nanourządzeniu, przy czym zauważmy, że największe zmiany koncentracji elektronowej dotycza obszaru studni kwantowej oraz obszaru emitera. Na Rys. 4.23 przedstawiony został wykres koncentracji elektronów n_E w obszarze emitera oraz n_{QW} w obszarze centralnej studni kwantowej w funkcji czasu uzyskany



Rysunek 4.22: Oscylacje gęstości elektronowej w funkcji położenia z oraz czasu t uzyskane dla napięcia $V_b = 0.233$ V. Obszary barier potencjału zaznaczone zostały białymi liniami przerywanymi.

dla napięcia $V_b = 0.233$ V. Zauważmy, że oscylacje koncentracji elektronowej w centralnej studni kwantowej są przesunięte w fazie w stosunku do oscylacji koncentracji elektronów w obszarze emitera o wartość bliska $\pi/2$. Na Rys. 4.24 przedstawione zostały rozkłady gestości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej w nanourządzeniu dla poszczególnych chwil czasu t_1, t_2 oraz t_3 zaznaczonych na Rys. 4.23. Chwile czasu t_1 , t_2 oraz t_3 odpowiadają kolejno sytuacji, w której koncentracja elektronów w centralnej studni kwantowej jest największa, pośrednia oraz najmniejsza. W celu wyjaśnienia zjawiska oscylacji prądu w strukturach rezonansowo-tunelowych opiszmy procesy fizyczne zachodzące w nanourządzeniu podczas wychodzenia układu z obszaru tunelowania rezonansowego w zakresie ujemnego oporu różniczkowego (NDR). W zakresie NDR współczynnik odbicia elektronów od bariery emitera gwałtownie rośnie. W wyniku interferencji w obszarze emitera dochodzi do wytworzenia efektywnego ładunku dodatniego, który powoduje obniżenie dna pasma przewodnictwa tuż przed barierą emitera. W powstałej w ten sposób studni potencjału tworzy się stan kwazi-związany o energii E_{E1} , niewiele różniącej się od energi
i E_{QW1} stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej. Poniż
ej pokażemy, że wzajemne sprzężenie obu tych stanów prowadzi do zjawiska oscylacji prądu. Dokładna analiza opisywanego problemu wymagałaby podejścia kwantowo-mechanicznego zależnego od czasu, które pozwoliłoby na określenie maksimum prawdopodobieństwa tunelowania elektronu w czasie, dając jednocześnie informację o najbardziej prawdopodobnej energii stanu elektronowego. Innymi słowy, poziomy energetyczne, które staramy się zidentyfikować nie mogą być traktowane



Rysunek 4.23: Koncentracja elektronów n_E w obszarze emitera oraz n_{QW} w obszarze centralnej studni kwantowej w funkcji czasu t wyznaczona dla napięcia $V_b = 0.233$ V, dla którego obserwujemy oscylacje prądu.

jako wartości własne energii, ponieważ rozpatrywany problem zależy od czasu i nie jest zagadnieniem własnym, również z tego powodu, że opisywany układ jest układem otwartym. Mimo tego z dobrym przybliżeniem energie poziomów kwazi-związanych w nanourządzeniu można oszacować używając przybliżonej analizy opartej na zależnym od czasu równaniu Schrödingera. Przybliżenie to możemy uzasadnić jeśli założymy, że zależny od czasu profil energii potencjalnej można zapisać w postaci $U(z,t) = U_0(z) + \Delta U(z,t)$, gdzie wyraz $\Delta U(z,t)$ zawiera zależność od czasu i jest niewielkim zaburzeniem w stosunku do wyrazu $U_0(z)$ niezależnego od czasu. Funkcje falowe stanów kwazi-związanych, odpowiednio w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej, możemy wyrazić w przybliżony sposób w postaci

$$\Psi_E(z,t) = \psi_E(z,t)e^{-iF_E(t)/\hbar},$$
(4.4.1)

$$\Psi_{QW}(z,t) = \psi_{QW}(z,t)e^{-iF_{QW}(t)/\hbar},$$
(4.4.2)

gdzie $F_E(t) = \int_0^t E_{E1}(t')dt'$ oraz $F_{QW}(t) = \int_0^t E_{QW1}(t')dt'$, zaś $E_{E1}(t)$ oraz $E_{QW1}(t)$ to części rzeczywiste zależnych od czasu energii stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz studni kwantowej.

Zauważmy, że funkcje falowe zaproponowane powyżej są przybliżeniem dokładnego rozwiązania równania Schödingera zależnego od czasu w postaci $\Psi_n(z,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt' \hat{H}(z,t')} \Psi_n(z,t_0)$, zaś funkcje $\psi_{QW}(z,t)$ oraz $\psi_E(z,t)$ zawierają również efekt skończonego czasu życia stanu kwazizwiązanego (cześć urojona energii stanu rezonansowego).

Rozpatrywany układ opisany jest równaniem

$$\hat{H}(z,t)\Psi_n(z,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_n(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial F_n(t)}{\partial t}\Psi_n(z,t) + i\hbar \frac{\partial \Psi_n(z,t)}{\partial \psi_n(z,t)}\frac{\partial \psi_n(z,t)}{\partial t}.$$
(4.4.3)



Rysunek 4.24: Rozkłady koncentracji elektronów wraz z profilami energii potencjalnej w nanourządzeniu dla chwil czasu t_1 , t_2 oraz t_3 zaznaczonych na Rys. 4.23. Chwile czasu t_1 , t_2 oraz t_3 odpowiadają kolejno sytuacji, w której koncentracja elektronów w centralnej studni kwantowej jest największa, średnia oraz najmniejsza.

W przypadku w którym wyraz energii potencjalnej zależny od czasu $\Delta U(z,t)$ jest niewielkim zaburzeniem takim, że $\Delta U(z,t) \rightarrow 0$ to $\partial \psi_n(z,t)/\partial t \rightarrow 0$ i równanie przyjmuje postać

$$\hat{H}(z,t)\Psi_n(z,t) = E_n(t)\Psi_n(z,t), \qquad (4.4.4)$$

gdzie $\partial F_n(t)/\partial t = E_n(t).$

Funkcja falowa stanu będącego superpozycją stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w obszarze emitera oraz kolektora ma postać

$$\Psi(z,t) = C_1 \Psi_E(z,t) + C_2 \Psi_{QW}(z,t).$$
(4.4.5)

W stanie opisanym funkcją falową $\Psi(z,t)$ średnia gęstość prądu wyraża się wzorem

$$\bar{j} = \langle \Psi | \hat{j} | \Psi \rangle = |C_1|^2 \langle \psi_E | \hat{j} | \psi_E \rangle + |C_2|^2 \langle \psi_{QW} | \hat{j} | \psi_{QW} \rangle + \\
+ 2\Re \left\{ C_1^* C_2 \langle \psi_E | \hat{j} | \psi_{QW} \rangle \exp \left[\frac{-i(F_{QW}(t) - F_E(t))}{\hbar} \right] \right\}, \quad (4.4.6)$$

W wyrażeniu (4.4.6) dwa pierwsze wyrazy po prawej stronie równania determinują wartość średnią gęstości prądu, wokół której występują oscylacje, natomiast trzeci wyraz w tym wyrażeniu odpowiedzialny jest za występowanie oscylacji prądu. Widzimy zatem, że wzajemne sprzężenie stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej prowadzi do zjawiska oscylacji prądu o wysokiej częstotliwości. Przeanalizujmy zmiany energii stanów kwazi-związanych w obszarze emitera (E_{E1}) oraz centralnej studni kwantowej (E_{QW1}) dla rozpatrywanego napięcia $V_b = 0.233$ V. Energie stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz



Rysunek 4.25: (a) Współczynnik transmisji T w funkcji energii E policzony w oparciu o samouzgodniony profil energii potencjalnej dla chwil czasu t_1 , t_2 oraz t_3 zaznaczonych na Rys. 4.23. Położenie maksimum współczynnika transmisji określa energie E_{QW1} stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej. (b) Średnia gęstość stanów rezonansowych ρ w funkcji energii Ewyznaczona dla chwil czasu t_1 , t_2 oraz t_3 zaznaczonych na Rys. 4.23. Położenie maksimum średniej gęstości stanów rezonansowych odpowiada energii E_{E1} stanu kwazi-związanego w obszarze emitera.

centralnej studni kwantowej wyznaczone zostały za pomoca dwóch różnych metod. Energia stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej wyznaczona została za pomocą metody macierzy transferu, podczas gdy energia stanu kwazi-związanego w obszarze emitera wyznaczona została przy użyciu metody stabilizacji. Zastosowanie dwóch odrębnych metod wyznaczania energii stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w różnych obszarach nanourządzenia podyktowane jest trudnościami numerycznymi związanymi z obiema metodami. Zauważmy bowiem, że metoda macierzy transferu odnosi się jedynie do dodatnich wartości energii, a zatem nie obejmuje swoim zakresem energii stanów kwazi-związanych w obszarze emitera. Z drugiej strony w metodzie stabilizacji dysproporcja pomiędzy pikami średniej gęstości stanów rezonansowych, związana z rozmyciem energetycznym poziomów w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej jest na tyle duża, że pik pochodzący od stanu kwazi-związanego w studni kwantowej jest niemal niewidoczny (patrz Dodatek C). Na Rys. 4.25 (a) przedstawione zostały współczynniki transmisji T(E) policzone w oparciu o samouzgodniony profil potencjału dla chwil czasu t_1 , t_2 oraz t_3 zaznaczonych na Rys. 4.23 (a). Położenie maksimum współczynnika transmisji odpowiada energi
i E_{QW1} stanu kwazi-związanego w centralnej studni kwantowej. Na Rys. 4.25 (b) przedstawiony został natomiast wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii wyznaczony dla chwil czasu t_1, t_2 oraz t_3 . W tym przypadku położenie maksimum średniej gęstości stanów rezonansowych odpowiada energii E_{E1} stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera. Zauważmy, że w chwili czasu t_1 energia stanu kwazi-związanego w

Rozdział 4: Transport elektronowy w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej

obszarze studni kwantowej spełnia warunek tunelowania rezonansowego, podczas gdy w chwili czasu t_3 stan kwazi-związany w studni częściowo wychodzi z obszaru tunelowania rezonansowego, co skutkuje spadkiem gęstości elektronowej w studni kwantowej obserwowanej na Rys. 4.23. Ponadto zauważmy, że oscylacje energii stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej są przesunięte w fazie. Przesunięcie to zostało dokładnie zilustrowane na Rys. 4.26 (a), który przedstawia zmiany energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji czasu, policzone względem średniej energii potencjalnej w czasie jednego, pełnego okresu oscylacji. Widzimy, że zmiana energii potencjalnej w obszarze emitera jest przesunięta w fazie w stosunku do zmiany energii potencjalnej w obszarze studni kwantowej, co prowadzi do zmiany energii stanów kwazi-związanych. Proces ten skutkuje oscylacyjnymi zmianami gęstości prądu w nanourządzeniu zaprezentowanymi na Rys. 4.26 (b).



Rysunek 4.26: (a) Zmiany energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji czasu obliczone względem średniej energii potencjalnej w czasie jednego, pełnego okresu oscylacji. (b) Gęstość prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu podczas oscylacji. Obszary barier potencjału zaznaczone zostały białymi liniami przerywanymi.

Podsumowując, wykazaliśmy, że oscylacje gęstości prądu wynikają ze sprzężenia stanów kwazizwiązanych zlokalizowanych w obszarze emitera oraz centralnej studni kwantowej. Zjawisko to występuje w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce $j(V_b)$, w którym obniżenie dna pasma przewodnictwa przed barierą emitera jest na tyle duże, że w obszarze emitera powstaje stan kwazi-związany.

4.5 Wpływ temperatury oraz rozpraszania na transport elektronowy

W ostatniej części niniejszego rozdziału zbadany zostanie wpływ temperatury oraz zjawisk rozpraszania na transport elektronowy w rozpatrywanej strukturze RTD. W metodzie Wignera-Poissona wpływ temperatury na transport elektronowy uwzględniony jest poprzez warunki brzegowe (równanie 3.3.1). Na Rys. 4.27 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe wyznaczone dla różnych wartości temperatur: (a) T = 4.2 K, (b) T = 150 K oraz (c) T = 300 K. Wraz ze wzrostem temperatury obserwujemy zanik zakresu 'plateau' na charakterystykach



Rysunek 4.27: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla temperatury (a) T = 4.2 K, (b) T = 150 K oraz (c) T = 300 K.

prądowo-napięciowych. Dla temperatury pokojowej (T = 300 K) zakres 'plateau' całkowicie zanika, pozostaje natomiast bistabilność związana z akumulacją ładunku w centralnej studni kwantowej. Równanie Wignera w postaci (2.2.18) pozwala również na zbadanie wpływu rozpraszania na transport elektronowy w przybliżeniu czasu relaksacji. W niniejszej pracy czas



Rysunek 4.28: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla kilku różnych wartości czasu relaksacji $\tau.$

relaksacji τ , zdefiniowany jako średni czas pomiędzy aktami rozpraszania, traktowany jest jako parametr, który charakteryzuje wszystkie możliwe procesy rozpraszania w układzie, w tym rozpraszanie na fononach i domieszkach. Na Rys. 4.28 przedstawione zostały charakterystyki $j(V_b)$ otrzymane dla rozpatrywanej struktury RTD oraz różnych wartości czasu relaksacji τ . Zauważmy, że wraz ze zmniejszaniem się czasu relaksacji τ , maksymalna wartość prądu na charakterystykach $j(V_b)$ maleje. Ponadto zakres 'plateau' całkowicie znika. Ponieważ zjawiska rozpraszania powodują zmniejszenie akumulacji elektronów w studni kwantowej mają one również istotny wpływ na bistabilność w rozpatrywanym układzie. Na Rys. 4.29 przedstawione zostały charakterystyki $j(V_b)$ otrzymane w przypadku FBS oraz BBS dla czasów relaksacji równych odpowiednio: (a) $\tau = 3000$ fs, (b) $\tau = 1000$ fs, (c) $\tau = 400$ fs, (d) $\tau = 100$ fs. Obliczenia przeprowadzone zostały w temperaturze T = 4.2 K. Zauważmy, że wraz ze wzrostem prawdopodobieństwa rozpraszania (zmniejszenie czasu relaksacji) bistabilność prądu stopniowo zanika. A zatem zjawisko bistabilności, opisywane w niniejszym rozdziale może zostać zaobserwowane jedynie w niskich temperaturach, w których wpływ rozpraszania elektronów na fononach jest pomijalnie mały.



Rysunek 4.29: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane w przypadku FBS oraz BBS dla czasów relaksacji (a) $\tau = 3000$ fs, (b) $\tau = 1000$ fs, (c) $\tau = 400$ fs, (d) $\tau = 100$ fs.

4.6 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale zbadane zostały własności transportu elektronowego w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaAs/AlGaAs. Charakterystyczne własności struktur tego typu wynikają z tunelowania elektronowego przez stany rezonansowe w studni kwantowej. Szczególną uwagę poświęcono zakresowi 'plateau', który występuje w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce $j(V_b)$. W rozdziale pokazano, że zakres 'plateau' związany jest z tworzeniem się stanu kwazi-związanego w obszarze emitera oraz tunelowaniem rezonansowym elektronów przewodnictwa przez ten stan. Proces tworzenia się stanów kwazizwiązanym w obszarze emitera przeanalizowany został w funkcji czasu.

Ponadto w niniejszym rozdziale omówione zostało zjawisko bistabilności obserwowane eksperymentalnie w strukturach rezonansowo-tunelowych. Badania nad bistabilnością rozpatrywanego układu pozwoliły na wyodrębnienie dwóch jej źródeł: pierwszego, związanego z oddziaływaniem pomiędzy elektronami zakumulowanymi w centralnej studni kwantowej oraz drugiego, związanego z tunelowaniem elektronów przez stan kwazi-zwiazany, który powstaje w obszarze emitera w zakresie 'plateau'. Analiza bistabilności w funkcji parametrów geometrycznych struktury RTD pozwoliła zauważyć, że bistabilność jest zjawiskiem silnie zależnym od struktury geometrycznej nanourządzenia. Szczególny wpływ na zjawisko bistabilności ma szerokość barier potencjału oraz obszarów bufora. Wyniki symulacji dotyczące zjawiska bistabilności prądu, zaprezentowane w niniejszym rozdziale jednoznacznie pokazują, że bistabilność wynika z procesów fizycznych zachodzących wewnątrz nanourządzenia, potwierdzając tym samym tezę zaproponowaną przez Goldmana [18] oraz wyjaśniając kontrowersje związane z naturą zjawiska bistabilności.

Symulacje zależne od czasu pozwoliły również na wyznacznie oscylacji prądu występujących w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Zjawisko oscylacji przeanalizowane zostało w oparciu o zmienne w czasie rozkłady koncentracji elektronów oraz profile energii potencjalnej w nanourządzeniu. Wykazano, że źródłem oscylacji prądu jest sprzężenie stanu kwazi-związanego, zlokalizowanego w centralnej studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym, który powstaje w obszarze emitera w zakresie ujemnego oporu różniczkowego.

W ostatniej częsci rozdziału przedstawiono wyniki badań wpływu temperatury oraz rozpraszania na zjawiska transportu elektronowego w rozpatrywanej strukturze RTD.

Wyniki przedstawione w tym rozdziale mają istotne znaczenie z punktu widzenia całości rozprawy, gdyż opisywane własności transportu elektronowego w strukturze RTD, zachodzą również w układach bardziej złożonych tj. trójbarierowa dioda RTD czy magnetyczne struktury rezonansowo-tunelowe, które są przedmiotem badań prezentowanych w dalszej części rozprawy.

Rozdział 5

Transport elektronowy w strukturze trójbarierowej diody rezonansowo-tunelowej

W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego w trójbarierowej diodzie rezonansowo-tunelowej (TRTD - z ang. Triple Barrier Resonant Tunnelling Diode) opartej na GaAs/AlGaAs. W rozpatrywanej strukturze TRTD wprowadzono możliwość zmiany energii ΔU dna pasma przewodnictwa jednej ze studni kwantowych. Własności transportu elektronowego w opisywanej strukturze przeanalizowane zostaną w funkcji parametru ΔU . Szczególną uwagę poświęcimy zakresowi 'plateau', zjawisku bistabilności oraz oscylacji prądu. Mimo, iż struktura TRTD [103, 104, 105] jest naturalny rozszerzeniem struktury RTD prezentowanej w poprzednim rozdziale, zgodnie z nasza wiedzą do tej pory nie ukazała się żadna publikacja zajmująca się problemem bistabilności oraz oscylacji prądu w strukturach TRTD.

5.1 Model nanostruktury

Przedmiotem badań niniejszego rozdziału jest transport elektronowy w strukturze trójbarierowej diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaAs/Al_xGa_{1-x}As [Rys. 5.1 (b)]. Różnica energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy GaAs oraz Al_xGa_{1-x}As prowadzi do powstania efektywnego profilu energii potencjalnej składającego się z dwóch studni kwantowych ograniczonych trzema barierami potencjału. Aktywny, niedomieszkowany obszar nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-GaAs) obszarami bufora z GaAs. W rozpatrywanej strukturze TRTD wprowadzono możliwość kontrolowania warunków transportu elektronowego poprzez zmianę energii dna pasma przewodnictwa w prawej studni kwantowej o wartość ΔU . Eksperymentalnie zmiana energii dna pasma przewodnictwa w studni kwantowej może być zrealizowana poprzez odpowiednie domieszkowanie warstwy Al_xGa_{1-x}As (x < 0.3) lub alternatywnie, poprzez wytworzenie elektrody bramki w sąsiedztwie prawej studni kwantowej, do której przyłożone zostanie odpowiednie napięcie. W tym ostatnim przypadku zmiana energii dna pasma przewodnictwa w studni kwantowej zależy jednak od położenia, a zatem jedynie w grubym przybliżeniu odpowiada rozpatrywanemu modelowi nanourządzenia. Na Rys. 5.1 (a) przedstawiony został samouzgodniony profil energii potencjalnej w nanourządzeniu, otrzymany dla napięcia $V_b = 0$. Symulacje transportu elektronowego w strukturze TRTD przeprowadzone



Rysunek 5.1: (a) Samouzgodniony profil energii potencjalnej w trójbarierowej diodzie rezonansowo-tunelowej (TRTD) opartej na GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Aktywny obszar nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-GaAs) obszarami bufora z GaAs. Kierunek z wyznacza kierunek wzrostu warstw półprzewodnikowych, zaś $\mu_{E,C}$ to potencjał chemiczny odpowiednio emitera oraz kolektora. Parametr ΔU określa zmianę energii dna pasma przewodnictwa w prawej studni kwantowej. (b) Schemat rozpatrywanej heterostruktury półprzewodnikowej TRTD.

zostały dla następujących parametrów geometrycznych: szerokość prawej i lewej studni kwantowej wynosi 5 nm, szerokość barier potencjału z Al_{0.3}Ga_{0.7}As jest równa 3 nm, szerokość obszarów bufora z GaAs po obu stronach nanourządzenia wynosi 3 nm, długość kontaktów (emitera oraz kolektora) wynosi 19 nm, koncentracja zjonizowanych donorów $N_D = 2 \times 10^{18}$ cm⁻³. Całkowita długość nanourządzenia wynosi zatem 60 nm. Wysokość barier potencjału $U_0 = 0.27$ eV, odpowiada różnicy energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy Al_{0.3}Ga_{0.7}As oraz GaAs.

Symulacje przeprowadzone zostały w przybliżeniu stałej masy efektywnej elektronu dla całego obszaru nanourządzenia, równej masie elektronu w GaAs, $m = 0.0667 m_0$, gdzie m_0 to masa spoczynkowa elektronu. Podobnie stała elektryczna dla całego obszaru nanourządzenia odpowiada stałej elektrycznej dla GaAs i wynosi $\epsilon = 12.9$.

Symulacje przeprowadzone zostały w temperaturze 4.2 K na dyskretnej siatce w przestrzeni fazowej o liczbie punktów $N_z = 106$, $N_k = 100$, przy założeniu $\Delta_z = a$, gdzie a = 0.565 nm

odpowiada stałej sieci dla GaAs. W symulacjach zero energii potencjalnej odpowiada energii dna pasma przewodnictwa w elektrodzie emitera $E_C^E = 0$.

5.2 Własności transportu elektronowego

5.2.1 Charakterystyka prądowo-napięciowa

Na Rys. 5.2 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe $j(V_b)$ otrzymane dla różnych wartości parametru ΔU . Rys. 5.2 pokazuje, że wraz ze wzrostem energii dna pasma



Rysunek 5.2: Charakterystyki prądowo-napięciowe dla rozpatrywanej struktury TRTD, wyznaczone dla różnych wartości parametru ΔU . Dla każdej wartości parametru ΔU wyznaczony został współczynnik PVR, którego wartość przedstawiona została na rysunku.

przewodnictwa w prawej studni kwantowej (wzrost parametru ΔU), maksimum gęstości prądu na charakterystykach $j(V_b)$ przesuwa się w stronę wyższych napięć, a jednocześnie wartość gęstości prądu w maksimum rośnie. Ponadto dla każdej wartości parametru ΔU wyznaczony został współczynnik PVR, którego wartość naniesiona została na Rys. 5.2. Widzimy, że w zakresie $0 \leq \Delta U \leq 110$ meV współczynnik PVR powoli wzrasta do wartości PVR=2. Dalszy wzrost wartości parametru ΔU powoduje gwałtowny wzrost współczynnika PVR [106], który dla $\Delta U = 130$ meV osiąga wartości 9.6. Dla porównania przypomnijmy, że wartość parametru PVR dla struktury RTD, rozpatrywanej w Rozdziale 4, wynosiła 3.8. Ponadto zauważmy, że dla wartości parametru $\Delta U = 130$ meV, dla której obserwujemy nagły wzrost współczynnika PVR, na charakterystyce $j(V_b)$ pojawia się zakres 'plateau'. Rozważmy proces tunelowania rezonansowego przez rozpatrywaną strukturę TRTD analizując zmiany koncentracji elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu. Na Rys. 5.3 przedstawione zostały rozkłady gęstości elektronowej w nanostrukturze w funkcji położenia z oraz napięcia V_b wyznaczone dla (a) $\Delta U = 30$ meV oraz (b) $\Delta U = 110$ meV. Zauważmy,



Rysunek 5.3: Rozkład gęstości elektronowej n w funkcji napięcia V_b oraz położenia z, wyznaczony dla (a) $\Delta U = 30$ meV oraz (b) $\Delta U = 110$ meV. Obszary barier potencjału zaznaczone zostały białą linią przerywaną.

że dla większej wartości parametru ΔU maksimum koncentracji elektronowej w prawej studni kwantowej występuje dla wyższych napięć, podczas gdy maksimum koncentracji elektronowej w lewej studni kwantowej występuje dla niższych wartości napięć. Aby szczegółowo przeanalizować zjawisko tunelowania rezonansowego w rozpatrywanej strukturze TRTD, na Rys. 5.4 przedstawione zostały rozkłady gestości elektronowej wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej otrzymane dla wartości parametru $\Delta U = 30 \text{ meV}$ [Rys. 5.4 (a-c)] oraz $\Delta U = 110 \text{ meV}$ [Rys. 5.4 (d-e)], dla następujących wartości napięć: $V_b = 0$ [Rys. 5.4 (a), (d)], napięcia odpowiadającego maksimum gęstości prądu [Rys. 5.4 (b), (e)] oraz napięcia odpowiadającego minimum gęstości [Rys. 5.4 (c), (f)] prądu na charakterystyce $j(V_b)$. Po prawej stronie każdego z rysunków 5.4 umieszczony został wykres współczynnika transmisji w funkcji energii T(E), przedstawiający energie kolejnych stanów rezonansowych w obszarze studni kwantowych. Na Rys. 5.4 (a) oraz (d) widzimy, że zarówno dla wartości parametru $\Delta U = 30$ meV jak i $\Delta U = 110$ meV rozkład gęstości elektronowej dla napięcia $V_b = 0$ charakteryzuje się niewielką akumulacją ładunku w obszarze lewej studni kwantowej, podczas gdy koncentracja elektronów w prawej studni kwantowej jest bliska zeru. Dla obu wartości parametru ΔU , energie stanów rezonansowych w studniach kwantowych są większe od potencjału chemicznego w obu kontaktach. Wzrost napięcia V_b powoduje przesunięcie energii dna pasma przewodnictwa, a tym samym energii stanów rezonansowych zlokalizowanych w obszarze studni kwantowych w stronę niższych wartości. Dla napięć



Rysunek 5.4: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej uzyskane dla wartości parametru $\Delta U = 30 \text{ meV}$ (a-c) oraz $\Delta U = 110 \text{ meV}$ (d-e), dla różnych napięć zewnętrznych: $V_b = 0$ (a), (d), napięcia odpowiadającego maksimum gęstości prądu (b), (e) oraz napięcia odpowiadającego minimum gęstości prądu (c), (f) na charakterystyce $j(V_b)$. Po prawej stronie każdego z rysunków umieszczony został wykres współczynnika transmisji w funkcji energii T(E).

odpowiadających maksimum gęstości prądu [Rys. 5.4 (b) oraz (e)] obserwujemy akumulację elektronów zarówno w lewej jak i prawej studni kwantowej, przy czym koncentracja elektronów w studniach jest większa dla wartości parametru $\Delta U = 110$ meV. Dalsze wyjaśnienie procesu tunelowania elektronowego w strukturze TRTD wymaga krótkiego komentarza dotyczącego pojęcia stanów rezonansowych w rozpatrywanym nanourządzeniu. Dla układu dwóch sprzężonych studni kwantowych, w zależności od sprzężenia pomiędzy studniami kwantowymi, mierzonego grubością bariery pomiędzy nimi, funkcje falowe poszczególnych stanów rezonansowych mogą być silniej zlokalizowane w jednej konkretnej studni kwantowej lub mogą być zlokalizowane w obu studniach kwantowych jednocześnie. Jeżeli funkcja falowa stanu rezonansowego jest zlokalizowane w konkretnej studni kwantowej możemy w przybliżeniu mówić, że stan ten odnosi się do tej studni kwantowej, w której zlokalizowana jest jego funkcja falowa. A zatem dla układu dwóch

sprzężonych studni kwantowych warunek tunelowania rezonansowego musi zostać rozszerzony w stosunku do warunku tunelowania rezonansowego przez pojedynczą studnię kwantową. Warunek tunelowania rezonansowego przez strukturę TRTD wymaga bowiem nie tylko, aby energie stanów rezonansowych w studniach kwantowych znajdowały się w oknie transportu, lecz również, aby energie stanów rezonansowych zlokalizowanych w obu studniach były sobie równe, czyli $E_C \leq E_{QW}^L = E_{QW}^P \leq E_C + \mu$. Jeżeli spojrzymy na współczynniki transmisji T(E) wyznaczone dla napięć odpowiadających maksimum gęstości prądu [Rys. 5.4 (b) oraz (e)] zauważmy, że energie stanów rezonansowych zlokalizowanych w poszczególnych studniach kwantowych dla wartości parametru $\Delta U = 110$ meV są niemal jednakowe, podczas gdy energie te dla wartości parametru $\Delta U = 30$ meV nieznacznie się różnią . Wzajemne położenie stanów rezonansowych na skali energii w obu studniach kwantowych tłumaczy wzrost gęstości prądu oraz koncentracji elektronowej w studniach dla wartości parametru $\Delta U = 110$ meV. Na Rys. 5.4 (c) oraz (f) widzimy, że dla napięć odpowiadających minimum gęstości prądu jedynie stan rezonansowy zlokalizowany w lewej studni kwantowej spełnia warunki tunelowania rezonansowego. W tym przypadku prawdopodobieństwo tunelowania przez prawą studnię kwantową jest małe, w związku z czym wartość gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$ spada.

Podsumowując, widzimy, że zmiana energii ΔU dna pasma przewodnictwa w prawej studni kwantowej pozwala na uzyskanie takiej struktury TRTD, w której spełnione będą warunki tunelowania rezonansowego przez obie studnie kwantowe.

5.2.2 Zakres 'plateau'

W poprzednim paragrafie zauważyliśmy, że dla wartości parametru $\Delta U = 130$ meV na charakterystyce $i(V_b)$ pojawia się waski zakres 'plateau', z którym związany jest wzrost współczynnika PVR [106] (Rvs. 5.2). Aby przeanalizować występowanie zakresu 'plateau' w funkcji parametru ΔU , na Rys. 5.5 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe uzyskane dla wartości parametru $\Delta U \ge 120$ meV. Zauważmy, że wartość parametru $\Delta U = 130$ meV jest wartością graniczną, powyżej której na charakterystyce $i(V_b)$ pojawia się zakres 'plateau'. Ponadto wraz ze wzrostem parametru ΔU , szerokość zakresu 'plateau' powiększa się. W celu przeanalizowania procesów transportu elektronowego, które pojawiają się w zakresie 'plateau' rozważmy charakterystykę prądowo-napięciową dla wartości parametru $\Delta U = 140$ meV. Na Rys. 5.6 przedstawiony został rozkład gestości elektronowej w nanourządzeniu wraz z samouzgodnionym profilem energii potencjalnej wyznaczony dla napięcia $V_b = 0.43$ V odpowiadającego zakresowi 'plateau'. Na Rys. 5.6 możemy zaobserwować charakterystyczny rozkład koncentracji elektronowej z obszarem zubożenia gęstości elektronów w obszarze emitera. Efektywny ładunek dodatni, jaki tworzy się w obszarze emitera powoduje powstanie płytkiej studni potencjału, w której powstają stany kwazi-zwiazane. Zakres 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$ dla struktury TRTD, podobnie jak w przypadku struktury RTD związany jest z tunelowaniem rezonansowym elektronów przewodnictwa przez stan kwazi-związany, który powstaje w zakresie ujemnego oporu różniczkowego w



Rysunek 5.5: Charakterystyki prądowo-napięciowe uzyskane dla $\Delta U = 120, 130, 140, 150$ meV.

obszarze emitera. Szczegółowy opis tego procesu przedstawiony został w rozdziale 4.2.2. Aby pokazać, który ze stanów kwazi-związanych uczestniczy w procesie tunelowania rezonansowego w zakresie 'plateau', na Rys. 5.7 (a) przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii wyznaczony dla napięcia $V_b = 0.43$ V. Położenia poszczególnych pików na wykresie 5.7 (a) odpowiadają kolejno energiom: E_{QW1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych, E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera, E_{QW2} drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych oraz E_{E2} drugiego stanu kwazizwiązanego w obszarze emitera. Ponadto na Rys. 5.7 (b) przedstawione zostały funkcje falowe poszczególnych stanów kwazi-związanych. Zauważmy, że funkcje falowe odpowiadające stanom kwazi-związanym o energii E_{QW1} oraz E_{QW2} zlokalizowane są zarówno w lewej jak i prawej studni kwantowej, przy czym funkcja falowa odpowiadająca stanowi kwazi-związanemu o energii E_{QW1} jest zlokalizowana głównie w lewej studni kwantowej, natomiast funkcja falowa odpowiadająca stanowi kwazi-związanemu o energi
i E_{QW2} jest silniej zlokalizowana w prawej studni kwantowej. Na Rys. 5.7 (a) widzimy, że energia E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera, z dokładnością do rozmycia energetycznego obu stanów, jest równa energii E_{QW2} drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych. A zatem w omawianym zakresie 'plateau' elektrony tunelują rezonansowo z obszaru emitera kolejno przez pierwszy stan kwazi-związany w obszarze emitera o energii E_{E1} , drugi stan kwazi-związany w obszarze studni kwantowych o energii E_{QW2} do obszaru kolektora. Proces ten prowadzi do wzrostu gęstości prądu w zakresie 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$. Zauważmy, że wzajemna relacja pomiędzy energiami stanów



Rysunek 5.6: Rozkład gęstości elektronowej wraz z samouzgodnionym profilem energii potencjalnej wyznaczony dla napięcia $V_b = 0.43$ V odpowiadającego zakresowi 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ ($\Delta U = 140$ meV).

kwazi-związanych biorących udział w procesie tunelowania rezonansowego w zakresie 'plateau' $(E_{E1} \text{ oraz } E_{QW2})$ jest analogiczna jak w przypadku struktury RTD. W zakresie 'plateau' dla struktury TRTD energia E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera jest większa od energii E_{QW2} drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych. Aby pokazać, że relacja ta spełniona jest dla całego zakresu 'plateau', na Rys. 5.8 przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii oraz napięcia wyznaczony dla całego zakresu napięć, w którym obserwujemy 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Wzajemne położenie rozpatrywanych poziomów energetycznych, takie że energia E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera jest większa od energii E_{OW2} drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych zachowane jest dla całego zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Tylko takie wzajemne położenie stanów, biorących udział w procesie tunelowania rezonansowego w zakresie 'plateau' podtrzymuje odpowiedni rozkład koncentracji elektronowej, który prowadzi do powstania studni potencjału w obszarze emitera. Zauważmy (Rys. 5.8), że energia E_{E1} pierwszego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera prawie nie ulega zmianie w funkcji napięcia, podczas gdy energia E_{QW2} drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych wyraźnie maleje. Różnica energii pomiędzy E_{E1} oraz E_{QW2} maleje w funkcji napięcia aż do momentu, gdy energie obu stanów stają się równe, powodując zanik zakresu 'plateau'. Analiza procesów transportu elektronowego w zakresie 'plateau' pozwala zauważyć, że szerokość zakresu 'plateau' związana jest różnicą energi
i E_{E1} oraz $E_{QW2},\,{\rm która}$ ustala się w początkowej części zakresu 'plateau'. Na Rys. 5.9 przedstawiony został wykres średniej



Rysunek 5.7: (a) Średnia gęstość stanów rezonansowych ρ w funkcji energii E uzyskana dla $V_b = 0.43$ V oraz $\Delta U = 140$ meV. Położenia kolejnych pików funkcji $\rho(E)$ odpowiadają energiom poszczególnych stanów kwazi-związanych w nanourządzeniu. (b) Funkcje falowe $\Psi(z)$ stanów kwazi-związanych wraz z profilem energii potencjalnej U(z) (linia przerywana).

gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii wyznaczony dla napięć odpowiadających początkowym częścią zakresu 'plateau' dla $\Delta U = 140$ meV oraz $\Delta U = 150$ meV. Zauważmy, że różnica energii pomiędzy E_{E1} oraz E_{QW2} w początkowym zakresie 'plateau' jest większa dla większej wartości parametru ΔU . A zatem poprzez zmianę parametru ΔU jesteśmy w stanie kontrolować różnice energii pomiędzy rozpatrywanymi stanami w początkowej części zakresu 'plateau', powodując wzrost szerokości zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$, który przedstawiony został na Rys. 5.5.



Rysunek 5.8: Średnia gęstość stanów rezonansowych ρ w funkcji energii E oraz napięcia V_b wyznaczona dla zakresu 'plateau' otrzymanego dla wartości parametru $\Delta U = 140$ meV.



Rysunek 5.9: Średnia gęstości stanów rezonansowych ρ w funkcji energi
iEwyznaczona dla napięć odpowiadających początkowej części zakresu 'plateau' uzyskanych dla wartości parametru
 $\Delta U = 140$ meV oraz $\Delta U = 150$ meV.

5.3 Bistabilność prądu

Na Rys. 5.10 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla rozpatrywanej struktury TRTD, otrzymane w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia, dla trzech wartości parametru $\Delta U = 130$, 140 oraz 150 meV. Rys. 5.10 po-



Rysunek 5.10: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia dla wartości parametru (a) $\Delta U = 130$ meV, (b) $\Delta U = 140$ meV oraz (c) $\Delta U = 150$ meV.

kazuje, że charakterystyki $j(V_b)$ otrzymane w przypadku FBS oraz BBS istotnie różnią się od siebie. Oznacza to, że w rozpatrywanej strukturze TRTD występuje zjawisko bistabilności prądu. Zauważmy, że szerokość zakresu bistabilności wzrasta wraz ze wzrostem parametru ΔU . Podobnie jak w przypadku struktury RTD, na charakterystykach prądowo-napięciowych możemy wyróżnić zakresy napięć, w których bistabilność związana jest z akumulacją ładunku w studniach kwantowych oraz zakresy, w których bistabilność wynika z tunelowania przez stan kwazi-związany w obszarze emitera (zakresy 'plateau' na charakterystykach $j(V_b)$). Zauważmy, że wraz ze wzrostem parametru ΔU , zarówno w przypadku FBS jak i BBS zakres napięć, w którym występuje 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ powiększa się.

W celu przeprowadzenia dokładnej analizy poszczególnych zakresów bistabilności rozpatrzmy charakterystykę prądowo-napięciową otrzymaną dla wartości parametru $\Delta U = 150$ meV [Rys. 5.10 (c)]. Na Rys. 5.10 (c) poszczególne zakresy bistabilności zaznaczone zostały pionowymi liniami przerywanymi oraz ponumerowane od (I) do (IV). Rozkłady koncentracji elektronowej oraz profile energii potencjalnej w nanourządzeniu w przypadku FBS oraz BBS, wyznaczone dla napięć z poszczególnych zakresów (I-IV) zaprezentowane zostały na Rys. 5.11. Na Rys. 5.10 (c)



Rysunek 5.11: Rozkłady koncentracji elektronowej oraz profile energii potencjalnej w nanourządzeniu wyznaczone w przypadku FBS oraz BBS dla wartości napięć z poszczególnych zakresów od (I) do (IV) zaznaczonych na Rys. 5.10 (c).

możemy zauważyć, że zakresy bistabilności (I) oraz (II) związane są z występowaniem 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ podczas stopniowego zmniejszania napięcia (BBS). W przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS, krzywa niebieska), na Rys. 5.11 (I) oraz (II) obserwujemy charakterystyczny rozkład koncentracji elektronowej z typowym dla zakresu 'plateau' obszarem zubożenia elektronowego w obszarze emitera. Efektywny ładunek dodatni, jaki tworzy się wówczas w obszarze emitera prowadzi do pojawienia się studni potencjału, w której


Rysunek 5.12: Średnia gęstość stanów rezonansowych w funkcji energii wyznaczona dla napięcia (a) z zakresu (I) oraz (b) z zakresu (II) (patrz Rys. 5.10 (c)). Położenia poszczególnych pików średniej gęstości stanów rezonansowych wyznaczają energie stanów kwazi-związanych w obszarze emitera oraz głównych studni kwantowych. Wykresy (c) oraz (d) przedstawiają funkcje falowe stanów kwazi-związanych o energiach E_{E1} , E_{E2} , E_{QW1} , E_{QW2} odpowiednio w zakresie (I) oraz (II).

powstają stany kwazi-związane. Jak pokazaliśmy w Rozdziale 4, transport elektronowy przez stany kwazi-związane w obszarze emitera skutkuje pojawieniem się zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Z drugiej strony, w przypadku stopniowego zwiększania napięcia (FBS, krzywa czerwona) w zakresach (I) oraz (II) obserwujemy akumulację elektronów w lewej studni kwantowej, co sugeruje, że układ znajduje się w obszarze tunelowania rezonansowego przez pierwszy stan kwazi-związany w obszarze centralnych studni kwantowych o energii E_{QW1} , którego funkcja falowa zlokalizowana jest w obszarze lewej studni kwantowej [Rys. 5.7 (b)]. Zauważmy jednak, że rozkład koncentracji elektronowej [Rys. 5.11 (I) oraz (II)] oraz gęstość prądu [Rys. 5.10 (c)] otrzymane w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS, linia niebieska) w zakresach (I) oraz (II) są istotnie różne. A zatem mamy do czynienia z dwoma odrębnymi zakresami

'plateau'. Aby przeanalizować procesy transportu elektronowego w obu rozpatrywanych zakresach, na Rys. 5.12 przedstawione zostały wykresy średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii, wyznaczone dla napięć z zakresu (I) oraz (II). Położenia kolejnych pików średniej gestości stanów rezonansowych odpowiadają energiom poszczególnych stanów kwazizwiązanych: pierwszego oraz drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze emitera (E_{E1} oraz E_{E2}) oraz pierwszego i drugiego stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych (E_{QW1} oraz E_{QW2}). Na Rys. 5.12 (c) oraz (d) przedstawione zostały funkcje falowe poszczególnych stanów kwazi-związanych odpowiednio dla zakresu (I) oraz (II). Dla zakresu (I) obserwujemy silne przekrywanie się funkcji falowych odpowiadających pierwszemu stanowi kwazi-związanemu w obszarze emitera o energi
i E_{E1} oraz pierwszemu stanowi kwazi-związanemu w obszarze głównych studni kwantowych o energii E_{QW1} . A zatem tunelowanie rezonansowe przez stany o energiach E_{E1} oraz E_{QW1} powoduje wzrost gęstości prądu w zakresie 'plateau' oznaczonym jako (I) na wykresie 5.10 (c). Z drugiej strony Rys. 5.12 (b) oraz (d) wskazuje, że wzrost gestości prądu w zakresie 'plateau' oznaczonym jako (II) na wykresie 5.10 (c) związany jest z tunelowaniem rezonansowym przez drugi stan kwazi-związany w obszarze emitera o energi
i ${\cal E}_{E2}$ oraz drugi stan kwazi-związany w obszarze studni kwantowych o energii E_{QW2} . Przeanalizujmy teraz kolejne zakresy bistabilności oznaczone jako (III) oraz (IV) na Rys. 5.10 (c). Bistabilność w zakresie (III) na charakterystyce $i(V_b)$ [Rys 5.10 (c)] związana jest z akumulacją elektronów w centralnych studniach kwantowych, która zachodzi podczas tunelowania rezonansowego. Bistabilność związana z akumulacja ładunku w studni kwantowej została szczegółowo opisana w rozdziale 4. Na Rys. 5.11 (III) możemy zaobserwować akumulację elektronów w obu studniach kwantowych w przypadku stopniowego zwiększania napięcia (FBS), podczas gdy koncentracja elektronów w studniach kwantowych w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS) jest bliska zeru. Ostatni zakres bistabilności (IV) związany jest z występowaniem 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$ podczas stopniowego zwiększania napiecia (FBS). Pojawienie się zakresu 'plateau' w przypadku stopniowego zwiększania napięcia oraz procesy transportu z nim związane zostały omówione w poprzednim podrozdziale.

Wpływ temperatury na bistabilność prądu

Na końcu tego podrozdziału przedstawimy wpływ temperatury oraz rozpraszania na omawiane zjawisko bistabilności w strukturze TRTD. Na Rys. 5.13 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe uzyskane dla wartości parametru $\Delta U = 130$, 140, 150 meV oraz trzech różnych temperatur: T = 4.2 K przy założeniu braku rozpraszania, T = 77 K z uwzględnieniem rozpraszania z czasem relaksacji $\tau = 525$ fs [92] oraz T = 300 K z uwzględnieniem rozpraszania z czasem relaksacji $\tau = 100$ fs [92]. Rys. 5.13 pokazuje, że bistabilność prądu w strukturze TRTD zanika wraz ze wzrostem temperatury. Przedstawione wyniki pokazują, że zjawisko bistabilności w strukturze TRTD może być zaobserwowane jedynie w niskich temperaturach, w których rozpraszanie elektronów na fononach jest pomijalnie małe. Zauważmy (Rys. 5.13), że zjawisko bistabilności prądu w temperaturze pokojowej nie jest obserwowane, ale można je zaobserwować



Rysunek 5.13: Charakterystyki prądowo-napięciowe uzyskane w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia dla (a) $\Delta U = 130$ meV, (b) $\Delta U = 140$ meV oraz (c) $\Delta U = 150$ meV. Charakterystyki wyznaczone zostały dla temperatur: T = 4.2 przy założeniu braku rozpraszania, T = 77 K z uwzględnieniem rozpraszania ($\tau = 525$ fs) oraz T = 300 K z uwzględnieniem rozpraszania ($\tau = 100$ fs).

w temperaturze ciekłego azotu T = 77 K.

5.4 Oscylacje prądu

Na Rys. 5.14 przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa wyznaczona za pomocą zależnej od czasu metody Wignera-Poissona dla wartości parametru $\Delta U = 60$ meV. Na wykresie, linią niebieską naniesiona została również charakterystyka $j(V_b)$ uzyskana w oparciu o metodę Wignera-Poissona niezależną od czasu. Obliczenia metodą zależną od czasu pokazały, że w pewnych zakresach napięć w układzie pojawiają się oscylacje prądu o wysokiej częstotliwości. Zakresy napięć, w których występują oscylacje prądu zaznaczone zostały na Rys. 5.14 pionowymi liniami przerywanymi, zaś amplituda oscylacji średniej gęstości prądu w nanourządzeniu zaznaczona została przy pomocy pionowych słupków błędu. Wykresy (a)



Rysunek 5.14: Charakterystyka prądowo-napięciowa wyznaczona za pomocą metody Wignera-Poissona zależnej od czasu dla wartości parametru $\Delta U = 60$ meV. Linią niebieską przedstawiona została charakterystyka $j(V_b)$ uzyskana w oparciu o metodę Wignera-Poissona niezależną od czasu. Zakres napięć, w których pojawiają się oscylacje prądu zaznaczony został pionowymi liniami przerywanymi, zaś amplituda oscylacji średniej gęstości prądu w nanourządzeniu dla poszczególnych wartości napięć zaznaczona została za pomocą pionowych słupków błędu. (a) Wykres średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu podczas dochodzenia układu do stanu równowagi. (b) Oscylacje średniej gęstości prądu w funkcji czasu.

oraz (b) na Rys. 5.14 przedstawiają średnią gęstość prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu otrzymaną dla napięcia: (a) dla którego układ dochodzi do stanu równowagi oraz (b) w którym obserwujemy oscylacje prądu o wysokiej częstotliwości. Dla rozpatrywanej wartości parametru ΔU możemy zauważyć, że oscylacje prądu pojawiają się nie tylko w zakresie ujemnego oporu różniczkowego, jak w przypadku struktury RTD z dwiema barierami potencjału, lecz również



Rysunek 5.15: Amplituda A_{osc} oraz częstotliwość f_{osc} oscylacji średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji napięcia V_b . Wykres wyznaczony został dla zakresu oscylacji występującego poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$.

w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu. Jak wykazaliśmy w rozdziale 4 dotyczącym struktur RTD, oscylacje prądu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego związane są ze sprzężeniem stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym, który powstaje w obszarze emitera.

W tym rozdziale rozważmy zatem oscylacje gęstości prądu, które powstają w zakresie napięć poniżej napięcia odpowiadającego rezonansowemu maksimum gęstości pradu. Zauważmy, że zarówno amplituda jak i częstotliwość oscylacji w rozpatrywanym zakresie napięć poniżej maksimum gęstości prądu nie są stałe lecz zmieniają się w funkcji napięcia w sposób przedstawiony na Rys. 5.15. Średnia częstotliwość oscylacji w rozpatrywanym zakresie napięć wynosi $f_{osc} = 3.8$ THz, zaś maksymalna wartość amplitudy oscylacji $A_{osc} = 6.9 \times 10^4$ Acm⁻². Przeanalizujmy zmiany rozkładu koncentracji elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu podczas oscylacji prądu występujących w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu. Na Rys. 5.16 przedstawiony został wykres średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu wyznaczony dla napięcia $V_b = 0.161$ V. Oscylacje prądu przedstawione na Rys. 5.16 związane są z oscylacyjnymi zmianami rozkładu gęstości elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu. Zmiany rozkładu koncentracji elektronowej w nanourządzeniu w funkcji położenia z oraz czasu t dla napięcia $V_b = 0.161$ V przedstawione zostały na Rys. 5.17 (a). Na Rys. 5.17 (b) przedstawione zostały natomiast zmiany profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji czasu, wyznaczone względem profilu energii potencjalnej U_{sr} uśrednionej po jednym, pełnym okresie oscylacji. Na Rys. 5.17



Rysunek 5.16: Oscylacje średniej gęstości prądu w nanostrukturze j w funkcji czasu t wyznaczone dla napięcia $V_b = 0.161$ V oraz $\Delta U = 60$ meV.

widzimy, że zarówno rozkład koncentracji elektronowej jak i potencjał w lewej oraz prawej studni kwantowej oscyluja w czasie. Zmiany koncentracji elektronów w obszarze emitera oraz lewej i prawej studni kwantowej w funkcji czasu przedstawione zostały na Rys. 5.18. Zauważmy, że koncentracja elektronów w obszarze lewej oraz prawej studni kwantowej zmienia się oscylacyjnie w taki sposób, że jeżeli koncentracja elektronów w obszarze lewej studni kwantowej przyjmuje maksimum, to koncentracja elektronów w obszarze prawej studni kwantowej osiąga wartość minimalną i na odwrót, jeśli koncentracja elektronów w obszarze lewej studni kwantowej przyjmuje minimum, koncentracja elektronów w obszarze prawej studni osiąga wartość maksymalną. Podobną zależność możemy zaobserwować analizując wykres zmian energii potencjalnej w nanourzadzeniu w funkcji czasu przedstawiony na Rys. 5.17 (b). Na wykresie tym możemy zauważyć, że zmiany energii potencjalnej w obszarze lewej oraz prawej studni kwantowej oscylują w taki sposób, że zmiana energii potencjalnej w lewej studni kwantowej jest przesunięta w fazie o $\pi/2$ w stosunku do zmiany energii potencjalnej w prawej studni kwantowej. Na Rys. 5.19 przedstawione zostały rozkłady gęstości elektronowej wraz z samouzgodnionymi profilami energii potencjalnej w nanourządzeniu wyznaczone dla chwil czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 5.18. Zauważmy, że w chwili czasu t_1 koncentracja elektronów w obu studniach kwantowych jest niemal taka sama, podczas gdy w chwili czasu t_2 koncentracja elektronów w lewej studni kwantowej znacznie przewyższa koncentrację elektronów w prawej studni kwantowej. Aby wyjaśnić zjawisko oscylacji prądu w rozpatrywanym zakresie napięć, na



Rysunek 5.17: (a) Rozkład koncentracji elektronowej w nanourządzeniu n w funkcji czasu t oraz położenia z wyznaczony dla napięcia $V_b = 0.161$ V. (b) Profil energii potencjalnej w nanourządzeniu w funkcji czasu t, wyznaczony względem profilu energii potencjalnej $U_{sr}(z,t)$ uśrednionego po jednym, pełnym okresie oscylacji. Granice barier potencjału zaznaczone zostały białymi liniami przerywanymi

Rys. 5.20 przedstawione zostały wykresy współczynnika transmisji w funkcji energii E, wyznaczone dla chwil czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 5.18. Poszczególne piki współczynnika transmisji odpowiadają pierwszemu oraz drugiemu stanowi kwazi-związanemu, zlokalizowanemu odpowiednio w lewej oraz prawej studni kwantowej. W rozdziale 4, dotyczącym transportu elektronowego w strukturze RTD wykazaliśmy, że oscylacje gestości pradu w strukturach rezonansowo-tunelowych wynikają ze sprzężenia stanów kwazi-związanych biorących udział w procesie transportu elektronowego przez rozpatrywane nanourządzenie. Rys. 5.20 pokazuje, że oscylacje gestości pradu w rozpatrywanym zakresie napieć, poniżej rezonansowego maksimum gestości pradu zwiazane sa ze sprzeżeniem pierwszego oraz drugiego stanu kwazi-zwiazanego w obszarze studni kwantowych, przy czym pierwszy stan kwazi-związany odpowiada lokalizacji funkcji falowej w lewej studni kwantowej, podczas gdy drugi stan kwazi-związany odpowiada lokalizacji elektronu w obszarze prawej studni kwantowej. W chwili czasu t_1 , w której obserwujemy jednakowy rozkład koncentracji elektronowej w obu studniach kwantowych (Rys. 5.19), różnica energii pomiędzy położeniami pików współczynnika transmisji T(E) na wykresie 5.20 jest minimalna, podczas gdy w chwili czasu t_2 , w której obserwujemy nierównomierny rozkład koncentracji elektronowej w obu studniach kwantowych (Rys. 5.19) odległość pomiędzy pikami na skali energii osiąga wartość maksymalną. Oscylacje współczynnika transmisji T(E)powodują oscylacyjną zmianę warunków tunelowania rezonansowego przez opisywaną strukturę TRTD, co prowadzi do oscylacji prądu w rozpatrywanym zakresie napięć.



Rysunek 5.18: Koncentracja elektronów w obszarze emitera oraz prawej i lewej studni kwantowej w funkcji czasu wyznaczona dla napięcia $V_b = 0.161$ V.

Podsumowując, symulacje metodą Wignera-Poissona zależną od czasu pokazały, że w rozpatrywanej strukturze TRTD mogą występować dwa zakresy napięć, w których obserwowane jest zjawisko oscylacji prądu. Pierwszy z nich, podobnie jak w przypadku struktur RTD związany jest z zakresem ujemnego oporu różniczkowego, podczas gdy drugi zakres oscylacji, nie obserwowany w strukturach RTD, pojawia się dla napieć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$. Źródłem oscylacji w obu przypadkach jest sprzężenie pomiędzy stanami rezonansowymi biorącymi udział w procesie transportu elektronowego przez opisywaną heterostrukturę. W obszarze ujemnego oporu różniczkowego sprzężenie to dotyczy stanu kwazi-związanego w obszarze emitera oraz stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowych, natomiast oscylacje występujące dla zakresu napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu związane są ze sprzężeniem pierwszego oraz drugiego stanu kwazizwiązanego zlokalizowanych w obszarze studni kwantowych [107].



Rysunek 5.19: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej w nanourządzeniu, wyznaczone dla chwil czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 5.18.



Rysunek 5.20: Współczynnik transmisji w funkcji energi
iT(E),wyznaczony dla chwil czasu t_1 ora
z t_2 zaznaczonych na Rys. 5.18.

Wpływ rozpraszania na oscylacje prądu

Na końcu tego paragrafu omówimy wpływ rozpraszania na zjawisko oscylacji prądu w rozpatrywanym zakresie napięć. W tym celu, na Rys. 5.21 przedstawiony został wykres średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu otrzymany dla napięcia $V_b = 0.161$ V, parametru $\Delta U = 60$ meV oraz różnych wartości czasu relaksacji τ . Zauważmy, że wraz ze wzrostem praw-



Rysunek 5.21: Średnia gęstość prądu w nanourządzeniu j w funkcji czasu t otrzymana dla napięcia $V_b = 0.161$ V, parametru $\Delta U = 60$ meV oraz różnych wartości czasu relaksacji τ . Wstawka przedstawia zależność amplitudy oscylacji prądu A_{osc} w funkcji czasu relaksacji τ .

dopodobieństwa rozpraszania (zmniejszanie czasu relaksacji τ) amplituda oscylacji stopniowo maleje. Dla $\tau = 525$ fs, odpowiadającego temperaturze T = 77 K [92] oscylacje całkowicie zanikają. Na wstawce wewnątrz Rys. 5.21 przedstawiona została zależność amplitudy oscylacji A_{osc} w funkcji czasu relaksacji τ . Rys. 5.21 pokazuje, że procesy rozpraszania prowadzą do zaniku oscylacji prądu. Opisywane zjawisko oscylacji może być zatem obserwowane eksperymentalnie jedynie w bardzo niskich temperaturach, w których wpływ rozpraszania elektronów na fononach jest pomijalnie mały.

5.5 Wpływ struktury geometrycznej na oscylacje prądu

W poprzednim podrozdziale przedstawiono nowy rodzaj oscylacji, które występują w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu oraz pokazano, że oscylacje te związane są ze sprzężeniem stanów rezonansowych, których funkcje falowe zlokalizowane są odpowiednio w lewej oraz prawej studni kwantowej. Sprzężenie pomiędzy stanami w lewej oraz prawej studni kwantowej może być zmieniane poprzez zmianę szerokości bariery pomiędzy nimi.



Rysunek 5.22: Profil energii potencjalnej dla asymetrycznej struktury TRTD z poszerzoną prawą studnią kwantową.



Rysunek 5.23: Charakterystyki prądowo-napięciowe dla TRTD z poszerzoną prawą studnią kwantową obliczone dla kilku wartości parametru ΔU .

W tej części rozdziału przedstawimy wyniki badań dotyczących wpływu szerokości bariery pomiędzy studniami kwantowymi na częstotliwość oraz amplitudę oscylacji prądu. Ponadto pokażemy, że zjawisko oscylacji prądu może być związane ze sprzężeniem dowolnych dwóch stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w studniach kwantowych. W tym celu rozważmy asymetryczną strukturę, w której szerokość prawej studni kwantowej jest zwiększona w stosunku do szerokości studni w strukturze opisanej w podrozdziale 5.1 i wynosi 15 nm. Poszerzenie prawej studni kwantowej prowadzi do powstania trzech stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w obszarze tej studni. Profil energii potencjalnej dla rozpatrywanego nanourządzenia przedstawiony został na Rys. 5.22. Na Rys. 5.23 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe



Rysunek 5.24: (a) Charakterystyka prądowo-napięciowa dla wartości parametru $\Delta U = 100 \text{ meV}$ wyznaczona metodą Wignera-Poissona zależną od czasu. Zakresy napięć, w których występują oscylacje prądu zaznaczone zostały pionowymi liniami przerywanymi. (b) Oscylacje średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu t. (c) Transformata Fouriera wykonana na danych zaprezentowanych na wykresie (b) pokazująca, że częstotliwość oscylacji prądu w rozpatrywanym zakresie wynosi $f_{osc} = 3.6 \text{ THz}.$

obliczone dla rozpatrywanej struktury TRTD oraz różnych wartości parametru ΔU . Zauważmy, że każda z krzywych $j(V_b)$ charakteryzuje się występowaniem dwóch maksimów gęstości prądu, przy czym zwiększanie parametru ΔU przesuwa pozycję poszczególnych maksimów w stronę wyższych napięć. Maksima gęstości prądu na charakterystykach $j(V_b)$ związane są z tunelowaniem rezonansowym przez kolejne stany rezonansowe zlokalizowane w obszarach studni kwantowych. Dla wartości parametru $\Delta U = 100$ meV wykonane zostały symulacje transportu elektronowego metodą Wignera-Poissona zależną od czasu. Na Rys. 5.24 (a) przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa, na której zaznaczone zostały zakresy oscylacji prądu. Wykres 5.24 (b) przedstawia oscylacje średniej gęstości prądu w nanourządzeniu w funkcji czasu, zaś 5.24 (c) transformatę Fouriera wykonaną na danych prezentowanych na wykresie (b). Na charakterystyce $j(V_b)$ przedstawionej na Rys. 5.24 możemy wyróżnić cztery zakresy napięć, w których obserwujemy oscylacje prądu. Dwa z nich związane są z zakresami ujemnego oporu różniczkowego, zaś dwa pozostałe występują odpowiednio poniżej pierwszego oraz drugiego rezonansowego maksimum gęstości prądu. Rozpatrzmy oscylacje prądu występujące w zakresie napięć poniżej drugiego maksimum gęstości prądu. Jak pokazaliśmy, w tym zakresie napięć oscylacje prądu związane są ze sprzężeniem stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w lewej oraz prawej studni kwantowej. Sprzężenie to możemy regulować poprzez zmianę szerokości bariery potencjału pomiędzy studniami kwantowymi. Na Rys. 5.25 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla rozpatrywanej struktury TRTD uzyskane dla kilku różnych szerokości bariery potencjału d oddzielającej studnie kwantowe. Szerokość bariery potencjału d mierzona jest w jednostkach odpowiadających szerokości pojedynczej monowarstwy atomowej, równej stałej sieci dla GaAs, czyli a = 0.565 nm. Dla rozpatrywanego zakresu oscylacji prądu oraz



Rysunek 5.25: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane dla asymetrycznej struktury TRTD z poszerzoną prawą studnią kwantową oraz kilku różnych szerokości bariery potencjału d pomiędzy studniami kwantowymi.

różnych szerokości bariery potencjału *d* pomiędzy studniami kwantowymi wyznaczona została zależność amplitudy oraz częstotliwości oscylacji w funkcji napięcia (Rys. 5.26). Zauważmy, że wraz ze wzrostem szerokości bariery potencjału *d* pomiędzy studniami kwantowymi maksimum amplitudy oscylacji prądu oraz częstotliwość oscylacji maleją.



Rysunek 5.26: (a) Amplituda oraz (b) częstotliwość oscylacji w funkcji napięcia V_b dla bariery potencjału pomiędzy studniami kwantowymi o szerokości d = 4, 5, 6, 7 ML, gdzie 1 ML=0.565 nm.

A zatem poprzez zmianę parametrów geometrycznych nanourządzenia możemy regulować amplitudą oraz częstotliwością oscylacji prądu, które pojawiają się w strukturach TRTD w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu.

5.6 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego w strukturze trójbarierowej diody rezonansowo-tunelowej (TRTD). Warunki tunelowania rezonansowego przez rozpatrywaną strukturę TRTD mogły być zmieniane poprzez zmianę energii ΔU dna pasma przewodnictwa prawej studni kwantowej. Dla struktury TRTD wyznaczono charakterystyki pradowo-napięciowe dla różnych wartości parametru ΔU oraz przeanalizowano zmiany rozkładu koncentracji elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu w rozpatrywanym zakresie napięć V_b . Obliczenia wykonane dla różnych wartości parametru ΔU pozwoliły zauważyć, że zakres 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ pojawia się dopiero wtedy, gdy wartość parametru ΔU przekroczy pewną wartość graniczną. Dla wartości granicznej parametru ΔU obserwujemy gwałtowny wzrost współczynnika PVR. W niniejszym rozdziale dokonano analizy zakresu 'plateau' oraz bistabilności prądu w funkcji parametru ΔU . Pokazano, że 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ zwiazane jest z tunelowaniem rezonansowych elektronów przewodnictwa przez stan kwazi-związany, który tworzy się w obszarze emitera. Wraz ze wzrostem parametru ΔU zakres 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ oraz związany z nią zakres bistabilności ulega poszerzeniu. W niniejszym rozdziale zbadano również zjawisko oscylacji prądu w strukturze TRTD. Zastosowanie metody Wignera-Poissona zależnej od czasu pozwoliło na wyznaczenie dwóch odrębnych zakresów oscylacji prądu. W pierwszym z nich, związanym z zakresem ujemnego oporu różniczkowego, źródłem oscylacji prądu jest sprzężenie pomiędzy stanami kwazi-związanymi w obszarze emitera oraz centralnych studni kwantowych. Pokazano, że w strukturach TRTD występuje ponadto drugi rodzaj oscylacji występujący w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$. Źródłem nowego rodzaju oscylacji prądu jest sprzężenie pomiędzy stanami kwazi-związanymi zlokalizowanymi w lewej oraz prawej studni kwantowej. W niniejszym rozdziale zbadano również wpływ szerokości bariery potencjału pomiędzy studniami kwantowymi na amplitudę oraz częstotliwość oscylacji prądu. Badania oscylacji prądu w funkcji temperatury oraz rozpraszania pokazały, że zjawisko to może zachodzić jedynie dla bardzo niskich temperatur, dla których wpływ rozpraszania elektronów na fononach jest pomijalnie mały. Badania nad oscylacjami prądu w strukturze TRTD pozwoliły zatem na udzielenie odpowiedzi na pytania dotyczące zjawiska oscylacji, które zadane zostały we wstępie rozprawy.

Rozdział 6

Metoda Wignera-Poissona transportu elektronowego w półprzewodnikowych magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych

W dalszej części pracy przedstawione zostaną wyniki symulacji komputerowych zależnego od spinu transportu elektronowego w strukturach rezonansowo-tunelowych, w których poszczególne warstwy wytworzone są z rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego. Rozdział ten poświęcony będzie metodzie Wignera-Poissona w zastosowaniu do magnetycznych struktur rezonansowo-tunelowych typu mesa.

6.1 Oddziaływanie elektronu z domieszką magnetyczną

Oddziaływanie elektronu przewodnictwa z domieszkami magnetycznymi jest jednym z fundamentalnych zjawisk fizycznych zachodzących w procesie transportu elektronowego w półprzewodnikowych magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. Transport elektronów przez heterostruktury magnetyczne wymaga uwzględnienia oddziaływania spinu elektronu ze spinami domieszek magnetycznych [56]. Oddziaływanie to prowadzi do sytuacji, w której warunki transportu elektronowego są różne dla elektronów o różnym spinie.

6.1.1 Oddziaływanie elektronu przewodnictwa z domieszkami magnetycznymi w zewnętrznym polu magnetycznym

Rozważmy warstwę złożoną z rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji \mathbf{B}_0 . Elektron w rozpatrywanej warstwie magnetycznej oddziałuje nie tylko w zewnętrznym polem magnetycznym ale również z układem domieszek magnetycznych, z których każda posiada moment magnetyczny $\boldsymbol{\mu}_J = -g_J \mu_B \mathbf{J}$, związany z całkowitym momentem pędu \mathbf{J} , gdzie g_J oraz μ_B to odpowiednio czynnik żyromagnetyczny oraz magneton Bohra. Hamiltonian elektronu oddziałującego z układem domieszek magnetycznych w zewnętrznym polu magnetycznym o indukcji \mathbf{B}_0 wyraża się wzorem

$$\hat{H} = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r})\right)\mathbb{I} + g^*\mu_B\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}_0 + \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}),\tag{6.1.1}$$

gdzie I jest operatorem jednostkowym, **A** to potencjał wektorowy pola elektromagnetycznego spełniający relację rot $\mathbf{A} = \mathbf{B}_0$, g^* to efektywny czynnik żyromagnetyczny (tzw. czynnik Landego), $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ oznacza wektor macierzy Pauliego, zaś $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r})$ jest operatorem oddziaływania spinu elektronu z momentami magnetycznymi układu domieszek magnetycznych, który w modelu Heisenberga możemy wyrazić w postaci

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \mathcal{J}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \,\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_i), \qquad (6.1.2)$$

gdzie **r** jest wektorem położenia elektronu, $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_i)$ jest bezwymiarowym operatorem całkowitego momentu pędu pojedynczej domieszki magnetycznej w położeniu \mathbf{R}_i , zaś $\mathcal{J}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ to całka wymiany. Sumowanie w powyższym wzorze wykonywane jest po wszystkich N domieszkach magnetycznych w układzie.

Zakładając, że oddziaływanie ma charakter lokalny, czyli $\mathcal{J}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \mathcal{J}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, otrzymujemy

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) = \mathcal{J}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) \cdot \sum_{i=1}^{N} \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_{i})\,\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i})$$
(6.1.3)

gdzie $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ to delta Diraca.

A zatem pełna forma Hamiltonianu elektronu oddziałującego z układem domieszek magnetycznych przyjmuje postać

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r})\right)\mathbb{I} + g^*\mu_B\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}_0 + \mathcal{J}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\sum_{i=1}^N\,\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_i)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i).$$
(6.1.4)

6.1.2 Model pola średniego

Uwzględnienie oddziaływania elektronu z układem domieszek magnetycznych wymaga rozpatrzenia oddziaływania elektronu z każdą z domieszek magnetycznych w układzie z osobna. Problem taki jest skomplikowany tym bardziej, że domieszki magnetyczne oddziałują ze sobą. W celu uproszczenia przedstawionego modelu, dla małych koncentracji domieszek magnetycznych w układzie, dla których możemy pominąć ich oddziaływanie pomiędzy sobą, wprowadza się tzn. model pola średniego. W modelu pola średniego oddziaływanie elektronu z każdą z domieszek magnetycznych z osobna zastąpione jest przez oddziaływanie elektronu z wypadkowym polem magnetycznym pochodzącym od układu domieszek magnetycznych. Operator całkowitego momentu pędu $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_i)$ w równaniu (6.1.3) zastępujemy wartością oczekiwaną operatora

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) = \mathcal{J}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) \cdot \sum_{i=1}^{N} \left\langle \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_{i}) \right\rangle.$$
(6.1.5)

Jeżeli założymy jednorodne rozmieszczenie N jednakowych domieszek magnetycznych, otrzymujemy

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \mathcal{J} N \,\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) \cdot \left\langle \hat{\mathbf{J}} \right\rangle, \tag{6.1.6}$$

gdzie $\langle \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_i) \rangle = \langle \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{R}_j) \rangle = \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle$ ma tą samą wartość dla każdej z N domieszek magnetycznych. Zauważmy, że oddziaływanie spinu elektronu z momentami magnetycznymi układu domieszek magnetycznych wyrażone wzorem (6.1.6) jest analogiczne do oddziaływania spinu elektronu z polem magnetycznym, tzw. polem średnim

$$\mathbf{B}_{MF} = \frac{1}{g^* \mu_B} \mathcal{J}N \left\langle \hat{\mathbf{J}} \right\rangle. \tag{6.1.7}$$

A zatem hamiltonian układu możemy zapisać w postaci

$$\hat{H} = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r})\right)\mathbb{I} + g^*\mu_B\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}^{eff},\tag{6.1.8}$$

gdzie pole efektywne \mathbf{B}^{eff} jest sumą zewnętrznego pola magnetycznego oraz pola średniego pochodzącego od układu domieszek magnetycznych $\mathbf{B}^{eff} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_{MF}$.

Aby wyznaczyć wartość pola średniego \mathbf{B}_{MF} należy obliczyć wartość oczekiwaną operatora całkowitego momentu pędu pojedynczej domieszki magnetycznej. W tym celu załóżmy, że zewnętrzne pole magnetyczne skierowane jest wzdłuż osi z, czyli $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$ oraz przyjmijmy niesymetryczne cechowanie pola w postaci $\mathbf{A} = (-B_0 y, 0, 0)$. W obecności zewnętrznego pola magnetycznego dochodzi do zniesienia degeneracji ze względu na całkowity moment pędu określony liczbą kwantową J. Każdy poziom o całkowitym momencie pędu określonym liczbą kwantową J rozszczepia się na 2J + 1 podpoziomów o energiach wyrażonych wzorem

$$E_m = g_J \mu_B m B_0, \tag{6.1.9}$$

gdziemjest magnetyczną liczbą kwantową określającą rzu
t całkowitego momentu pędu na ośz.

Wartość oczekiwaną z-owej składowej operatora całkowitego momentu pędu możemy zapisać w postaci

$$\left\langle \hat{J}_z \right\rangle = \sum_{m=-J}^{m=J} P_m m, \qquad (6.1.10)$$

gdzie P_m jest prawdopodobieństwem obsadzenia stanu o magnetycznej liczbie kwantowej m. Zakładając, że prawdopodobieństwo obsadzenia stanu o energii E_m w temperaturze T dane jest wzorem

$$P_m = \frac{\exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right)}{\sum_{m=-J}^{m=J} \exp\left(-\frac{E_m}{k_B T}\right)},\tag{6.1.11}$$

otrzymujemy

$$\left\langle \hat{J}_z \right\rangle = \frac{\sum_{m=-J}^{m=J} m \exp\left(-\frac{g_J \mu_B m B_0}{k_B T}\right)}{\sum_{m=-J}^{m=J} \exp\left(-\frac{g_J \mu_B m B_0}{k_B T}\right)},\tag{6.1.12}$$

gdzie k_B to stała Boltzmanna, T to temperatura, zaś g_J jest czynnikiem żyromagnetycznym związanym z całkowitym momentem pędu J.

Po prostych przekształceniach algebraicznych wyrażenie (6.1.12) możemy sprowadzić do postaci [108]

$$\left\langle \hat{J}_z \right\rangle = J \mathcal{B}_J(\eta),$$
 (6.1.13)

gdzie $\mathcal{B}_J(\eta)$ to funkcja Brillouina wyrażona wzorem

$$\mathcal{B}_J(\eta) = \frac{2J+1}{2J} \operatorname{ctgh}\left(\frac{(2J+1)\eta}{2J}\right) - \frac{1}{2J} \operatorname{ctgh}\left(\frac{\eta}{2J}\right),\tag{6.1.14}$$

zas

$$\eta = \frac{g_J \mu_B B_0}{k_B T}.$$
 (6.1.15)

W przypadku układu domieszek paramagnetycznych, wypadkowe namagnesowanie układu skierowane jest w kierunku zewnętrznego pola magnetycznego. W związku z tym efektywne pole średnie w kierunkach x oraz y uśrednia się do zera.

Hamiltonian elektronu przyjmuje postać

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) + g^* \mu_B B_z^{eff} & 0\\ 0 & \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) - g^* \mu_B B_z^{eff} \end{bmatrix}.$$
 (6.1.16)

Postać hamiltonianu wyrażona wzorem (6.1.16) sprawia, że równanie Pauliego w postaci

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}),$$
 (6.1.17)

gdzie $\Psi(\mathbf{r})$ jest spinorem

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \qquad (6.1.18)$$

jest separowalne na część przestrzenną oraz część spinową. Równanie Pauliego możemy zapisać w postaci dwóch odrębnych równań Schrödingera dla poszczególnych składowych spinora $\Psi(\mathbf{r})$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r}) + g^*\mu_B B_z^{eff}\right)\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}),\tag{6.1.19}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}\right)^2 + U(\mathbf{r}) - g^*\mu_B B_z^{eff}\right)\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}).$$
(6.1.20)

6.2 Równanie Wignera dla paramagnetycznych struktur rezonansowo-tunelowych

Rozważmy model magnetycznej struktury półprzewodnikowej typu mesa zbudowanej zarówno z warstw paramagnetycznych jak i warstw niemagnetycznych. W rozpatrywanej strukturze, ze względu na rozmieszczenie warstw paramagnetycznych z-towa składowa efektywnego pola magnetyczna B_z^{eff} jest funkcją położenia $B_z^{eff} = B_z^{eff}(z)$. Jeżeli założymy, że kierunek z wyznacza

kierunek wzrostu warstw półprzewodnikowych, a układ jest i nieograniczony w kierunkach poprzecznych (x, y), równania (6.1.19) oraz (6.1.20) możemy rozseparować na równania opisujące ruch elektronu w kierunku wzrostu warstw z oraz w kierunkach poprzecznych (x, y). Jeżeli założymy, że

$$\Psi_{\uparrow}(x,y,z) = e^{ik_x x} \phi(y) \psi_{\uparrow}(z), \qquad (6.2.1)$$

$$\Psi_{\downarrow}(x,y,z) = e^{ik_x x} \phi(y) \psi_{\downarrow}(z), \qquad (6.2.2)$$

równanie Schrödingera związane z ruchem elektronu w kierunkach poprzecznym przyjmuje postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial^2 y}\phi(y) + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(y^2 - \frac{\hbar k_x}{eB_0}\right)\phi(y) = E_l\,\phi(y),\tag{6.2.3}$$

podczas gdy równania Schrödingera opisujące ruch elektronu w kierunku w
zrostu warstw \boldsymbol{z} wyrażają się wzorem

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi_{\uparrow}(z) + \left(U(z) + g^*\mu_B B_z^{eff}(z) + E_l\right)\psi_{\uparrow}(z) = E\psi_{\uparrow}(z), \qquad (6.2.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi_{\downarrow}(z) + \left(U(z) - g^*\mu_B B_z^{eff}(z) + E_l\right)\psi_{\downarrow}(z) = E\psi_{\downarrow}(z), \qquad (6.2.5)$$

gdzie E to wartość własna energii, E_l to l-ty poziom Landaua, którego energia wynosi

$$E_l = \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right),\tag{6.2.6}$$

zaś $\omega_c=eB_0/m$ to częstość cyklotronowa.

Widzimy zatem, że równanie Pauliego dla rozpatrywanego problemu zostało sprowadzone do dwóch równań jednowymiarowych dla poszczególnych składowych spinowych.

Jednowymiarowe równanie Pauliego w reprezentacji Wignera przyjmuje postać

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma'}(z,k,t) + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial z} f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma'}(z,k,t) + \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \,\mathcal{U}(z,k-k') f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma'}(z,k',t) \\
+ \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \,\mathcal{B}_{\sigma\sigma'}(z,k-k') f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma'}(z,k',t) = 0,$$
(6.2.7)

gdzie σ oznacza indeks spinowy $\sigma=\uparrow,\downarrow$ $(\sigma=\pm1).$

W równaniu (6.2.7) przyjęto założenie, że energia poziomów Landaua nie zmienia się w funkcji położenia z. Transformata Wignera-Weyla ze stałej energii E_l daje zerowy wkład do równania Wignera. W zaprezentowanym modelu, transport elektronów przez poszczególne stany Landaua zostanie uweględniony poprzez odpowiednio zadane warunki brzegowe.

W równaniu (6.2.7) niezależny od spinu potencjał nielokalny $\mathcal{U}(z, k - k')$ wyraża się wzorem

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right],\tag{6.2.8}$$

zaś zależny od spinu potencjał nielokalny $\mathcal{B}_{\sigma\sigma'}(z,k-k')$ przyjmuje postać

$$\mathcal{B}_{\uparrow\uparrow}(z,k-k') = g^* \mu_B \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-i(k-k')\xi} \left[B_z^{eff}\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - B_z^{eff}\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right]$$
(6.2.9)

$$\mathcal{B}_{\uparrow\downarrow}(z,k-k') = g^* \mu_B \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-i(k-k')\xi} \left[B_z^{eff}\left(z+\frac{\xi}{2}\right) + B_z^{eff}\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right] \tag{6.2.10}$$

$$\mathcal{B}_{\downarrow\uparrow}(z,k-k') = g^* \mu_B \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-i(k-k')\xi} \left[-B_z^{eff}\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - B_z^{eff}\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right] \quad (6.2.11)$$

$$\mathcal{B}_{\downarrow\downarrow}(z,k-k') = g^* \mu_B \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-i(k-k')\xi} \left[B_z^{eff}\left(z - \frac{\xi}{2}\right) - B_z^{eff}\left(z + \frac{\xi}{2}\right) \right]. \tag{6.2.12}$$

Zauważmy, że zależne od spinu równanie ruchu Wignera składa się z czterech niezależnych równań na składowe funkcji Wignera $f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma'}(z,k,t)$, zaś gęstość prądu wyrażona jest wyłącznie poprzez elementy diagonalne funkcji Wignera $f^{\mathcal{W}}_{\sigma\sigma}(z,k,t)$

$$j(z,t) = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar k}{m} Tr\left(f_{\sigma\sigma'}^{\mathcal{W}}(z,k,t)\right) dk'.$$
(6.2.13)

W związku z tym, w dalszej części rozprawy rozwiązywane będą jedynie równania dla elementów diagonalnych funkcji $f_{\sigma\sigma'}^{\mathcal{W}}(x,k,t)$, przy czym dla uproszczenia zapisu elementy diagonalne będą zapisywane w postaci $f_{\uparrow\uparrow}^{\mathcal{W}}(z,k,t) = f_{\uparrow}^{\mathcal{W}}(z,k,t)$ oraz $f_{\downarrow\downarrow}^{\mathcal{W}}(z,k,t) = f_{\downarrow}^{\mathcal{W}}(z,k,t)$.

6.3 Metoda Wignera-Poissona zależna od spinu

W samouzgodnionej metodzie Wignera-Poissona ruch elektronu przewodnictwa o określonym spinie opisany jest za pomocą zależnego od spinu równania Wignera [109, 110]. Zależne od spinu równanie Wignera sprowadza się do postaci 1D wyrażonej wzorem

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t)}{\partial z} + \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}_{\sigma}(z,k-k';t) f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k',t) = \frac{\partial f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t)}{\partial t} \bigg|_{s}, \quad (6.3.1)$$

gdzie $f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t)$ jest zależną od spinu funkcją Wignera. Potencjał nielokalny wyrażony jest wzorem

$$\mathcal{U}_{\sigma}(z,k-k';t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U_{\sigma}\left(z+\frac{\xi}{2};t\right) - U_{\sigma}\left(z-\frac{\xi}{2};t\right) \right],\tag{6.3.2}$$

gdzie $U_{\sigma}(z;t)$ zależna od spinu energia potencjalna.

W równaniu (6.3.1) wyrażenie po prawej stronie równania odpowiedzialne jest za rozpraszanie i w przybliżeniu czasu relaksacji przyjmuje postać

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t)}{\partial t}\Big|_{s} = \frac{1}{\tau_{\sigma}} \left(f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(z,k,t) - \frac{f^{\mathcal{W}}_{0,\sigma}(z,k)}{n_{0,\sigma}(z)} n_{\sigma}(z,t) \right), \tag{6.3.3}$$

gdzie $f_{0,\sigma}^{\mathcal{W}}(z,k)$ oraz $n_{0,\sigma}(z)$ to odpowiednio zależna od spinu funkcja Wignera i koncentracja elektronów w stanie równowagi, zaś τ_{σ} oznacza czas relaksacji dla elektronów o spinie σ .

Koncentrację elektronów przewodnictwa oraz gęstość prądu dla elektronów o spinie σ możemy wyznaczyć korzystając z wyrażeń

$$n_{\sigma}(z,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f_{\sigma}^{\mathcal{W}}(z,k,t), \qquad (6.3.4)$$

$$j_{\sigma}(z,t) = \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\hbar k}{m} f_{\sigma}^{\mathcal{W}}(z,k,t).$$
(6.3.5)

Profil energii potencjalnej $U_{\sigma}(z;t)$ w równaniu (6.3.2) jest sumą czterech składowych: energii wynikającej z nieciąglości dna pasma przewodnictwa $U^B(z)$, energii oddziaływania z polem elektrycznym $U^C(z;t)$ wynikającym z przyłożonego napięcia zewnętrznego oraz oddziaływania elektron-elektron typu Hartree, energii $U^J_{\sigma}(z;B)$ związanej z oddziaływaniem spinu elektronu z momentami magnetycznymi domieszek magnetycznych oraz energii wymiany $U^{ex}_{\sigma}(z)$. A zatem

$$U_{\sigma}(z;t) = U^{B}(z) + U^{C}(z;t) + U^{J}_{\sigma}(z;B) + U^{ex}_{\sigma}(z;t).$$
(6.3.6)

Podobnie jak w przypadku metody Wignera-Poissona niezależnej od spinu, profil energii potencjalnej związany z nieciąglością dna pasma przewodnictwa $U^B(z)$ możemy wyrazić wzorem (3.2.7), zaś energia potencjalna $U^C(z;t)$ spełnia równanie Poissona (3.2.8) dla koncentracji elektronowej zdefiniowanej wyrażeniem

$$n(z,t) = \sum_{\sigma} n_{\sigma}(z,t).$$
(6.3.7)

Energia potencjalna związana z oddziaływaniem spinu elektronu z momentami magnetycznymi domieszek magnetycznych $U_{\sigma}^{J}(z; B)$ w modelu pola średniego wyraża się wzorem

$$U_{\sigma}^{J}(z;B) = \sum_{i} \Delta E_{i}(B)\Theta(z-z_{i})\Theta(z_{i+1}-z) , \qquad (6.3.8)$$

gdzie z_i wyznacza granice poszczególnych warstw paramagnetycznych w układzie, $\Theta(z)$ to funkcja Heaviside, zaś $\Delta E_i(B)$ jest energią potencjalną oddziaływania spinu elektronu przewodnictwa z momentami magnetycznymi domieszek magnetycznych i w przybliżeniu pola średniego przyjmuje postać

$$\Delta E_i(B) = \pm \mathcal{J}NJ\mathcal{B}_J\left(\frac{g_J J\mu_B B_0}{k_B T}\right),\tag{6.3.9}$$

gdzie znak "+" dotyczy elektronów o spinie \uparrow , zaś znak "-" elektronów o spinie \downarrow . Energia wymiany $U_{\sigma}^{ex}(z;t)$ może być obliczona w przybliżeniu lokalnej gęstości spinowej (LSDA) [111] za pomocą wzoru

$$U_{\sigma}^{ex}(z;t) = \frac{d}{dn_{\sigma}(z,t)} \left[n_{\sigma}(z,t) E_{\sigma}^{ex}(n_{\sigma}(z,t)) \right], \qquad (6.3.10)$$

gdzie E_{σ}^{ex} jest energią oddziaływania wymiennego przypadającą na jeden elektron

$$E_{\sigma}^{ex} = \frac{-0.4582}{r_{\sigma}^s},\tag{6.3.11}$$

zaś wielkość r_{σ}^{s} wyrażona jest w efektywnych promieniach Bohra $(a_{0}^{*} = \epsilon_{r}a_{0}/m)$ i dana poprzez relację

$$r_{\sigma}^{s} = \left[\frac{3}{4\pi n_{\sigma}(z,t)}\right] \frac{1}{a_{0}^{*}}.$$
(6.3.12)

Samouzgodniona zależna od spinu metoda Wignera-Poissona polega na naprzemiennym rozwiązywaniu równania Wignera dla elektronów o różnych spinach oraz równania Poissona dla koncentracji elektronowej będącej sumą koncentracji elektonów o obu spinach. Rozwiązanie zależnych od spinu równań Wignera dla profilu energii potencjalnej $U_{\sigma}(z;t)$ pozwala na wyznaczenie koncentracji elektronowej $n_{\sigma}(z,t)$. Z drugiej strony zależne od spinu koncentracje elektronów pozwalają na wyznaczenie energii wymiany, zaś suma koncentracji elektronowej dla obu spinów pozwala na wyznaczenie profilu energii $U^{C}(z;t)$ z równania Poissona. Naprzemienne rozwiązywanie równań Wignera oraz Poissona trwa aż do momentu uzyskania samouzgodnienia. Schemat blokowy przedstawiający obliczenia zależną od spinu metodą Wignera-Poissona przedstawiony został na Rys. 6.1.



Rysunek 6.1: Schemat blokowy przedstawiający obliczenia charakterystyki prądowo-napięciowej metodą Wignera-Poissona zależną od spinu.

6.4 Warunki brzegowe

Jak wspomnieliśmy w rozdziale 3.3 warunki brzegowe opisujące elektrony w kontaktach omowych wyznaczone są poprzez wycałkowanie rozkładu Fermiego-Diraca po energiach związanych z ruchem elektronu w kierunkach poprzecznych (x, y). W przypadku ruchu elektronów w zewnętrznym polu magnetycznym $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$, energia elektronu związana z jego ruchem w kierunkach poprzecznych (x, y) jest skwantowana i odpowiada jednemu ze poziomów Landaua. Aby wyprowadzić warunki brzegowe dla równania Wignera w zewnętrznym polu magnetycznym, wysumujmy rozkład Fermiego-Diraca po wszystkich zajętych stanach Landaua. Należy przy tym pamiętać, że degeneracja każdego ze stanów Landaua wynosi eB/h.

Warunki brzegowe dla zależnego od spinu równania Wignera w zewnętrznym polu magnetycznym przyjmują postać [112, 113]

$$f_{\sigma}^{\mathcal{W}}(0,k,t)|_{k>0} = f_{E\sigma}(k), \qquad (6.4.1)$$

$$f^{\mathcal{W}}_{\sigma}(L,k,t)|_{k<0} = f_{C\sigma}(k),$$
 (6.4.2)

gdzieLto długość nanourządzenia, zaś

$$f_{\nu,\sigma}(k,B) = \frac{eB}{h} \sum_{n=0}^{N_{max}} \frac{1}{\exp\left(\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{\nu l\sigma}\right)\right) + 1}$$
(6.4.3)

gdzie k_B jest stałą Boltzmana, T to temperatura, zaś $\nu = E, C$ to wskaźnik dotyczący odpowiednio obszaru emitera oraz kolektora. Sumowanie w wyrażeniu (6.4.3) odbywa się po wszystkich N_{max} zajętych poziomach Landaua.

Energia $E_{\nu l\sigma}$ w równaniu (6.4.3) wyraża się wzorem

$$E_{\nu l\sigma} = \mu_{\nu} - \hbar\omega_c \left(l + \frac{1}{2}\right) - \sigma\mu_B B - E_{\sigma}^{ex}, \qquad (6.4.4)$$

gdzie μ to potencjał chemiczny, $\hbar\omega_c \left(l+\frac{1}{2}\right)$ to energia *l*-tego poziomu Landaua, $\omega_c = \frac{eB}{m}$ to częstość cyklotronowa, $\sigma\mu_B B_0$ to energia Zeemana związana z oddziaływaniem spinu elektronu z zewnętrznym polem magnetycznym, zaś E_{σ}^{ex} to energia oddziaływania wymienny.

Rozdział 7

Spinowa polaryzacja prądu w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej, filtr spinowy

W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną wyniki obliczeń zależnego od spinu transportu elektronowego w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe. Pokażemy, że struktura diody rezonansowo-tunelowej, w której studnia kwantowa złożona jest z rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego, pozwala na wytworzenie efektywnego filtru spinowego, w którym spinowa polaryzacja prądu może być kontrolowana poprzez zmianę napięcia zewnętrznego. Ponadto zbadany zostanie wpływ bistabilności oraz oscylacji prądu na spinową polaryzację. Możliwość uzyskania spinowej polaryzacji prądu w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe została przedstawiona eksperymentalnie przez Slobodskyy'ego i in. [60]. Wyniki eksperymentalne uzyskane w pracy [60] zostały wstępnie potwierdzone teoretycznie przez Havu i in. [61], jednak zgodnie z naszą wiedzą do tej pory nie ukazała się żadna praca dotycząca wpływu zjawisk bistabilności oraz oscylacji prądu, występujących w strukturach rezonansowo-tunelowych, na spinową polaryzację prądu otrzymywaną w paramagnetycznej diodzie rezonansowo-tunelowej.

7.1 Model nanourządzenia

Przedmiotem symulacji komputerowych wykonanych w tej części pracy jest zależny od spinu transport elektronowy w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej (PRTD z ang. Paramagnetic Resonant Tunnelling Diode) zbudowanej z $\text{ZnSe}/\text{Zn}_{0.95}\text{Be}_{0.05}\text{Se}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$ [Rys. 7.1 (b)]. Różnica energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy $\text{Zn}_{0.95}\text{Be}_{0.05}\text{Se}$ oraz $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x$ Se prowadzi do powstania efektywnego profilu energii potencjalnej składającego się ze studni potencjału w obszarze rozcieńczonego półprzewodnika paramagnetycznego $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x$ Se, ograniczonej dwiema barierami potencjału z $\text{Zn}_{0.95}\text{Be}_{0.05}$ Se. Aktywny obszar nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-ZnSe) obszarami bufora z ZnSe. W obecności zewnętrznego pola magnetycznego przyłożonego w kierunku wzrostu warstw, czyli

 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, oddziaływanie pomiędzy spinami jonów manganu Mn²⁺ oraz elektronów przewodnictwa prowadzi do gigantycznego rozszczepienia Zeemana dna pasma przewodnictwa w obszarze paramagnetycznej studni kwantowej. Dla małych wartości koncentracji domieszki Mn (x < 10 %), rozszczepienie Zeemana możemy wyrazić wzorem [56]

$$\Delta E(B) = \pm N_0 \alpha x S_0 \mathcal{B}_S \left(\frac{g^* \mu_B S B}{k_b T_{eff}} \right), \qquad (7.1.1)$$

gdzie $N_0\alpha = 0.26$ eV [114] to całka wymiany sp-d, x jest koncentracją jonów Mn²⁺, \mathcal{B}_S oznacza funkcję Brillouina dla spinu S = 5/2 odpowiadającego spinowi jonu Mn²⁺, g^* to efektywny czynnik Landego, zaś S_0 oraz T_{eff} to parametry fenomenologiczne odpowiedzialne antyferromagnetyczne za oddziaływanie jonów Mn²⁺. Dla koncentracji domieszek Mn x = 8.3 % parametry S_0 oraz T_{eff} wynoszą odpowiednio: $S_0 = 1.18$ oraz $T_{eff} = 2.55$ K [57, 115].

Na Rys. 7.1 (a) przedstawiony został samouzgodniony profil energii potencjalnej dla elektronów o z-towej składowej spinu $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ ($\sigma = \pm 1$) otrzymany dla napięcia $V_b = 0.05$ V. Symulacje transportu elektronowego w strukturze PRTD przeprowadzone zostały dla następu-



Rysunek 7.1: (a) Samouzgodniony profil energii potencjalnej dla elektronów o z-towej składowej spinu $s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \ (\sigma = \pm 1)$ w strukturze PRTD opartej na ZnSe/Zn_{0.95}Be_{0.05}Se/Zn_{0.92}Mn_{0.08}Se. Aktywny region nanourządzenia oddzielony jest od silnie domieszkowanych kontaktów (n-ZnSe) obszarami bufora z ZnSe. Kierunek z wyznacza kierunek wzrostu warstw półprzewodnikowych, zaś $\mu_{E,C}$ to potencjał chemiczny odpowiednio emitera oraz kolektora. (b) Schemat rozpatrywanej struktury PRTD.

jących parametrów geometrycznych nanourządzenia: szerokość studni kwantowej Zn_{0.92}Mn_{0.08}Se wynosi 5 nm, przy koncentracji domieszki Mn x = 8.3 %, szerokość barier potencjału z

 $Zn_{0.95}Be_{0.05}Se$ wynosi 3 nm, szerokość obszarów bufora z ZnSe po obu stronach nanourządzenia wynosi 4 nm, długość kontaktów wynosi 19 nm, przy koncentracji zjonizowanych donorów $N_D = 10^{18}$ cm⁻³. Całkowita długość nanourządzenia wynosi zatem 57 nm. Wysokość barier potencjału $U_0 = 0.115$ eV odpowiada różnicy energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy $Zn_{0.95}Be_{0.05}Se$ oraz ZnSe.

Symulacje przeprowadzone zostały w przybliżeniu stałej masy efektywnej elektronu dla całego obszaru nanourządzenia równej masie elektronu w ZnSe, $m = 0.16 m_0$, gdzie m_0 to masa spoczynkowa elektronu. Podobnie, stała elektryczna dla całego obszaru nanourządzenia odpowiada stałej elektrycznej dla ZnSe i wynosi $\epsilon = 8.6$. Symulacje przeprowadzone zostały w temperaturze 1.2 K na dyskretnej siatce w przestrzeni fazowej o liczbie punktów $N_z = 103$, $N_k = 100$, przy założeniu $\Delta_z = a$, gdzie a = 0.5667 nm odpowiada stałej sieci ZnSe.

Wybór parametrów geometrycznych rozpatrywanej struktury PRTD związany jest z celem niniejszego rozdziału, w którym planujemy badania wpływu zjawiska bistabilności oraz oscylacji na spinową polaryzację prądu otrzymywaną w strukturze PRTD. W rozdziałach 4 oraz 5 pokazano, że struktura geometryczna nanourządzenia ma znaczący wpływ na zjawiska bistabilności oraz oscylacji prądu, dlatego na podstawie wstępnych symulacji, parametry geometryczne rozpatrywanej struktury PRTD zostały dobrane w taki sposób, aby zjawiska będące przedmiotem badań były jak najsilniejsze. Przykładowo, wstępne obliczenia pokazały, że dla szerszej warstwy studni kwantowej wspomniane zjawiska nie zachodzą.

7.2 Spinowa polaryzacja prądu

Na Rys. 7.2 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla składowych spinowych prądu \uparrow,\downarrow otrzymane dla pola magnetycznego: (a) B = 2 T, (b) B = 4 T, (c) B = 6 T oraz (d) B = 8 T. W obecności zewnętrznego pola magnetycznego przyłożonego w kierunku wzrostu warstw $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, oddziaływanie wymienne pomiędzy spinami elektronów przewodnictwa oraz momentami magnetycznymi jonów manganu Mn²⁺ prowadzi do gigantycznego rozszczepienia Zeemana energii stanu rezonansowego w paramagnetycznej studni kwantowej. W wyniki rozszczepienia Zeemana warunki tunelowania rezonansowego dla elektronów o spinie ↑ oraz elektronów o spinie ↓ spełnione są dla różnych napięć. Efekt ten prowadzi do rozseparowania poszczególnych składowych spinowych prądu. Zauważmy (Rys. 7.2), że rezonansowe maksimum gestości pradu dla składowej spinowej pradu ↓ występuje dla niższej wartości napięcia, niż rezonansowe maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej ↑. Rozszczepienie maksimum prądu na charakterystyce prądowo-napięciowej na dwa maksima, odpowiadające poszczególnym składowym spinowym, zostało eksperymentalnie zaobserwowane przez Slobodskyy'ego i in. [60]. Na Rys. 7.3 przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa otrzymana eksperymentalnie dla struktury paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe w pracy [60]. Zauważmy, że otrzymana eksperymentalnie charakterystyka $j(V_b)$ odpowiada jakościowo wynikom symulacji transportu elektronowego przedstawionym



Rysunek 7.2: Charakterystyki prądowo-napięciowe dla poszczególnych składowych spinowych prądu $\uparrow, \downarrow (\sigma = \pm 1)$, otrzymane dla pola magnetycznego: (a) B = 2 T, (b) B = 4 T, (c) B = 6 T, (d) B = 8 T.

na Rys. 7.2. Ponadto obliczone wartości rozszczepienia ΔV_b rezonansowego maksimum gęstości prądu zgadzają się z wartościami eksperymentalnymi i wynoszą odpowiednio: $\Delta V_b \approx 0.05$ V dla pola magnetycznego B = 6 T oraz $\Delta V_b \approx 0.03$ V dla pola magnetycznego B = 2 T. W celu wyjaśnienia separacji rezonansowego maksimum gęstości prądu na dwa maksima odpowiadające poszczególnym składowym spinowym prądu, na Rys. 7.4 przedstawione zostały zależne od spinu rozkłady koncentracji elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej, obliczone dla wartości pola magnetycznego B = 4 T oraz napięcia: (a) $V_b = 0.072$ V, odpowiadającego maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej \downarrow oraz (b) $V_b = 0.12$ V, odpowiadającego maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej \uparrow . Po prawej stronie każdego z wykresów umieszczony został współczynnik transmisji w funkcji energii T(E) wyznaczony dla elektronów o różnym spinie. Położenia poszczególnych pików współczynnika transmisji na wykresie



Rysunek 7.3: Charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane eksperymentalnie przez Slobodskyy'ego i in. [60] dla struktury paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe. Kolejne krzywe odpowiadają różnym wartościom pola magnetycznego.

T(E) odpowiadają energiom stanów rezonansowych w studni kwantowej dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ (linia czerwona) oraz $\sigma = -1$ (linia niebieska). Zauważmy, że dla napięcia $V_b = 0.072$ V, jedynie stan rezonansowy elektronu o spinie \downarrow znajduje się w oknie transportu. A zatem warunek tunelowania rezonansowego spełniony jest wyłącznie dla elektronów o spinie \downarrow . Na Rys. 7.4 (a) obserwujemy wzrost koncentracji elektronów w stanie spinowym $\sigma = -1$ w studni kwantowej, podczas gdy koncentracja elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ w studni kwantowej jest mała. Z drugiej strony dla napięcia $V_b = 0.112$ V warunek tunelowania rezonansowego spełniony wyłącznie dla elektronów o spinie \uparrow . Analogicznie, na Rys. 7.4 (b) obserwujemy wzrost koncentracji elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ w studni kwantowej, podczas gdy koncentracji elektronów w stanie spinowym $\sigma = -1$ jest mała.

Rozseparowanie poszczególnych składowych spinowych prądu prowadzi do spinowej polaryzacji prądu zdefiniowanej wzorem

$$P = \frac{j_{\uparrow} - j_{\downarrow}}{j_{\uparrow} + j_{\downarrow}} \tag{7.2.1}$$

gdzie $j_{\uparrow}(j_{\downarrow})$ to poszczególne składowe spinowe prądu.

Na Rys. 7.5 przedstawiony został wykres spinowej polaryzacji prądu P w funkcji napięcia V_b wyznaczony dla różnych wartości pola magnetycznego B. Zauważmy, że dla rozpatrywanych wartości pola magnetycznego otrzymujemy niemal całkowitą spinową polaryzację prądu, przy czym spinowa polaryzacja prądu $P \simeq -1$ dla niskich wartości napięć, dla których gęstość prądu dla składowej spinowej \downarrow przyjmuje maksimum, podczas gdy spinowa polaryzacja prądu $P \simeq 1$ dla wyższych wartości napięć, w których całkowita gęstość prądu na charakterystykach $j(V_b)$ zdominowana jest przez elektrony o spinie \uparrow (Rys. 7.2).



Rysunek 7.4: Rozkłady gęstości elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = \pm 1$ otrzymane dla pola magnetycznego B = 4 T oraz napięcia: (a) $V_b = 0.072$ V, odpowiadającego maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz (b) $V_b = 0.12$ V, odpowiadającego maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej prądu \uparrow . Po prawej stronie każdego z rysunków umieszczony został wykres współczynnika transmisji w funkcji energii T(E) wyznaczony dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ (krzywa czerwona) oraz $\sigma = -1$ (krzywa niebieska).

Wyniki symulacji zależnego od spinu transportu elektronowego pokazują, że struktura paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej może pracować jako efektywny filtr spinowy, w którym spinowa polaryzacja prądu kontrolowana jest poprzez zmianę napięcia zewnętrznego. Innymi słowy, możemy zmieniać spinową polaryzację prądu od wartości $P \simeq 1$ do wartości $P \simeq -1$ oraz w przeciwnym kierunku poprzez odpowiednią zmianę napięcia zewnętrznego. Proces przełączania spinowej polaryzacji prądu w rozpatrywanym nanourządzeniu zaprezentowany został na Rys. 7.6, na którym przedstawiony został wykres spinowej polaryzacji prądu w funkcji czasu przy zwiększeniu napięcia od wartości, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \uparrow do wartości, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \downarrow (linia niebieska) oraz przy zmniejszeniu napięcia od wartości, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \downarrow do wartości, w której



Rysunek 7.5: Spinowa polaryzacja prądu P w funkcji napięcia V_b , obliczona dla struktury PRTD oraz trzech różnych wartości pola magnetycznego B = 2, 4, 6 T.

całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie ↑ (linia czerwona). Rys. 7.6 pokazuje, że czas przełączania nanourządzenia pomiędzy rozpatrywanymi stanami wynosi zaledwie kilka ps.

Wyniki obliczeń zaprezentowane w niniejszym podrozdziale pokazują, że struktura paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej jest dobrym kandydatem do konstrukcji filtra spinowego, w którym spinowa polaryzacja prądu może być zmieniana w czasie rzędu kilku ps poprzez zmianę napięcia zewnętrznego .



Rysunek 7.6: Spinowa polaryzacja prądu P w funkcji czasu t otrzymana przy zwiększeniu napięcia od wartości, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \uparrow do wartości napięcia, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \downarrow (linia niebieska) oraz przy zmniejszeniu napięcia od wartości, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \downarrow do wartości napięcia, w której całkowita gęstość prądu zdominowana jest przez elektrony od spinie \downarrow do wartości napięcia, w której całkowita

7.3 Wpływ oscylacji prądu na jego spinową polaryzację

Na Rys. 7.7 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla składowych spinowych prądu \uparrow, \downarrow oraz pola magnetycznego B = 2 T, uzyskane za pomocą metody Wignera-Poissona zależnej od czasu. Symulacje transportu elektronowego metodą zależną od czasu pozwoliły na wyznaczenie dwóch zakresów napięć, w których składowe spinowe prądu nie osiągają wartości ustalonej, lecz oscylują ze stałą częstotliwością. Na wykresie 7.7 zakresy napięć, w których pojawiają się oscylacje prądu zaznaczone zostały za pomocą kreskowanych obszarów prostokątnych. Ponadto na Rys. 7.7 (a) przedstawiony został wykres składowych spinowych gęstości prądu w funkcji czasu wyznaczony dla napięcia, dla którego układ osiąga stan ustalony, natomiast na Rys. 7.7 (b) przedstawiony został proces powstawania oscylacji składowych spinowych prądu. Zauważmy, że zakresy napięć, w których obserwujemy oscylacje prądu odpowiadają zakresom ujemnego oporu różniczkowego, odpowiednio dla składowej spinowej \downarrow oraz \uparrow . Wyniki obliczeń przedstawione na Rys. 7.7 pozostają w zgodności z wynikami zaprezentowanymi w rozdziale 4 dotyczącym struktury RTD. W rozdziale 4 pokazywaliśmy bowiem, że oscylacje prądu niespolaryzowanego w strukturze RTD występują w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce $j(V_b)$. W przypadku struktury PRTD możemy wyodrębnić



Rysunek 7.7: Charakterystyki prądowo-napięciowe dla składowych spinowych prądu \uparrow, \downarrow oraz pola magnetycznego B = 2 T obliczone za pomocą metody Wignera-Poissona zależnej od czasu. Zakresy oscylacji prądu zaznaczone zostały za pomocą kreskowanych obszarów prostokątnych. (a) Wykres składowych spinowych gęstości prądu w funkcji czasu podczas dochodzenia układu do stanu ustalonego. (b) Oscylacje składowych spinowych gęstości prądu. Na wstawkach (a) i (b) krzywa czerwona (niebieska) odpowiada składowej spinowej prądu $\uparrow(\downarrow)$

dwa zakresy ujemnego oporu różniczkowego (Rys.7.7), jeden dla elektronów o spinie \downarrow oraz drugi dla elektronów o spinie \uparrow . W związku z tym na charakterystyce $j(V_b)$ pojawiają się dwa zakresy oscylacji składowych spinowych prądu, jeden odpowiadający zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz drugi, odpowiadający zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow .

W celu przeprowadzenia szczegółowej analizy zjawiska oscylacji prądu w obu zakresach napięć, rozpatrzmy oscylacje pojawiające się dla napięcia: (a) $V_b = 0.092$ V odpowiadającego zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = -1$ oraz (b) $V_b = 0.112$ V odpowiadającego zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$. Na Rys. 7.8 przedstawione zostały wykresy składowych spinowych prądu w funkcji czasu dla obu rozpatrywanych napięć. Oscylacje składowych spinowych prądu w rozpatrywanych zakresach napięć powodują, że spinowa polaryzacja prądu w tych zakresach nie jest ustalona, lecz oscyluje ze stałą częstotliwością. Na Rys. 7.9 przedstawione zostały wykresy spinowej polaryzacji prądu w funkcji czasu otrzymane dla napięcia (a) $V_b = 0.092$ V oraz (b) $V_b = 0.112$ V. Zauważmy, że zjawisko oscylacji spinowej polaryzacji prądu w rozpatrywanej strukturze PRTD występuje w zakresach napięć, w których spinowa polaryzacja prądu jest niemal całkowita. Oscylacje gę-



Rysunek 7.8: Oscylacje składowych spinowych gęstości prądu otrzymane w polu magnetycznym B = 2 T, dla napięcia (a) $V_b = 0.092$ V z zakresu ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz (b) $V_b = 0.112$ V z zakresu ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow .

stości prądu przedstawione na Rys. 7.8 związane są z oscylacjami koncentracji elektronowej w nanourządzeniu. Na Rys. 7.10 przedstawione zostały rozkłady koncentracji elektronów o różnych spinach w funkcji czasu otrzymane dla rozpatrywanych napięć. Zauważmy, że dla napięcia $V_b = 0.092$ V [Rys. 7.10 (a) oraz (b)] rozkład koncentracji elektronów o spinie \downarrow oscyluje ze znacznie większą amplitudą niż rozkład koncentracji elektronów o spinie ↑, przy czym oscylacje te zachodzą głównie w obszarze studni kwantowej oraz obszarze emitera. Z drugiej strony dla napięcia $V_b = 0.112$ V [Rys. 7.10 (c) oraz (d)] rozkład koncentracji elektronów o spinie \uparrow oscyluje z większą amplitudą, niż rozkład koncentracji elektronów o spinie ↓. Podobnie jak poprzednio, największa amplituda oscylacji ładunku występuje w obszarze studni kwantowej oraz obszarze emitera. Na Rys. 7.11 przedstawiony został wykres koncentracji elektronów o różnym spinie w obszarze studni kwantowej n_{QW} oraz w obszarze emitera n_E w funkcji czasu otrzymany dla rozpatrywanych napięć. Zauważmy, że dla wartości napięcia $V_b = 0.092$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow , koncentracja elektronów o spinie↓ oscyluje w charakterystyczny sposób taki, że jeżeli koncentracja elektronów o spinie↓ w studni kwantowej osiąga minimum, to koncentracja elektronów o spinie \downarrow w obszarze emitera osiaga wartość maksymalna i na odwrót, jeśli koncentracja elektronów o spinie↓ w obszarze studni kwantowej osiaga wartość maksymalna, to koncentracja elektronów o spinie↓w obszarze emitera osiąga minimum. Podobne własności wykazuje koncentracja elektronów o spinie \uparrow dla napięcia $V_b = 0.112$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow [Rys.7.11 (b)].

Na Rys. 7.12 (a) oraz (b) przedstawiony został wykres zależnej od spinu koncentracji elektronowej wraz z profilem energii potencjalnej w chwilach czasu t_1 oraz t_2 , zaznaczonych odpowiednio



Rysunek 7.9: Oscylacje spinowej polaryzacji prądu P w funkcji czasu t otrzymane w polu magnetycznym B = 2 T dla napięcia (a) $V_b = 0.092$ V, odpowiadającego zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz (b) $V_b = 0.112$ V, odpowiadającego zakresowi ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow . Wstawki na rysunkach (a) i (b) przedstawiają powiększenie obszarów zaznaczonych prostokątami.

na wykresie 7.11 (a) oraz (b). Zauważmy, że dla napięcia $V_b = 0.092$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej \downarrow , zmiana rozkładu koncentracji elektronowej w studni kwantowej jest znacznie większa dla elektronów o spinie \downarrow , podczas gdy dla napięcia $V_b = 0.112$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej \uparrow , zmiana rozkładu koncentracji elektronowej w studni kwantowej jest znacznie większa dla elektronów o spinie \uparrow .

Przedstawmy teraz wyjaśnienie zjawiska oscylacji prądu w strukturze PRTD. W rozdziale 4, dotyczącym transportu elektronowego w strukturze RTD pokazaliśmy, że oscylacje prądu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego powstają w wyniku sprzężenia stanu kwazi-związanego w obszarze studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym, jaki tworzy się w obszarze emitera. Sprzężenie to mierzone jest przekrywaniem się funkcji falowych rozpatrywanych stanów. Oscylacje występujące w rozpatrywanej strukturze PRTD mają tą samą naturę i również związane są ze sprzężeniem stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w obszarze studni kwantowej oraz obszarze emitera. Jedyna różnica polega na tym, że sprzężenie to dla poszczególnych zakresów napięć zachodzi dla elektronów o różnych spinach. Rys. 7.13 przedstawia wykresy współczynnika transmisji w funkcji energii T(E) dla elektronów o różnych spinach, wyznaczone w chwilach czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 7.11. Poszczególne piki na wykresach T(E) odpowiadają tunelowaniu rezonansowemu przez stany kwazi-związane w studni kwantowej dla elektronów o spinie \uparrow (linia czerwona) oraz spinie \downarrow (linia niebieska). Ponadto na wstawkach Rys. 7.13 przedstawione zostały wykresy średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii, pozwalające



Rysunek 7.10: Rozkłady koncentracji elektronowej n w funkcji czasu t oraz położenia z otrzymane podczas oscylacji gęstości prądu. Wykresy (a) oraz (b) dotyczą odpowiednio koncentracji elektronów o spinie \uparrow oraz \downarrow otrzymanych dla napięcia $V_b = 0.092$ V, zaś wykresy (c) oraz (d) dotyczą koncentracji elektronów o spinie \uparrow oraz \downarrow otrzymanych dla napięcia $V_b = 0.112$ V. Obszary barier potencjału zaznaczone zostały białymi liniami przerywanymi.

na wyznaczenie energii stanów kwazi-związanych zlokalizowanych w obszarze emitera E_E^{σ} . Wykres 7.13 (a) dotyczy zakresu oscylacji związanego z obszarem ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow ($V_b = 0.092$ V), podczas gdy wykres 7.13 (b) dotyczy zakresu oscylacji związanego z obszarem ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow ($V_b = 0.112$ V). Rys. 7.13 pokazuje, że oscylacje składowej spinowej prądu \downarrow dla napięcia $V_b = 0.092$ V spowodowane są sprzężeniem stanu kwazi-związanego elektronu o spinie \downarrow zlokalizowanego w obszarze studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym elektronu o spinie \downarrow zlokalizowanym w obszarze emitera. Dla rozpatrywanego napięcia, oscylacje składowej spinowej prądu \uparrow wynikają z oddziaływania elektron-elektron, a zatem są indukowane przez oscylacje składowej spinowej prądu \downarrow . Analogiczna sytuacja ma miejsce w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow ($V_b = 0.112$) V. Oscylacje składowej spinowej prądu


Rysunek 7.11: Oscylacje koncentracji elektronów o różnych spinach w obszarze studni kwantowej n_{QW} oraz emitera n_E otrzymane dla dwóch wartości napięcia (a) $V_b = 0.092$ V oraz (b) $V_b = 0.112$ V.

↑ dla rozpatrywanego napięcia wynikają ze sprzężenia stanu kwazi-związanego elektronu o spinie ↑ zlokalizowanego w obszarze studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym elektronu o spinie ↑ zlokalizowanym w obszarze emitera, podczas gdy oscylacje składowej spinowej prądu ↓ wynikają z oddziaływania elektron-elektron, a zatem są indukowane przez oscylacje składowej spinowej prądu ↑.

Podsumowując, zależne od czasu symulacje transportu elektronowego w strukturze PRTD pokazały, że w rozpatrywanym nanourządzeniu mogą istnieć dwa zakresy oscylacji prądu, które występują w zakresie ujemnego oporu różniczkowego odpowiednio dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz \uparrow . W obu zakresach napięć oscylacje składowych spinowych prądu spowodowane są sprzężeniem stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera ze stanem kwazi-związanym zlokalizowanym w obszarze studni kwantowej. Sprzężenie to dotyczy stanów elektronowych o spinie \downarrow , w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz stanów elektronowych o spinie \uparrow w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \uparrow . W zakresach oscylacji spinowa polaryzacja prądu nie jest ustalona, lecz oscyluje ze stałą częstotliwością, przy czym oscylacje spinowej polaryzacji prądu występują w zakresach napięć, w których polaryzacja ta jest niemal całkowita.



Rysunek 7.12: Rozkłady koncentracji elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej dla elektronów o spinie \uparrow, \downarrow w chwilach czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 7.11. Wykresy wyznaczone zostały dla napięcia (a) $V_b = 0.092$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz (b) $V_b = 0.112$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow oraz (b) $V_b = 0.112$ V, odpowiadającego oscylacjom w zakresie ujemnego oporu różniczkowego dla składowej spinowej prądu \downarrow .



Rysunek 7.13: Współczynnik transmisji T w funkcji energii E dla elektronów o spinie \uparrow, \downarrow obliczony dla chwil czasu t_1 oraz t_2 zaznaczonych na Rys. 7.11 oraz napięcia (a) $V_b = 0.092$ V, (b) $V_b = 0.112$ V. Na wstawkach przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych ρ w funkcji energii E, pozwalający na wyznaczenie energii stanu kwazi-związanego w obszarze emitera E_E^{σ} .

7.4 Wpływ bistabilności na spinową polaryzację prądu

Wstępne symulacje transportu elektronowego wykonane dla symetrycznej struktury PRTD pokazały, że bistabilność prądu w symetrycznej heterostrukturze jest zaniedbywalnie mała. Aby wzmocnić zjawisko bistabilności prądu w strukturze PRTD wprowadzono asymetrię, polegającą na zwiększeniu szerokości bariery kolektora o jedną warstwę atomową. Na Rys. 7.14 przedstawiona została charakterystyka prądowo-napięciowa otrzymana w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia dla obu składowych spinowych prądu oraz pola magnetycznego B = 4 T. Zauważmy, że dla obu składowych spinowych prądu \uparrow, \downarrow charakte-



Rysunek 7.14: Charakterystyka prądowo-napięciowa obliczona dla asymetrycznej struktury PRTD w przypadku FBS oraz BBS dla obu składowych spinowych gęstości prądu oraz pola magnetycznego B = 4 T. (a) Charakterystyka $j(V_b)$ dla składowej spinowej prądu \uparrow . (b) Charakterystyka $j(V_b)$ dla składowej spinowej prądu \downarrow .

rystyki prądowo-napięciowe obliczone w przypadku stopniowego zwiększania napięcia (FBS) są istotnie różne od charakterystyk prądowo-napięciowych otrzymanych w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS). Wyniki te pokazują, że w asymetrycznej strukturze PRTD występuje zjawisko bistabilności. W celu lepszego zilustrowania bistabilności dla poszczególnych składowych spinowych prądu, na Rys. 7.14 (a) oraz (b) przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe otrzymane odpowiednio dla składowej spinowej prądu \uparrow oraz \downarrow . Poszczególne zakresy bistabilności na Rys. 7.14 zaznaczone zostały pionowymi liniami przerywanymi oraz oznaczone numerami od (I) do (III).



Rysunek 7.15: Rozkłady koncentracji elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej uzyskane w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia dla (I-a) zakresu bistabilności (I) oraz składowej spinowej prądu \uparrow , (I-b) zakresu bistabilności (I) oraz składowej spinowej prądu \downarrow , (II-a) zakresu bistabilności (II) oraz składowej spinowej prądu \uparrow , (II-b) zakresu bistabilności (II) oraz składowej spinowej prądu \downarrow , (III-a) zakresu bistabilności (III) oraz składowej spinowej prądu \uparrow , (III-b) zakresu bistabilności (III) oraz składowej spinowej prądu \downarrow , (III-b) zakresu bistabilności (II) oraz składowej spinowej prądu \downarrow , (III-a) zakresu bistabilności (III) oraz składowej spinowej prądu \uparrow , (III-b) zakresu bistabilności (III) oraz składowej spinowej prądu \downarrow

W rozdziale 4 wyjaśniono źródła bistabilność pradu w strukturach RTD, na podstawie których przedstawimy interpretację fizyczną bistabilności prądu w strukturze PRTD. Na Rys. 7.15 przedstawione zostały rozkłady koncentracji elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej uzyskane w przypadku stopniowego zwiększania (FBS) oraz zmniejszania (BBS) napięcia dla poszczególnych zakresów bistabilności zaznaczonych na Rys. 7.14. W każdym zakresie bistabilności (I)-(III) rozkłady koncentracji elektronowej wraz z profilami energii potencjalnej przedstawione zostały zarówno dla składowej spinowej prądu \uparrow (rysunki indeksowane literą (a) - linia czerwona) oraz \downarrow (rysunki indeksowane litera (b) - linia niebieska). Zauważmy, że w zakresie (I) bistabilność składowej spinowej prądu \downarrow związana jest z akumulacją elektronów o spinie \downarrow w studni kwantowej. W przypadku stopniowego zwiększania napięcia (FBS) [Rys. 7.15 (I-b)] obserwujemy akumulację elektronów o spinie ↓ w studni kwantowej, podczas gdy w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS), koncentracja elektronów o spinie↓ w studni kwantowej jest mała. Proces powstawania bistabilności pradu zwiazanej z akumulacja ładunku w studni kwantowej został opisany szczegółowo w rozdziale 4, dotyczącym struktury RTD. Bistabilność składowej spinowej prądu ↑ w zakresie (II) wynika w oddziaływania elektron-elektron, a zatem jest wyindukowana przez bistabilność składowej spinowej pradu \downarrow . W zakresie bistabilności (II), w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia (BBS), zarówno dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ jak i $\sigma = -1$ obserwujemy rozkład koncentracji elektronowej z charakterystycznym obszarem zubożenia elektronowego w obszarze emitera. Efektywny ładunek dodatni jaki powstaje w obszarze emitera powoduje, że w obszarze tym powstaje płytka studnia potencjału, w której tworzą się stany kwazi-związane. Zaprezentowane wyniki pokazują, że w zakresie (II) bistabilność składowych spinowych prądu związana jest z występowaniem 'plateau' na charakterystyce $i(V_b)$, przy czym warunek powstawania 'plateau', mówiący, że energia stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze studni kwantowej musi być większa od energii stanu kwazi-zwiazanego zlokalizowanego w obszarze emitera, spełniony jest wyłacznie dla elektronów o spinie \uparrow . Zjawisko bistabilności dla składowej spinowej pradu \downarrow jest natomiast wyindukowane przez składowa spinowa prądu ↑. Ponieważ podobny proces zachodzi w zakresie bistabilności (III) przeanalizujmy szczegółowo zakres (III) na charakterystyce $j(V_b)$. W zakresie (III) dla obu składowych spinowych prądu obserwujemy 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ w przypadku stopniowego zwiększania napięcia (FBS), przy czym warunki powstawania 'plateau' spełnione są wyłącznie dla elektronów o spinie ↑. Zjawisko 'plateau' dla elektronów o spinie ↓ jest zatem indukowane poprzez oddziaływanie elektron-elektron przez składowa spinowa pradu ↑. Proces indukowania 'plateau' dla elektronów o spinie ↓ przez składową spinową ↑ możemy również potwierdzić, jeżeli spojrzymy na charakterystykę pradowo-napieciowa zaprezentowana na Rys. 7.14. Z rozdziału 4, dotyczącego struktury RTD wiemy bowiem, że 'plateau' występuje w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Zauważmy, że w zakresie (III) wyłącznie składowa spinowa prądu ↑ znajduje się w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Aby jeszcze dobitniej pokazać, która ze składowych spinowych prądu jest odpowiedzialna za 'plateau' w zakresie (III), na Rys. 7.16 przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii otrzymany dla napięcia z zakresu (III) oraz (a) składowej spinowej gęstości prądu \uparrow oraz (b) składowej spinowej gęstości prądu \downarrow . Zauważmy (Rys. 7.16), że warunek powstawania 'plateau',



Rysunek 7.16: Šrednia gęstości stanów rezonansowych ρ w funkcji energii E obliczona dla napięcia z zakresu (III) oraz (a) składowej spinowej prądu \uparrow oraz (b) składowej spinowej prądu \downarrow . (c) Schemat tunelowania rezonansowego elektronów o obu spinach, które zachodzi w zakresie bistabilności (III) zaznaczonym na Rys. 7.14. Strzałka czarna ilustruje przepływ elektronu o dowolnym spinie, strzałka czerwona, przepływ elektronu o spinie \uparrow , zaś niebieska elektronu o spinie \downarrow .

mówiący o tym, że $E_{QW} > E_E$, spełniony jest wyłącznie dla elektronów o spinie \uparrow . Ponadto zauważmy, że stan kwazi-związany, który powstaje w obszarze emitera jest spinowo zdegenerowany. Ponieważ różnica energii pomiędzy stanem kwazi-związanym w obszarze emitera oraz stanami kwazi-związanymi w studni kwantowej zarówno dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = 1$ jak i $\sigma = -1$ jest porównywalna z ich energetycznym rozmyciem, proces tunelowania przez spinowo zdegenerowany stan kwazi-związany zlokalizowany w obszarze emitera odbywa się w sposób pokazany na Rys. 7.16 (c). Aby pokazać, że wzajemne relacje pomiędzy energiami poszczególnych stanów są zachowane dla całego zakresu bistabilności (III), na Rys. 7.17 przedstawiony został wykres energii stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera oraz studni kwantowej dla elektronów o spinie ↑,↓ w funkcji napięcia. Zauważmy, że relacja pomiędzy



Rysunek 7.17: Energia stanu kwazi-związanego E_E^{σ} zlokalizowanego w obszarze emitera oraz E_{QW}^{σ} zlokalizowanego w obszarze studni kwantowej w funkcji napięcia V_b . Wykres wyznaczony został dla zakresu bistabilności (III) na charakterystyce $j(V_b)$ przedstawionej na Rys. 7.14.

poziomami $E_{QW} > E_E$ w zakresie 'plateau' dla elektronów o spinie \uparrow spełniona jest w całym zakresie napięć (III). Dla napięcia, dla którego energia stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera staje się równa energii stanu kwazi-związanego dla elektronów o spinie \uparrow zlokalizowanego w studni kwantowej, bistabilność zanika.

Zjawisko bistabilności prądu w rozpatrywanej strukturze PRTD prowadzi do bistabilności spinowej polaryzacji prądu, co pokazuje Rys. 7.18. Spinowa polaryzacja prądu otrzymywana w przypadku stopniowego zwiększania napięcia jest różna od spinowej polaryzacji prądu otrzymanej w przypadku stopniowego zmniejszania napięcia. Opisane zjawisko bistabilności spinowej polaryzacji prądu jest zjawiskiem niepożądanym z punktu widzenia zastosowań, w których wymagana jest powtarzalność charakterystyk, a zatem powinno ono zostać uwzględnione przy projektowaniu filtru spinowej opartego na strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej.



Rysunek 7.18: Bistabilność spinowej polaryzacji prądu dla rozpatrywanej struktury PRTD.

7.5 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały wyniki symulacji komputerowych zależnego od spinu transportu elektronowego w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej, w której studnia kwantowa wytworzona została z rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego ZnMnSe. W zewnętrznym polu magnetycznym oddziaływanie spinów elektronów przewodnictwa z momentami magnetycznymi jonów Mn²⁺ prowadzi do gigantycznego rozszczepienia Zeemana stanu rezonansowego zlokalizowanego w obszarze paramagnetycznej studni kwantowej. Rozszczepienie energii stanu rezonansowego w studni kwantowej powoduje, że warunek tunelowania rezonansowego dla elektronów o różnym spinie spełniony jest dla różnych napięć zewnętrznych. Efekt ten prowadzi do separacji składowych spinowych gestości pradu, a zatem do powstania spinowej polaryzacji pradu. W niniejszym rozdziale przeanalizowano możliwość wykorzystania struktury PRTD do budowy efektywnego filtru spinowego. Pokazano, że w oparciu o strukturę PRTD możemy otrzymać niemal całkowitą spinową polaryzację prądu, która może być zdominowana zarówno przez elektrony o spinie ↑ jak i ↓. Ponadto pokazano możliwość zmiany spinowej polaryzacji prądu poprzez zmianę napięcia zewnętrznego. W niniejszym rozdziale przeanalizowano również wpływ zjawiska bistabilności oraz oscylacji pradu na spinowa polaryzacje pradu otrzymywana w strukturze PRTD. Wyniki symulacji pokazały, że rozpatrywane efekty prowadza do bistabilności spinowej polaryzacji pradu oraz obszarów napieć, w których spinowa polaryzacja prądu nie jest ustalona, lecz oscyluje ze stałą częstotliwością. Oscylacje spinowej polaryzacji prądu dotyczą zakresu napięć, w których polaryzacja ta jest niemal całkowita. Zjawiska bistabilności oraz oscylacji prądu powinny być zatem uwzględniane przy konstrukcji efektywnego filtra spinowego opartego na strukturze PRTD.

Rozdział 8

Spinowa polaryzacja prądu w strukturze ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej

W rozdziale 7 pokazaliśmy, że zastosowanie paramagnetycznej struktury rezonansowo-tunelowej daje możliwość uzyskania spinowej polaryzacji prądu. Efektywny filtr spinowy oparty na strukturze PRTD posiada jednak dwie zasadnicze wady, istotne z punktu widzenia przyszłych zastosowań. Pierwszą z nich jest konieczność zastosowania zewnętrznego pola magnetycznego, zaś drugą bardzo niska temperatura pracy (rzędu kilku K). W celu pokonania wspomnianych trudności, obecnie trwają intensywne prace nad zastosowaniem ferromagnetycznych struktur rezonansowo-tunelowych do otrzymywania spinowej polaryzacji prądu [1, 116, 117]. W tym celu stosowane są półprzewodniki wykazujące własności ferromagnetyczne w temperaturach bliskich temperaturze pokojowej np. GaMnAs [66, 67, 68], czy GaMnN [14, 49, 79].

W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną wyniki symulacji komputerowych zależnego od spinu transportu elektronowego w strukturze ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej (FRTD z ang. Ferromagnetic Resonant Tunnelling Diode) opartej na GaN/AlGaN/GaMnN. Zbadana zostanie struktura, w której zarówno warstwa emitera jak i studni kwantowej wytworzona jest z półprzewodnika o własnościach ferromagnetycznych (GaMnN). W rozdziale rozpatrzone zostaną dwie wzajemne konfiguracje namagnesowania warstw. W pierwszej z nich wzajemne namagnesowanie warstw będzie równoległe, natomiast w drugiej, antyrównoległe. Dla obu konfiguracji wyznaczone zostaną charakterystyki spinowej polaryzacji prądu w funkcji napięcia.

8.1 Model nanourządzenia

Przedmiotem badań niniejszego rozdziału jest zależny od spinu transport elektronowy w strukturze FRTD, zbudowanej z GaN/Al_{0.1}Ga_{0.9}N/GaMnN, w której zarówno obszar emitera jak i studni kwantowej wytworzony jest z półprzewodnika o własnościach ferromagnetycznych GaMnN [54, 72]. Różnica energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy Al_{0.1}Ga_{0.9}N oraz GaMnN



Rysunek 8.1: Profil energii potencjalnej dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = \pm 1$, otrzymany dla dwóch różnych konfiguracji namagnesowania warstw studni kwantowej oraz emitera: (a) równoległej oraz (b) antyrównoległej.

prowadzi do powstania efektywnego profilu energii potencjalnej składającego się ze studni kwantowej ograniczonej dwiema barierami potencjału. W rozpatrywanej strukturze FRTD zarówno studnia kwantowa jak i warstwa emitera wytworzone sa z półprzewodnika GaMnN o własnościach ferromagnetycznych. Ponieważ zjawisko ferromagnetyzmu w półprzewodniku GaMnN nie zostało do końca wyjaśnione z punktu widzenia teorii półprzewodników magnetycznych [54, 72], w niniejszym rozdziale rozszczepienie dna pasma przewodnictwa ΔE dla różnych spinów, związane z własnościami ferromagnetycznymi GaMnN, traktowane będzie jako parametr. Rozpatrzone zostaną dwie wzajemne konfiguracje namagnesowania warstw magnetycznych w obszarze emitera oraz studni kwantowej: (a) konfiguracja, w której namagnesowanie poszczególnych warstw jest równoległe oraz (b) konfiguracja, w której namagnesowanie poszczególnych warstw jest antyrównoległe. Na Rys. 8.1 (a) oraz (b) przedstawiony został samouzgodniony profil energii potencjalnej dla elektronów w stanie spinowym $\sigma = \pm 1$, otrzymany dla obu konfiguracji namagnesowania warstw. Symulacje transportu elektronowego w strukturze FRTD przeprowadzone zostały dla następujących parametrów geometrycznych: szerokość studni kwantowej z GaMnN wynosi 6 nm, szerokość barier potencjału z Al_{0.1}Ga_{0.9}N wynosi 3 nm, szerokość obszaru bufora z GaN po stronie kolektora wynosi 4 nm, długość kolektora wynosi 21 nm, zaś długośc emitera z GaMnN wynosi 25 nm, przy koncentracji zjonizowanych donorów zarówno w emiterze jak i kolektorze $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Całkowita długość nanourządzenia wynosi zatem 62 nm. Wysokość barier potencjału $U_0 = 0.13$ eV odpowiada różnicy energii dna pasma przewodnictwa pomiędzy Al_{0.1}Ga_{0.9}N oraz GaN.

Symulacje komputerowe przeprowadzone zostały przy założeniu stałej masy efektywnej elektronu dla całego obszaru nanourządzenia, równej masie elektronu w GaN, $m = 0.228 m_0$. Podobnie, stała elektryczna dla całego obszaru nanourządzenia odpowiada stałej elektrycznej dla GaN i wynosi $\epsilon = 9.5$. Obliczenia przeprowadzone zostały w temperaturze 4.2 K na dyskretnej siatce w przestrzeni fazowej o liczbie punktów $N_z = 121$, $N_k = 100$, przy założeniu $\Delta_z = a$, gdzie a = 0.5128 nm odpowiada stałej sieci dla GaN.

8.2 Spinowa polaryzacja prądu

Na Rys. 8.2 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla obu składowych spinowych prądu, otrzymane dla dwóch wzajemnych konfiguracji namagnesowania emitera oraz studni kwantowej: (a) konfiguracji równoległej oraz (b) konfiguracji antyrównoległej. Wykresy uzyskane zostały dla różnych wartości parametru ΔE . Zauważmy, że w przypadku równole-



Rysunek 8.2: Charakterystyki prądowo-napięciowe dla obu składowych spinowych prądu ($\sigma = \pm 1$) otrzymane dla dwóch wzajemnych konfiguracji namagnesowania warstw studni kwantowej oraz emitera: (a) konfiguracji równoległej oraz (b) konfiguracji antyrównoległej. Każdy z wykresów otrzymany został dla różnych wartości spinowego rozszczepienia ΔE dna pasma przewodnictwa w warstwie ferromagnetycznej.

głego namagnesowania warstw emitera i studni kwantowej, maksima gęstości prądu związane z tunelowaniem rezonansowym elektronów o spinie \uparrow oraz \downarrow występują dla prawie tego samego napięcia zewnętrznego V_b . Wraz ze wzrostem parametru ΔE wartość maksymalnej gęstości prądu dla składowej spinowej \uparrow rośnie, podczas gdy wartość maksymalnej gęstości prądu dla składowej spinowej \downarrow maleje. Zupełnie inną sytuację obserwujemy dla antyrównoległej konfiguracji namagnesowania warstw. W tym przypadku maksima gęstości prądu związane z tunelowaniem rezonansowym dla obu składowych spinowych prądu występują dla różnych napięć, przy czym wraz ze wzrostem parametru ΔE , maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej \uparrow przesuwa się w stronę niższych napięć, podczas gdy maksimum gęstości prądu dla składowej spinowej \downarrow przesuwa się w stronę wyższych wartości napięć. Efekt ten prowadzi do niemal całkowitego rozseparowania obu składowych spinowych prądu. Na Rys. 8.3 przedstawione zostały wykresy spinowej polaryzacji prądu w funkcji napięcia otrzymane dla różnych konfiguracji namagnesowania warstw magnetycznych. W przypadku równoległego namagnesowania warstw, w całym



Rysunek 8.3: Spinowa polaryzacja prądu w funkcji napięcia dla rozpatrywanej struktury FRTD w przypadku dwóch konfiguracji namagnesowania warstw emitera oraz studni kwantowej: (a) konfiguracji równoległej i (b) konfiguracji antyrównoległej.

rozpatrywanym zakresie napięć, otrzymujemy dodatnią spinową polaryzację prądu (prąd zdominowany przez elektrony o spinie \uparrow), przy czym dla każdej wartości parametru ΔE polaryzacja maleje wraz ze wzrostem napięcia, natomiast dla ustalonego napięcia V_b , spinowa polaryzacja prądu rośnie wraz ze wzrostem parametru ΔE . Zupełnie inną zależność obserwujemy dla antyrównoległego namagnesowania warstw magnetycznych. Rys. 8.3 (b) pokazuje, że w przypadku antyrównoległego namagnesowania warstw możemy otrzymać całkowitą spinową polaryzację prądu (P = -1 lub P = 1). Ponadto zauważmy, że wraz ze wzrostem wartości parametru ΔE , przejście pomiędzy stanami P = -1 oraz P = 1 ma charakter skokowy, czyli zachodzi w węższym zakresie napięć.

W celu interpretacji otrzymanych wyników, na Rys. 8.4 przedstawiona została uproszczona ilustracja procesu tunelowania rezonansowego elektronów o określonym spinie przez rozpatrywaną strukturę dla obu konfiguracji namagnesowania warstw emitera i studni kwantowej. Zauważmy, że tunelowanie rezonansowe przez strukturę FRTD w przypadku równoległego namagnesowania warstw emitera oraz studni kwantowej nie prowadzi do spinowej polaryzacji prądu. Spinowa polaryzacja prądu otrzymana na Rys. 8.3 (a) związana jest wyłącznie z wyższą wartością energii elektronów o spinie \uparrow w stosunku do energii elektronów o spinie \downarrow . Z drugiej strony w przypadku antyrównoległego namagnesowania warstw, warunki tunelowania rezonansowego dla elektronów



Rysunek 8.4: Uproszczona ilustracja procesu tunelowania rezonansowego elektronu w stanie spinowym $\sigma = \pm 1$ przez strukturę FRTD dla dwóch konfiguracji namagnesowania warstw emitera oraz studni kwantowej: równoległej (lewy rysunek) oraz antyrównoległej (prawy rysunek). Kolor czerwony (niebieski) odpowiada tunelowaniu elektronu o spinie $\uparrow (\downarrow)$, zaś E oraz C to odpowiednio emiter oraz kolektor.

o różnym spinie spełnione są dla różnych napięć, w wyniku czego prąd otrzymywany na wyjściu nanourzadzenia jest spinowo spolaryzowany.

Otrzymane wyniki symulacji komputerowych pokazują, że rozpatrywana struktura FRTD dla antyrównoległego namagnesowania warstw emitera i studni kwantowej może być wykorzystywana jako efektywny filtr spinowy, przy czym efektywność rozpatrywanego filtru będzie tym większa im większe będzie rozszczepienie ΔE dna pasma przewodnictwa w półprzewodniku ferromagnetycznym.

Jak wspomnieliśmy powyżej, ferromagnetyczne struktury rezonansowo-tunelowe mają tą wyższość nad strukturami paramagnetycznymi, że w strukturach ferromagnetycznych istnieje możliwość uzyskiwania spinowej polaryzacji prądu w temperaturach pokojowych. Na Rys. 8.5 przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe oraz wykresy spinowej polaryzacji prądu w funkcji napięcia obliczone dla konfiguracji antyrównoległej, temperatury pokojowej (T=300 K) oraz kilku różnych czasów relaksacji $\tau = 500$, 1000, 5000 fs oraz $\tau = \infty$ (brak rozpraszania). W obliczeniach przyjęto rozszczepienie dna pasma przewodnictwa $\Delta E = 10$ meV. Rys. 8.5



Rysunek 8.5: (a) Charakterystyki prądowo-napięciowe oraz (b) spinowa polaryzacja prądu w funkcji napięcia uzyskane dla temperatury pokojowej (T=300 K) oraz czasów rozpraszania $\tau = 500, 1000, 5000$ fs oraz $\tau = \infty$ (brak rozpraszania). W obliczeniach przyjęto antyrów-noległe namagnesowanie warstw emitera i studni kwantowej oraz rozszczepienie dna pasma przewodnictwa $\Delta E = 10$ meV.

pokazuje, że w temperaturze pokojowej otrzymujemy jedynie częściową spinową polaryzację prądu. Uzyskanie większej polaryzacji w temperaturze pokojowej byłoby możliwe dla struktur, w których rozszczepienie dna pasma przewodnictwa ΔE byłoby znacznie większe.

8.3 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale przedstawione zostały własności zależnego od spinu transportu elektronowego w strukturze ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaN/Al_{0.1}Ga_{0.9}N/GaMnN. W zaproponowanej strukturze zarówno warstwa emitera jak i studni kwantowej wytworzona została z półprzewodnika ferromagnetycznego GaMnN. W rozdziale rozpatrzono dwie wzajemne konfiguracje namagnesowania warstw emitera oraz studni kwantowej: (a) konfigurację, w której namagnesowanie poszczególnych warstw jest równoległe oraz (b) konfigurację, w której namagnesowanie warstw magnetycznych jest antyrównoległe. Dla obu konfiguracji namagnesowania zbadano możliwość otrzymania maksymalnej spinowej polaryzacji prądu. Pokazano, że dla antyrównoległego namagnesowania warstw otrzymujemy całkowitą spinową polaryzację prądu (P = 1 lub P = -1), przy czym zmiana spinowej polaryzacji prądu może odbywać się poprzez zmianę przyłożonego napięcia zewnętrznego. Wyniki symulacji komputerowych pokazały, że struktura FRTD przy antyrównoległym namagnesowaniu warstw może być zastosowana jako efektywny filtr spinowy, przy czym efektywność rozpatrywanego filtru będzie tym większa im większe będzie rozszczepienie spinowe dna pasma przewodnictwa ΔE . Zaletą rozpatrywanej struktury FRTD jako filtru spinowego jest możliwość pracy w temperaturze pokojowej bez obecności zewnętrznego pola magnetycznego. Jednak, jak pokazaliśmy w niniejszym rozdziale, w temperaturze pokojowej uzyskuje się jedynie częściową spinową polaryzację prądu.

Podsumowując, w niniejszym rozdziale zaproponowana została struktura ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej, w której uzyskano całkowitą spinową polaryzację prądu w temperaturze 4.2 K. Ponieważ rozszczepienie dna pasma przewodnictwa ΔE , związane z ferromagnetycznymi własnościami półprzewodnika traktowane było jako parametr, zaproponowana konfiguracja warstw magnetycznych, pozwalająca na uzyskanie całkowitej spinowej polaryzacji prądu, powinna być realizowana również na bazie innych półprzewodników ferromagnetycznych.

Rozdział 9

Podsumowanie

W niniejszej pracy zbadane zostały własności transportu elektronowego w niemagnetycznych oraz magnetycznych warstwowych strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa. Badania przeprowadzone zostały za pomocą samouzgodnionej metody Wignera-Poissona. Opracowana metoda Wignera-Poissona pozwala na przeprowadzenie symulacji transportu kwantowego w funkcji czasu z uwzględnieniem temperatury oraz procesów rozpraszania w przybliżeniu czasu relaksacji.

W pierwszej części rozprawy opisano oraz wyjaśniono zjawiska transportu zachodzące w niemagnetycznej strukturze dwu- oraz trój-barierowej diody rezonansowo-tunelowej (Rozdziały 4 i 5). Szczególną uwagę poświęcono zjawisku bistabilności oraz oscylacji prądu. W drugiej części rozprawy (Rozdziały 7 i 8) zbadano spinową polaryzację prądu w paramagnetycznych oraz ferromagnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych. W szczególności przedstawiono wpływ bistabilności oraz oscylacji prądu na spinową polaryzację prądu otrzymywaną w rozpatrywanych nanostrukturach. W rozprawie zbadano również wpływ temperatury oraz rozpraszania na własności transportowe w rozpatrywanych strukturach.

W rozdziale 4 przedstawione zostały wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego w strukturze dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej (RTD) opartej na GaAs/AlGaAs. Dla rozpatrywanej struktury RTD wyznaczono charakterystyki prądowo-napięciowe oraz przedstawiono zmiany koncentracji elektronowej oraz profilu energii potencjalnej w nanourządzeniu w rozpatrywanym zakresie napięć. Pokazano, że procesowi tunelowania rezonansowego przez stan rezonansowy w studni kwantowej towarzyszy akumulacja elektronów w obszarze studni. Szczególną uwagę poświęcono zakresowi 'plateau', który pojawia się w zakresie ujemnego oporu różniczkowego na charakterystyce $j(V_b)$. Dla zakresu 'plateau' wykonane zostały obliczenia zależne od czasu, które pokazały, że zjawisko to związane jest z tworzeniem się stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera oraz tunelowaniem rezonansowym elektronów przez ten stan. Wyniki obliczeń wykonanych dla poszczególnych wartości napięć, dla których obserwowany jest zakres 'plateau' doprowadziły do sformułowania następującego warunku występowania 'plateau': dla każdej wartości napięcia energia stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze emitera powinna być mniejsza od energii stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w obszarze centralnej studni kwantowej.

W rozdziale 4 omówione zostało również zjawisko bistabilności. Wyniki zaprezentowanych obliczeń wykazują jakościową zgodność z wynikami obserwowanymi eksperymentalnie w strukturach rezonansowo-tunelowych (Goldman et al. [23, 18]). Badania nad bistabilnością struktury RTD pozwoliły stwierdzić, że zjawisko bistabilności ma charakter wewnętrzny tzn. zależy od procesów fizycznych zachodzących wewnątrz urządzenia. Wyodrębniono dwa podstawowe źródła bistabilności. Pierwszym z nich jest oddziaływanie pomiędzy elektronami zakumulowanymi w centralnej studni kwantowej podczas procesu tunelowania rezonansowego przez stan rezonansowy w studni kwantowej, zaś drugim źródłem bistabilności jest tunelowanie elektronów przez stan kwazi-związany zlokalizowany w obszarze emitera, które zachodzi w zakresie 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Analiza bistabilność jest zjawiskiem silnie zależnym od struktury RTD pozwoliła zauważyć, że bistabilność jest zjawiskiem silnie zależnym od struktury geometrycznej nanourządzenia. Szczególny wpływ na bistabilność prądu ma szerokość barier potencjału oraz warstw bufora. Dla zbyt dużych szerokości tych obszarów następuje zanik zjawiska bistabilności.

Obliczenia wykonane metodą Wignera-Poissona zależną od czasu pozwoliły na zaobserwowanie oscylacji prądu w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. Zjawisko oscylacji prądu przebadane zostało w oparciu o zmienne w czasie rozkłady koncentracji elektronów oraz profile energii potencjalnej w nanourządzeniu. Pokazano, że oscylacje prądu wynikają ze sprzężenia stanu kwazi-związanego zlokalizowanego w centralnej studni kwantowej ze stanem kwazi-związanym zlokalizowanym w obszarze emitera, który powstaje w zakresie ujemnego oporu różniczkowego. W ostatniej części rozdziału 4 przedstawiono wyniki symulacji komputerowych transportu elektronowego dla różnych temperatur z uwzględnieniem procesów rozpraszania. Pokazano, że zarówno wzrost temperatury jak i rozpraszanie prowadzi do zmniejszenia gęstości prądu przepływającego przez nanourządzenie oraz zaniku bistabilności prądu.

Naturalnym rozszerzeniem struktury dwubarierowej diody rezonansowo-tunelowej jest struktura rezonansowa z trzema barierami potencjału (TRTD). W rozdziale 5 omówione zostały własności transportu elektronowego w strukturze trójbarierowej diody rezonansowo-tunelowej (TRTD), w której warunki tunelowania rezonansowego mogły być zmieniane poprzez zmianę energii dna pasma przewodnictwa jednej ze studni kwantowej o wartość ΔU . Dla różnych wartości parametru ΔU przedstawione zostały charakterystyki prądowo-napięciowe dla rozpatrywanej struktury TRTD. Pokazano, że przekroczenie pewnej granicznej wartości parametru ΔU skutkuje pojawieniem się zakresu 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$. Dla wartości granicznej parametru ΔU zaobserwowano gwałtowny wzrost współczynnika PVR do wartości PVR=9.6. Obliczenia energii stanów kwazi-związanych w nanourządzeniu pozwoliły stwierdzić, że zakres 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ związany jest z tunelowaniem rezonansowych elektronów przewodnictwa przez stan kwazi-związany zlokalizowany w obszarze emitera. Ponađto pokazano, że wraz ze wzrostem parametru ΔU zakres 'plateau' na charakterystyce $j(V_b)$ ulega poszerzeniu. Przedmiotem badań przedstawionych w rozdziale 5 było również zjawisko bistabilności w strukturze TRTD. Pokazano, że bistabilność prądu w strukturze TRTD jest znacznie wyraźniejsza od bistabilności obserwowanej w strukturze RTD. Bistabilność ta zależy wartości parametru ΔU .

Ostatnia część rozdziału 5 dotyczy badań zjawiska oscylacji prądu w strukturze TRTD. Zależne od czasu symulacje procesów transportu pokazały, że dla rozpatrywanej struktury TRTD występują dwa zakresy napięć, w których prąd oscyluje z wysoką częstotliwością rzędu THz. Pierwszy z nich związany jest z zakresem ujemnego oporu różniczkowego. Pokazano, że źródłem oscylacji w opisywanym zakresie jest sprzężenie pomiędzy stanami kwazi-związanymi zlokalizowanymi w obszarze emitera oraz w obszarze studni kwantowych. Drugi zakres oscylacji, nieobserwowany dotąd w strukturach rezonansowo-tunelowych, występuje poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu na charakterystyce $j(V_b)$. Pokazano, że źródłem oscylacji pradu w tym zakresie napieć jest sprzeżenie stanów rezonansowych zlokalizowanych w obu studniach kwantowych. Oscylacje prądu w zakresie napięć poniżej rezonansowego maksimum gęstości prądu przebadane zostały również z uwzględnieniem rozpraszania. Wyniki symulacji pokazały, że zjawisko oscylacji prądu zanika wraz z maleniem czasu relaksacji, a zatem może być obserwowane jedynie w niskich temperaturach, w których efekt rozpraszania elektronów na fononach jest pomijalnie mały. W rozdziale 5 przebadano również wpływ sprzężenia pomiędzy stanami elektronowymi zlokalizowanymi w obu studniach kwantowych - mierzonego szerokościa bariery potencjału pomiędzy nimi - na amplitudę oraz częstotliwość oscylacji pradu.

Opis transportu elektronowego w strukturach rezonansowo-tunelowych uzyskany w rozdziałach 4 oraz 5 został rozszerzony na badania spinowej polaryzacji prądu w strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej (PRTD). W rozdziale 7 omówione zostały własności zależnego od spinu transportu elektronowego w paramagnetycznej diodzie rezonansowo-tunelowej opartej na ZnSe/ZnBeSe/ZnMnSe, w której studnia kwantowa wytworzona została z rozcieńczonego półprzewodnika magnetycznego ZnMnSe. W zewnętrznym polu magnetycznym oddziaływanie spinu elektronu przewodnictwa ze spinami jonów Mn²⁺ prowadzi do gigantycznego rozszczepienia Zeemana poziomu elektronowego w obszarze paramagnetycznej studni kwantowej. Warunek tunelowania rezonansowego dla elektronów o różnych spinach spełniony jest dla różnych napięć zewnętrznych, co prowadzi do rozseparowania poszczególnych składowych spinowych gęstości pradu. Efekt ten generuje spinową polaryzację pradu. W rozdziale 7 przedstawiono wykresy spinowej polaryzacji prądu w funkcji napięcia otrzymane dla różnych wartości pola magnetycznego. Pokazano, że struktura PRTD może być wykorzystana jako filtr spinowy, w którym spinowa polaryzacja prądu jest kontrolowana poprzez zmianę napięcia zewnętrznego. Korzystając z metody Wignera-Poissona zależnej od czasu wyznaczono czas przełączania pomiędzy stanami o przeciwnej spinowej polaryzacji prądu, otrzymując czas przełączania rzędu kilku ps).

Ponadto w rozdziale 7 przebadano wpływ zjawisk bistabilności oraz oscylacji prądu na jego spinową polaryzację otrzymywaną w strukturze PRTD. Wyniki symulacji pokazały, że bistabilność prądu uzyskiwana w strukturach rezonansowo-tunelowych PRTD jest również obserwowana dla poszczególnych składowych spinowych prądu. Procesy fizyczne odpowiedzialne za bistabilność w rozpatrywanej strukturze PRTD są podobne jak w przypadku niemagnetycznych struktur rezonansowych, z tą różnicą, że dotyczą one poszczególnych składowych spinowych prądu. Zauważono, że jeżeli jedna ze składowych spinowych prądu wykazuje cechę bistabilności to bistabilność ta indukuje bistabilność składowej prądu o przeciwnym spinie. W rozdziale 7 pokazano również, że bistabilność poszczególnych składowych spinowych prądu prowadzi do bistabilności spinowej polaryzacji prądu w strukturze PRTD.

Zastosowanie metody Wignera-Poissona zależnej od czasu pozwoliło na wyznaczenie dwóch zakresach oscylacji składowych spinowych prądu, występujących w zakresie ujemnego oporu różniczkowego, odpowiednio dla składowych spinowych prądu ↑,↓. Wyjaśniono, że źródłem oscylacji w poszczególnych zakresach napięć jest sprzężenie zależnych od spinu stanów rezonansowych zlokalizowanych w obszarze emitera oraz w obszarze studni kwantowej, przy czym oscylacje jednej ze składowych spinowych prądu indukują oscylacje składowej prądu o spinie przeciwnym. Pokazano, że oscylacje składowych spinowych prądu prowadzą do oscylacji spinowej polaryzacji prądu w zakresach napięć, w których spinowa polaryzacja prądu jest maksymalna.

Filtr spinowy oparty na strukturze paramagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej posiada jednak dwie zasadnicze wady, istotne z punktu widzenia zastosowań. Pierwszą z nich jest konieczność stosowania zewnętrznego pola magnetycznego, zaś drugą niska temperatura pracy. W rozdziale 8 zbadano możliwość uzyskiwania spinowej polaryzacji prądu w strukturze ferromagnetycznej diody rezonansowo-tunelowej opartej na GaMnN/Al_{0.1}Ga_{0.9}N/GaMnN. Zaproponowano strukturę, w której zarówno warstwa emitera jak i studni kwantowej wytworzona została z półprzewodnika ferromagnetycznego. Zbadano przepływ pradu dla dwóch wzajemnych konfiguracji namagnesowania warstw magnetycznych: (a) konfiguracji, w której namagnesowanie poszczególnych warstw skierowane jest równolegle oraz (b) konfiguracji, w której namagnesowanie warstw magnetycznych skierowane jest antyrównolegle. Pokazano, że wyłącznie antyrównoległa konfiguracja namagnesowania warstw magnetycznych prowadzi do całkowitej spinowej polaryzacji prądu (P = 1 lub P = -1). W układzie takim zmiana spinowej polaryzacji pradu może odbywać się poprzez zmianę przyłożonego napięcia zewnętrznego. Wyniki symulacji pokazały, że struktura FRTD w konfiguracji antyrównoległej może pracować jako efektywny filtr spinowy, przy czym efektywność rozpatrywanego filtru będzie tym większa, im większe będzie rozszczepienie spinowe ΔE dna pasma przewodnictwa. Struktura filtru spinowego opartego na GaMnN/Al_{0.1}Ga_{0.9}N/GaMnN w antyrównoległej konfiguracji namagnesowania jest najlepszą realizacją filtru spinowego zaprezentowaną w niniejszej rozprawie. Wyniki badań dotyczące struktury FRTD, przedstawione w niniejszej pracy mają charakter

wstępny i będą rozwijane w dalszych etapach mojej pracy naukowej. Zaletą rozpatrywanej struktury FRTD jako filtru spinowego jest możliwość jej pracy w temperaturze pokojowej. W rozdziale 8 pokazano, że w temperaturze pokojowej uzyskuje się ok. 50-cio procentową spinową polaryzację prądu, która jest znacząco mniejsza w porównaniu do 100 procentowej polaryzacji otrzymanej w niskich temperaturach.

Podsumowując, opracowana w niniejszej rozprawie samouzgodniona metoda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego w niemagnetycznych oraz magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych pozwoliła na wykonanie systematycznych badań transportu kwantowego w strukturach rezonansowo-tunelowych typu mesa. Wyniki zaprezentowane w rozdziałach 4 oraz 5 mogą mieć praktyczne zastosowanie przy projektowaniu układów logicznych opartych na strukturach RTD oraz generatorów o częstotliwości rzędu THz, natomiast wyniki zaprezentowane w rozdziałe 7 oraz 8 mogą być wykorzystane do budowy filtra spinowego opartego na magnetycznych strukturach rezonansowo-tunelowych dla potrzeb spintroniki.

Dodatek A

Wyprowadznie kinetycznego równania ruchu Wignera dla układu 1D

Metoda Wignera-Poissona symulacji transportu elektronowego oparta jest na modelu pola średniego, w którym oddziaływanie pomiędzy N elektronami zastąpione jest oddziaływaniem elektronu z efektywnym polem średnim. Zastosowanie przybliżenia pola średniego pozwala uprościć problem N oddziałujących elektronów do problemu N niezależnych elektronów oddziałujących z efektywnym polem średnim. Podobnie jak w przypadku równania Schrödingera, równanie ruchu dla N-elektronowej macierzy gęstości możemy rozseparować na układ N jednoelektronowych równań ruchu, co pozwala na sprowadzenie N-elektronowej funkcji Wignera do problemu jednoelektronowej funkcji Wignera [96, 97].

Równanie ruchu dla operatora gęstości w przybliżeniu jednoelektronowym

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \qquad (A.0.1)$$

w reprezentacji położeniowej dla układu 1D możemy zapisać w postaci

$$i\hbar \frac{\partial \rho(z_1, z_2, t)}{\partial t} = \hat{H}(z_1)\rho(z_1, z_2, t) - \rho(z_1, z_2, t)\hat{H}(z_2),$$
(A.0.2)

gdzie $\hat{H}(z_i)$ jest hamiltonianem jednoelektronowym.

W modelu pola średniego

$$\hat{H}(z_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz_i^2} + U(z_i), \qquad (A.0.3)$$

gdzie $U(z_i) = U_{zew}(z_i) + U_{eff}(z_i)$ jest wyrażeniem na energię potencjalną elektronu w polu zewnętrznym $U_{zew}(z)$, zaś $U_{eff}(z)$ jest efektywną energią oddziaływań elektron-elektron wyznaczoną za pomocą metody pola średniego.

Równanie ruchu dla macierzy gęstości przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{\partial \rho(z_1, z_2, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right] \rho(z_1, z_2, t) + [U(z_1) - U(z_2)] \rho(z_1, z_2, t).$$
(A.0.4)

Aby wyprowadzić kinetyczne równanie ruchu Wignera dokonajmy transformaty Wignera-Weyla [84] równania ruchu dla macierzy gęstości (A.0.4). W tym celu wprowadzamy zamianę zmiennych

$$z_1 - z_2 = \xi,$$
 $(z_1 + z_2)/2 = z.$

Stąd

$$z_1 = z + \frac{\xi}{2},$$
 $z_2 = z - \frac{\xi}{2}$

oraz

$$\begin{array}{rcl} \frac{\partial}{\partial z_1} & = & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \xi}, \\ \\ \frac{\partial}{\partial z_2} & = & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial \xi}. \end{array}$$

Równanie ruchu dla macierzy gęstości (A.0.4) w nowych zmiennych przyjmuje postać

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(z+\frac{\xi}{2},z-\frac{\xi}{2},t\right)}_{(I)} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z}-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^2\right]\rho\left(z+\frac{\xi}{2},z-\frac{\xi}{2},t\right)}_{(II)} + \underbrace{\left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right)\right]\rho\left(z+\frac{\xi}{2},z-\frac{\xi}{2},t\right)}_{(III)}.$$
(A.0.5)

Następnie dokonajmy obustronnej transformaty Fouriera równania (A.0.5). Ze względu na przejrzystość wykonywanych rachunków rozpatrzmy kolejno poszczególne wyrazy równania (A.0.5)

$$(I) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \, \rho \left(z + \frac{\xi}{2}, z - \frac{\xi}{2}, t \right) \right\} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \rho \left(z + \frac{\xi}{2}, z - \frac{\xi}{2}, t \right) \right\} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f^{\mathcal{W}}(z, k, t).$$
(A.0.6)

Transformata Fouriera wyrazów (II) oraz (III) w równaniu A.0.5 jest znacznie bardziej skomplikowana

$$(\text{II}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^2 - \left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)^2 \right] \rho \left(z + \frac{\xi}{2}, z - \frac{\xi}{2}, t \right) \right\} = \\ = -\frac{\hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \frac{\partial^2}{\partial z \partial \xi} \rho \left(z + \frac{\xi}{2}, z - \frac{\xi}{2}, t \right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, e^{ik'\xi} \, f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \right) \right\} = \\ = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, e^{ik'\xi} \, f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \right) \right\} = \\ = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{-ik\xi} \frac{1}{2\pi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dk' \, ik'e^{ik'\xi} \, f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \right) \right\} = \\ = -\frac{i\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, k' \, f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \, \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, e^{i(k'-k)\xi} \right\} = \\ = -\frac{i\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial z} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \, k' \, f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \, \delta(k'-k) = -\frac{i\hbar^2 k}{m} \frac{\partial}{\partial z} f^{\mathcal{W}}(z, k, t).$$
 (A.0.7)

Ostatni wyraz

$$(\text{III}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-ik\xi} \left[U\left(z + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(z - \frac{\xi}{2}\right) \right] \rho\left(z + \frac{\xi}{2}, z - \frac{\xi}{2}, t\right) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-ik\xi} \left[U\left(z + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(z - \frac{\xi}{2}\right) \right] \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \ e^{ik'\xi} \ f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \right) = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} f^{\mathcal{W}}(z, k', t) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(z - \frac{\xi}{2}\right) \right].$$

Jeżeli zdefiniujemy potencjał nielokalny w postaci

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right],\tag{A.0.8}$$

otrzymujemy

$$(\text{III}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}(z, k-k') f^{\mathcal{W}}(z, k', t).$$
(A.0.9)

Równanie ruchu Wignera przyjmuje postać

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f^{\mathcal{W}}(z,k,t) = -\frac{i\hbar^2 k}{m}\frac{\partial}{\partial z}f^{\mathcal{W}}(z,k,t) + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{2\pi}\mathcal{U}(z,k-k')f^{\mathcal{W}}(z,k',t).$$
(A.0.10)

Po uproszczeniu równanie to możemy zapisać jako

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{\mathcal{W}}(z,k,t) + \frac{\hbar k}{m}\frac{\partial}{\partial z}f^{\mathcal{W}}(z,k,t) + \frac{i}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dk'\,\mathcal{U}(z,k-k')f^{\mathcal{W}}(z,k',t) = 0, \qquad (A.0.11)$$

gdzie potencjał nielokalny $\mathcal{U}(z,k-k')$

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right].$$
(A.0.12)

Dodatek B

Numeryczna implementacja metody Wignera-Poissona

Numeryczna implementacja metody Wignera-Poissona wymaga dyskretyzacji zarówno równania Wignera jak i równania Poissona. W dodatku tym omówione zostaną metody różnicowe stosowane do rozwiązywania obu równań.

B.1 Dyskretyzacja równania Wignera

Równanie Wignera w postaci

$$\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial z} + \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}(z,k-k') f^{\mathcal{W}}(z,k',t) = \frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t} \bigg|_{s}, \quad (B.1.1)$$

jest równaniem różniczkowo-całkowym, w którym funkcja Wignera $f^{\mathcal{W}}(z,k,t)$ jest funkcją położenia z, składowej z-owej wektora falowego $k_z = k$ oraz czasu t. Numeryczne rozwiązywanie równania Wignera wymaga wprowadzenia dyskretnej siatki położenia i składowej wektora falowego w przestrzeni fazowej (z,k) w której obliczać będziemy funkcję Wignera w kolejnych chwilach czasu t. Zapiszmy równanie (B.1.1) w równoważnej postaci

$$(\mathcal{T} + \mathcal{D} + \mathcal{P} + \mathcal{S}) f^{\mathcal{W}}(z, k, t) = 0, \qquad (B.1.2)$$

gdzie $\mathcal{T}, \mathcal{D}, \mathcal{P}, \mathcal{S}$ to kolejne operatory w równaniu Wignera wyrażone wzorami

$$\mathcal{T} = \frac{\partial}{\partial t}, \tag{B.1.3}$$

$$\mathcal{D} = \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial z}, \tag{B.1.4}$$

$$\mathcal{P} = \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}(z, k - k'), \qquad (B.1.5)$$

$$S = -\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{s}.$$
 (B.1.6)

W dalszej części rozdziału przedstawimy problem dyskretyzacji przestrzeni fazowej (z, k) oraz poszczególnych wyrazów w równaniu Wignera (B.1.2).

Dyskretyzacja przestrzeni fazowej

Pierwszym etapem numerycznego rozwiązania równania Wignera jest dyskretyzacja przestrzeni fazowej (z, k) oraz czasu t. Dokonajmy dyskretyzacji zmiennej z zakładając, że odległość pomiędzy dwoma punktami dyskretnej siatki położenia jest stała i równa Δ_z . A zatem

$$z_i = i\Delta_z, \qquad i = 0, 1, 2, ..., N_z.$$
 (B.1.7)

Dyskretyzacja składowej wektora falowego k nie może zostać przeprowadzona w sposób dowolny, co związane jest z formą potencjału nielokalnego. Zauważmy, że potencjał nielokalny w postaci

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right],\tag{B.1.8}$$

jest transformatą Fouriera funkcji

$$f(\xi) = U\left(z + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(z - \frac{\xi}{2}\right). \tag{B.1.9}$$

Dokonując dyskretyzacji równania Wignera, transformata Fouriera występująca w wyrażeniu (B.1.8) na potencjał nielokalny zamieniana jest w dyskretną transformatę Fouriera, co czyni zmienne k oraz ξ zmiennymi zależnymi. Zauważmy jednak, że potencjał lokalny U(z) występujący w równaniu (B.1.8), określony jest w węzłach dyskretnej siatki położenia z_i . Warunek ten wymusza dyskretyzację zmiennej ξ taką, że odległość pomiędzy dwoma punktami dyskretnej siatki równa jest $\Delta_{\xi} = 2\Delta_z$.

A zatem

$$\xi_{i'} = 2i'\Delta_z, \qquad i' = 0, 1, 2, ..., N_{\xi}.$$
 (B.1.10)

Korzystając z periodyczności dyskretnej transformaty Fouriera otrzymujemy warunek dotyczący przedziału zmienności składowej wektora falowego k

$$k_{max} - k_{min} = \frac{2\pi}{\Delta_{\xi}} = \frac{\pi}{\Delta_z}.$$
(B.1.11)

Wybór wartości k_{max} oraz k_{min} w wyrażeniu (B.1.11) jest dowolny. Ponieważ rozpatrywać będziemy transport zarówno dla dodatnich jak i ujemnych wartości składowej wektora falowego k, przedział zmienności wektora falowego wygodnie jest wybrać w taki sposób, aby

$$k_{max} = -k_{min} = \frac{1}{2} \left(k_{max} - k_{min} \right) = \frac{\pi}{2\Delta_z}.$$
 (B.1.12)

Zauważmy, że wybór zbyt dużej wartości Δ_z powoduje, że przedział rozpatrywanej przestrzeni składowej wektora falowego k jest mały, co może prowadzić do pominięcia procesów transportu z udziałem elektronów o wyższych energiach. Aby temu zapobiec, wybór Δ_z musi zostać przeprowadzony w taki sposób, aby przedział rozpatrywanej przestrzeni wektora falowego k zawierał wszystkie możliwe energie nośników. Jeżeli przyjmiemy, że wartość Δ_z równa jest stałej sieci a

dla badanego materiału, przedział zmienności wektora falowego k ograniczony będzie do pierwszej strefy Brillouina. Zakładając, że liczba węzłów dyskretnej siatki zmiennej k równa jest N_k otrzymujemy

$$\Delta_k = \frac{k_{max} - k_{min}}{N_k} = \frac{\pi}{N_k \Delta_z}.$$
(B.1.13)

Z drugiej strony zauważmy, że rozwiązanie równania Wignera w postaci (B.1.1) dla k = 0 jest niemożliwe . A zatem dyskretyzacja zmiennej k musi przebiegać dodatkowo w taki sposób, aby nie zawierała punktu k = 0. W tym celu przyjmujemy, że

$$k_j = \frac{\pi}{N_k \Delta_z} \left[j - \frac{1}{2} \left(N_k - 1 \right) \right], \qquad j = 0, 1, 2..., N_k - 1, \tag{B.1.14}$$

gdzie N_k musi być liczbą parzystą.

Schemat dyskretnej siatki (z_i, k_j) w przestrzeni fazowej przedstawiony został na Rys. B.1.



Rysunek B.1: Dyskretna siatka w przestrzeni fazowej (z_i, k_j) używana do numerycznego rozwiązywania równania Wignera. Warunki brzegowe dla równania Wignera nałożone są w czerwonych punktach po prawej i lewej stronie pudła obliczeniowego, zaś strzałki oznaczają kierunek obliczania ilorazu różnicowego występującego w operatorze \mathcal{D} .

Dyskretyzacja czasu t w równaniu Wignera jest równie prosta jak dyskretyzacja położenia. Jeżeli założymy, że odstęp pomiędzy dwiema chwilami czasu równy jest Δ_t , możemy zapisać

$$t_l = l\Delta_t, \qquad l = 0, 1, 2, ..., N_t.$$
 (B.1.15)

Funkcję Wignera na tak zdefiniowanej siatce różnicowej będziemy zapisywać w postaci

$$f^{\mathcal{W}}(z_i, k_j, t_l) = f^{\mathcal{W}}_{i,j,l}.$$
 (B.1.16)

Dyskretyzacja wyrazu z operatorem \mathcal{D}

Działanie operatora ${\mathcal D}$ na funkcję Wignera zdefiniowane jest wzorem

$$\mathcal{D}[f^{\mathcal{W}}(z,k,t)] = \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial z} f^{\mathcal{W}}(z,k,t).$$
(B.1.17)

W zależności od typu ilorazu różnicowego, jaki zastosujemy w celu dyskretyzacji pierwszej pochodnej w powyższym wyrażeniu, możemy otrzymać kilka różnych postaci różnicowych działania operatora \mathcal{D} na funkcję Wignera. Zauważmy jednak, że zastosowany iloraz różnicowy musi być zdefiniowany zarówno dla dodatnich jak i dla ujemnych wartości wektora falowego k. Zastosowanie dwupunktowej aproksymacji pierwszej pochodnej prowadzi do wyrażenia

$$\mathcal{D}[f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}] = \frac{\hbar k_j}{m} \frac{1}{\Delta_z} \begin{cases} f_{i+1,j,l}^{\mathcal{W}} - f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j < 0\\ f_{i,j,l}^{\mathcal{W}} - f_{i-1,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j > 0. \end{cases}$$
(B.1.18)

Znacznie dokładniejsza i używana w niniejszej pracy jest trójpunktowa aproksymacja różnicowa pierwszej pochodnej, wyrażona wzorem

$$\mathcal{D}[f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}] = \frac{\hbar k_j}{m} \frac{1}{2\Delta_z} \begin{cases} -f_{i+2,j,l}^{\mathcal{W}} + 4f_{i+1,j,l}^{\mathcal{W}} - 3f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j < 0\\ f_{i-2,j,l}^{\mathcal{W}} - 4f_{i-1,j,l}^{\mathcal{W}} + 3f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j > 0. \end{cases}$$
(B.1.19)

Zauważmy, że postać różnicowa wyrazu z operatorem \mathcal{D} wymaga znajomości funkcji Wignera na brzegach pudła obliczeniowego, przy czym dla dodatnich wartości składowej wektora falowego kwarunek brzegowy dotyczy lewej strony pudła obliczeniowego, zaś dla ujemnych wartości składowej wektora falowego k prawej strony pudła obliczeniowego. Warunki brzegowe dla równania Wignera zostały schematycznie zaznaczone na Rys. B.1, zaś ich postać została szczegółowo omówiona w rozdziale 3.3.

Dyskretyzacja wyrazu z operatorem \mathcal{P}

Dyskretyzacja wyrazu z operatorem \mathcal{P} w równaniu Wignera jest znacznie bardziej skomplikowana. Działanie operatora \mathcal{P} na funkcję Wignera zdefiniowane jest wzorem

$$\mathcal{P}[f^{\mathcal{W}}(z,k,t)] = \frac{i}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \mathcal{U}(z,k-k') f^{\mathcal{W}}(z,k',t), \qquad (B.1.20)$$

gdzie potencjał nielokalny

$$\mathcal{U}(z,k-k') = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \ e^{-i(k-k')\xi} \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right]. \tag{B.1.21}$$

Zauważmy, że funkcja $f(\xi) = U\left(z + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(z - \frac{\xi}{2}\right)$ w wyrażeniu podcałkowym jest funkcją nieparzystą ze względu na zmienną ξ . A zatem potencjał nielokalny upraszcza się do postaci

$$\mathcal{U}(z,k-k') = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, \sin\left[(k-k')\xi\right] \left[U\left(z+\frac{\xi}{2}\right) - U\left(z-\frac{\xi}{2}\right) \right]. \tag{B.1.22}$$

Dyskretna postać potencjału nielokalnego wyraża się wzorem

$$\mathcal{U}(z_i, k_j - k_{j'}) = -i \sum_{i' = -\infty}^{\infty} \Delta_{\xi} \sin\left[(k_i - k_{j'})\xi_{i'}\right] \left[U\left(z_i + \frac{\xi_{i'}}{2}\right) - U\left(z_i - \frac{\xi_{i'}}{2}\right) \right].$$
(B.1.23)

Z poprzednich rozważań wiemy, że $z_i=i\Delta_z,\,\xi_{i'}=2i'\Delta_z$ oraz

$$k_j - k_{j'} = \frac{\pi}{N_k \Delta_z} (j - j').$$
 (B.1.24)

Stąd otrzymujemy

$$\mathcal{U}_{i,j-j'} = -2i\Delta_z \sum_{i'=-\infty}^{\infty} \sin\left[\frac{2\pi}{N_k}i'(j-j')\right] (U_{i+i'} - U_{i-i'}).$$
(B.1.25)

Wyrażenie (B.1.25) sugeruje, że sumowanie po indeksie i' odbywa się od minus do plus nieskończoności. W celu wyeliminowania tej trudności ponownie skorzystamy z periodyczności transformaty Fouriera, ograniczając sumowanie do N_k wyrazów. Wybór N_k elementów do sumowania musi być jednak zgodny z wyborem przedziału zmienności wektora falowego k, a zatem $-\frac{1}{2}N_k < i' \leq \frac{1}{2}N_k$. Dodatkowo, ze względu na parzystość funkcji podcałkowej sumowanie możemy ograniczyć do przedziału $0 < i' \leq \frac{1}{2}N_k$, otrzymując

$$\mathcal{U}_{i,j-j'} = -4i\Delta_z \sum_{i'=0}^{N_k/2} \sin\left[\frac{2\pi}{N_k}i'(j-j')\right] (U_{i+i'} - U_{i-i'}). \tag{B.1.26}$$

A zatem różnicowa postać działania operatora ${\mathcal P}$ na funkcję Wignera wyraża się wzorem

$$\mathcal{P}[f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}] = \frac{i\Delta_k}{2\pi\hbar} \sum_{j'=0}^{N_k} U_{i,j-j'} f_{i,j',l} = = \frac{4\Delta_k \Delta_z}{2\pi\hbar} \sum_{j'=1}^{N_k} f_{i,j',l} \left\{ \sum_{i'=0}^{N_k/2} \sin\left[\frac{2\pi}{N_k} i'(j-j')\right] (U_{i+i'} - U_{i-i'}) \right\}.$$
 (B.1.27)

Dyskretyzacja wyrazu z operatorem S

Działanie operatora \mathcal{S} na funkcję Wignera zdefiniowane jest wzorem

$$\mathcal{S}[f^{\mathcal{W}}(z,k,t)] = -\frac{\partial f^{\mathcal{W}}(z,k,t)}{\partial t}\Big|_{s} = -\frac{1}{\tau} \left(f^{\mathcal{W}}(z,k,t) - \frac{f_{0}^{\mathcal{W}}(z,k)}{n_{0}(z)} n(z,t) \right).$$
(B.1.28)

Aby dokonać dyskretyzacji powyższego wyrażenia, wyznaczmy najpierw różnicową postać wyrażenia na koncentrację ładunku n(z,t) daną wzorem

$$n(z,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f^{\mathcal{W}}(z,k,t).$$
 (B.1.29)

Jego postać różnicowa

$$n(z_i, t_l) = n_{i,l} = \frac{\Delta_k}{2\pi} \sum_{j'=0}^{N_k} f_{i,j',l}^{\mathcal{W}}.$$
 (B.1.30)

A zatem postać różnicowa działania operatora ${\cal S}$ na funkcję Wignera wyraża się wzorem

$$\mathcal{S}[f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}] = -\frac{1}{\tau} \left(f_{i,j,l} - \frac{f_{0,i,j}^{\mathcal{W}}}{n_{0,i}} n_{i,l} \right).$$
(B.1.31)

Dyskretyzacja wyrazu z operatorem \mathcal{T}

Zapiszmy równanie Wignera w postaci

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{\mathcal{W}}(z,k,t) = (-\mathcal{D} - \mathcal{P} - \mathcal{S})f^{\mathcal{W}}(z,k,t).$$
(B.1.32)

Symulacje metodą Wignera-Poissona w funkcji czasu przeprowadzane są przy użyciu wstecznego algorytmu Eulera pierwszego rzędu. Otrzymujemy

$$\frac{f_{i,j,l+1}^{\mathcal{W}} - f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}}{\Delta t} = (-\mathcal{D} - \mathcal{P} - \mathcal{S})f_{i,j,l+1}^{\mathcal{W}}.$$
(B.1.33)

Stąd równanie na funkcję Wignera w (l+1)-szym kroku czasowym przyjmuje postać

$$[1 + \Delta t \left(\mathcal{D} + \mathcal{P} + \mathcal{S}\right)] f_{i,j,l+1}^{\mathcal{W}} = f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}.$$
(B.1.34)

Dyskretyzacja wyrażenia na gęstość prądu

Poniżej wyprowadzona zostanie postać różnicowa wyrażenia na gęstości prądu, dana wzorem analitycznym

$$j(z,t) = \frac{e}{2\pi} \int \frac{\hbar k}{m} f^{\mathcal{W}}(z,k,t) dk.$$
 (B.1.35)

W wyprowadzeniu dyskretnej formy wyrażenia na gęstość prądu skorzystamy z argumentacji przeprowadzonej przez Frensley'a [88], która mówi, że w przypadku numerycznego obliczania wielkości wektorowych znacznie dokładniejsze jest określenie owej wielkości pomiędzy punktami dyskretnej siatki numerycznej. W związku z tym wyprowadźmy wyrażenie na $j(z_i + \frac{1}{2}\Delta_z, t_l) = j_{i+\frac{1}{2},l}$. W tym celu skorzystamy z równania ciągłości

$$\frac{\partial}{\partial z}j(z,t) = -q\frac{\partial}{\partial t}n(z,t), \qquad (B.1.36)$$

gdzie q to ładunek cząstki.

Dykretyzujac powyższe równanie otrzymujemy

$$\frac{j_{i+\frac{1}{2},l} - j_{i-\frac{1}{2},l}}{\Delta_z} = -q\frac{\partial}{\partial t_l}n_{i,l} = \frac{-q\Delta_k}{2\pi}\sum_{j=0}^{N_k}\frac{\partial}{\partial t_l}f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}.$$
(B.1.37)

Korzystając z równania Wignera oraz antysymetryczności potencjału nielokalnego, powyższe równanie możemy zapisać w postaci

$$\frac{j_{i+\frac{1}{2},l} - j_{i-\frac{1}{2},l}}{\Delta z} = \frac{\Delta j}{\Delta z} = \frac{-q\Delta_k}{2\pi} \sum_{j=0}^{N_k} \mathcal{D}[f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}].$$
 (B.1.38)

Dla dwupunktowego ilorazu różnicowego mamy

$$\Delta j = \frac{-q\hbar\Delta_k}{2\pi m} \sum_{j=0}^{N_k} k_j \begin{cases} f_{i+1,j,l}^{\mathcal{W}} - f_{i,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j < 0, \\ f_{i,j,l}^{\mathcal{W}} - f_{i-1,j,l}^{\mathcal{W}}, & k_j > 0. \end{cases}$$
(B.1.39)

Zauważmy, że lewa strona równania (B.1.39) odpowiada różnicy gęstości prądu liczonej w dwóch punktach dyskretnej siatki odległych o Δ_z . A zatem sumę występującą w wyrażeniu (B.1.39) można rozbić na dwie odrębne sumy otrzymując

$$j_{i+\frac{1}{2},l} = \frac{-q\hbar\Delta_k}{2\pi m} \left(\sum_{j=0}^{N_k/2} k_j f_{i+1,j,l}^{\mathcal{W}} + \sum_{j=N_k/2+1}^{N_k} k_j f_{i,j,l}^{\mathcal{W}} \right),$$
(B.1.40)

$$j_{i-\frac{1}{2},l} = \frac{-q\hbar\Delta_k}{2\pi m} \left(\sum_{j=0}^{N_k/2} k_j f_{i,j,l}^{\mathcal{W}} + \sum_{j=N_k/2+1}^{N_k} k_j f_{i-1,j,l}^{\mathcal{W}}\right).$$
(B.1.41)

Podobne rozumowanie można przeprowadzić dla trójpunktowego ilorazu różnicowego. Wtedy otrzymujemy

$$j_{i+\frac{1}{2},l} = \frac{-q\hbar\Delta_k}{4\pi m} \left(\sum_{j=0}^{N_k/2} k_j (-f_{i+2,j,l}^{\mathcal{W}} + 3f_{i+1,j,l}^{\mathcal{W}}) + \sum_{j=N_k/2+1}^{N_k} k_j (3f_{i,j,l}^{\mathcal{W}} - f_{i-1,j,l}^{\mathcal{W}}) \right) (B.1.42)$$

B.2 Dyskretyzacja równania Poissona

Równanie Poissona na energię potencjalną $U^C(z)$, przy czym $U^C(z) = -e\varphi(z)$, gdzie $\varphi(z)$ to potencjał pola elektrostatycznego

$$\frac{d^2}{dz^2}U^C(z;t) = \frac{e^2}{\epsilon_0\epsilon} \left(N_D(z) - n(z,t)\right)$$
(B.2.1)

będziemy rozwiązywać numerycznie na dyskretnej siatce położeni
azzdefiniowanej dla równania Wignera. A zatem

$$z_i = i\Delta_z, \qquad i = 1, 2, ..., N_z.$$
 (B.2.2)

Na tak zdefiniowanej siatce, postać różnicowa równania Poissona wyraża się wzorem

$$U_{i+1;l}^C - 2U_{i;l}^C + U_{i-1;l}^C = \frac{e^2 \Delta_z^2}{\epsilon_0 \epsilon_i} [N_{D,i} - n_{i,l}].$$
(B.2.3)

W celu rozwiązania równania Poissona zakładamy warunki brzegowe Dirichleta w postaci

$$U^{C}(x=0;t_{l}) = U^{C}_{0;l} = 0,$$
 (B.2.4)

$$U^{C}(x = L; t_{l}) = U^{C}_{N_{z}; l} = -eV_{b},$$
 (B.2.5)

gdzie V_b jest napięciem zewnętrznym przyłożonym pomiędzy elektrodą emitera i kolektora, zaś L to długość nanourządzenia.

Dodatek C Metoda stabilizacji

Metoda stabilizacji [102] to jedna z metod obliczania energii E_0 oraz rozmycia energetycznego Γ stanów rezonansowych (kwazi-związanych) w oparciu o zadany profil energii potencjalnej (przypomnijmy, że energia stanu rezonansowego wyraża sie wzorem $E_{res} = E_0 - i\Gamma/2$). Metoda ta polega na numerycznym rozwiązywaniu niezależnego od czasu równania Schrödingera dla różnych długości pudła obliczeniowego. W wyniku przeprowadzonych obliczeń otrzymujemy tzn. diagram stabilizacji wartości własnych. Przykładowy diagram stabilizacji wyznaczony dla profilu energii potencjalnej w diodzie rezonansowo-tunelowej, w którym tworzy się jeden poziom rezonansowy, przedstawiony został na Rys. C.1. Płaskie obszary wykresów $E_j(L)$ odpowiadają



Rysunek C.1: Diagram stabilizacji wartości własnych wyznaczony dla profilu energii potencjalnej U(z) w diodzie rezonansowo-tunelowej (linia czarna). Na wykresie czerwonymi punktami zaznaczone zostały punkty przecięcia krzywych $E_i(L)$ z krzywą stałej energii E.

energii stanu rezonansowego, którego funkcja falowa zlokalizowana jest w pewnym obszarze Q rozpatrywanego profilu energii potencjalnej i nie zależy od długości pudła obliczeniowego. W

pozostałych przypadkach energie E_j związane są ze stanami pudła obliczeniowego i ulegają zmianie w funkcji długości pudła L.

Gęstość stanów rezonansowych

Wyznaczanie energii E_0 oraz rozmycia energetycznego Γ stanów rezonansowych z diagramu stabilizacji oparte jest na pojęciu gęstości stanów rezonansowych $\rho_L^Q(E)$. Gęstość stanów dla określonej długości pudła obliczeniowego L możemy wyrazić wzorem

$$\rho_L(E) = \rho_L^Q(E) + \rho_L^P(E),$$
 (C.0.1)

gdzie $\rho_L^Q(E)$ to gęstość stanów rezonansowych, zaś $\rho_L^P(E)$ to gęstość stanów pochodząca od pudła obliczeniowego o długości L.

Gęstość stanów rezonansowych nie zależy od długości pudła obliczeniowego Li wyraża się przybliżonym wzorem [99]

$$\rho^Q(E) \simeq \pi^{-1} \frac{\Gamma/2}{(E_0 - E)^2 + \Gamma^2/4}.$$
(C.0.2)

W oparciu o wyrażenie (C.0.2) możemy wyznaczyć energie E_0 oraz rozmycia energetyczne Γ stanów rezonansowych w układzie.

Z drugiej strony gęstość stanów $\rho_L(E)$ dana jest wyrażeniem

$$\rho_L(E) = \sum_j \delta\left(E_j(L) - E\right), \qquad (C.0.3)$$

gdzie $E_j(L)$ to kolejne poziomy energetyczne otrzymane w wyniku rozwiązania równania Schrödingera. Wyrażenie (C.0.3) jest użyteczne do wyznaczenia poszukiwanych wielkości E_0 oraz Γ tylko wtedy, gdy długość pudła obliczeniowego L jest na tyle duża, aby obliczony diagram stabilizacji wartości własnych dawał gładką funkcję $\rho_L(E)$. A zatem z punktu widzenia obliczeń numerycznych bezpośrednie korzystanie z wyrażenia (C.0.3) jest w wielu przypadkach niewykonalne. Aby ominąć opisywaną trudność skorzystamy z faktu, że gęstość stanów rezonansowych $\rho_L^Q(E)$ nie zależy od długości pudła obliczeniowego L i uśrednijmy prawą stronę wyrażenia (C.0.3) po długości pudła L

$$\bar{\rho}_L(E) = \frac{1}{L} \int_{L-\Delta L/2}^{L+\Delta L/2} dL' \rho_{L'}(E).$$
(C.0.4)

Korzystając z wyrażenia

$$\int dx \,\delta(f - f(x)) = \left|\frac{df}{dx}\right|_{f=f(x)}^{-1},\tag{C.0.5}$$

otrzymujemy

$$\bar{\rho}_L(E) = \frac{1}{\Delta L} \sum_j \left| \frac{dE_j(L')}{dL'} \right|_{E_j(L')=E}^{-1},$$
(C.0.6)

gdzie j indeksuje wartość pochodnej funkcji $E_j(L)$ względem L wyznaczoną w punkcie przecięcia krzywej $E_j(L)$ z linią poziomą o wartości E (patrz Rys. C.1).

Aby zminimalizować błąd związany z wyznaczeniem E_0 oraz Γ przedział ΔL musi być na tyle duży, aby dla każdej wartości L' zawierał odpowiednio dużą liczbę stanów $E_j(L')$. Ponadto zauważmy, że funkcja $\bar{\rho}_L(E)$ jest funkcją ciągłą energii E. Ponieważ wartość średnia gęstość stanów rezonansowych $\bar{\rho}_L^Q(E)$ nie zależy od długości pudła obliczeniowego ($\bar{\rho}_L^Q(E) = \rho^Q(E)$) oraz jest znacznie większa od średniej gęstości stanów pochodzących od pudła obliczeniowego $\bar{\rho}_L^P(E)$, gęstość stanów rezonansowych $\rho^Q(E)$ możemy zapisać w postaci

$$\rho(E) = \rho^Q(E) = \bar{\rho}_L^Q(E) = \bar{\rho}_L(E).$$
(C.0.7)

Następnie korzystając z wyrażenia (C.0.2) wyznaczamy wartość energii E_0 oraz rozmycie energetyczne Γ stanów rezonansowych w układzie. Na Rys. C.2 przedstawiony został wykres średniej gęstości stanów rezonansowych w funkcji energii.



Rysunek C.2: Średnia gęstość stanów rezonansowych ρ w funkcji energi
iE. Wykres $\rho(E)$ pozwala na wyznaczenie wartość energi
i E_0 oraz rozmycia energetycznego Γ stanu rezonansowego.

Zauważmy, że wysokość piku związanego z danym stanem rezonansowym o energii E_0 zależy od jego rozmycia energetycznego Γ i jest tym większa, im mniejsze jest jego rozmycie. Opisywana zależność prowadzi do trudności w określeniu energii stanów rezonansowych w przypadku, gdy mamy do czynienia ze stanami, w których jeden charakteryzuje się dużo mniejszym rozmyciem energetycznym Γ niż drugi. W takiej sytuacji pik pochodzący od stanu rezonansowego o małym rozmyciu energetycznym jest na tyle duży, że pik pochodzący od stanu rezonansowego o większym rozmyciu jest praktycznie niezauważalny.

Bibliografia

- H. Ohno, N. Akiba, F. Matsukura, A. Shen, K. Ohtani, and Y. Ohno Appl. Phys. Lett., vol. 73, p. 363, 1998.
- [2] H. Ohno J. Cryst. Growth, vol. 251, p. 285, 2003.
- [3] H. Ohno *Science*, vol. 281, p. 951, 1998.
- [4] T. Hayashi, Y. Hashimoto, S. Katsumoto, and Y. Iye Appl. Phys. Lett., vol. 78, p. 1691, 2001.
- [5] K. W. Edmonds, K. Y. Wang, R. P. Campion, A. C. Neumann, N. R. S. Farley, B. L. Gallagher, and C. T. Foxon Appl. Phys. Lett., vol. 81, p. 4991, 2002.
- [6] K. M. Yu, W. Walukiewicz, T. Wojtowicz, I. Kuryliszyn, X. Liu, Y. Sasaki, and J. K. Furdyna Phys. Rev. B, vol. 65, p. 201303, 2002.
- [7] D. Chiba, K. Takamura, F. Matsukura, and H. Ohno Appl. Phys. Lett., vol. 82, p. 3020, 2003.
- [8] K. C. Ku, S. J. Potashnik, R. F. Wang, S. H. Chun, P. Schiffer, N. Samarth, S. M. J, A. Mascarenhas, E. Johnston-Halperin, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom *Appl. Phys. Lett.*, vol. 82, p. 2302, 2003.
- [9] K. F. Eid, B. L. Sheu, O. Maksimov, M. B. Stone, P. Schiffer, and N. Samarth Appl. Phys. Lett., vol. 86, p. 152505, 2005.
- [10] T. Jungwirth, K. Y. Wang, J. Masek, K. W. Edmonds, J. König, J. Sinova, M. Polini, N. A. Goncharuk, A. H. MacDonald, M. Sawicki, A. W. Rushforth, R. P. Campion, L. X. Zhao, C. T. Foxon, and B. L. Gallagher *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 165204, 2005.
- [11] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu Appl. Phys. Lett., vol. 24, p. 593, 1974.
- [12] R. Tsu and L. Esaki Appl. Phys. Lett., vol. 22, p. 562, 1973.
- [13] C. Ertler and J. Fabian Appl. Phys. Lett., vol. 89, p. 193507, 2006.
- [14] C. Ertler and J. Fabian Phys. Rev. Lett., vol. 101, p. 077202, 2008.

- [15] N. Orihashi, S. Suzuki, and M. Asada Appl. Phys. Lett., vol. 87, p. 233501, 2005.
- [16] A. Suzuki, A. Teranishi, M. Hinata, K nad Asada, H. Sugiyama, and H. Yokoyama Appl. Phys. Express, vol. 2, p. 054501, 2009.
- [17] M. T. Björk, B. J. Ohlsson, C. Thelander, A. I. Persson, K. Deppert, L. R. Wallenberg, and L. Samuelson Appl. Phys. Lett., vol. 81, p. 4458, 2002.
- [18] V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. E. Cunningham Phys. Rev. Lett., vol. 58, p. 1256, 1987.
- [19] T. C. L. G. Sollner *Phys. Rev. Lett.*, vol. 59, p. 1622, 1987.
- [20] A. Zaslavsky, V. J. Goldman, and D. C. Tsui Appl. Phys. Lett., vol. 53, p. 1408, 1988.
- [21] T. J. Foster, M. L. Leadbeater, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, C. A. Payling, F. W. Sheard, P. E. Simmonds, G. A. Toombs, G. Hill, and M. A. Pate *Phys. Rev. B*, vol. 39, p. 6205, 1989.
- [22] H. C. Liu Appl. Phys. Lett., vol. 53, p. 485, 1988.
- [23] V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. E. Cunningham Phys. Rev. B, vol. 36, p. 7635, 1987.
- [24] J. G. Chen, C. H. Yang, and R. A. Wilson J. Appl. Phys., vol. 69, p. 4132, 1991.
- [25] F. W. Sheard and G. A. Toombs Appl. Phys. Lett., vol. 52, p. 1228, 1988.
- [26] J. O. Sofo and C. A. Balseiro Phys. Rev. B, vol. 42, p. 7292, 1990.
- [27] Z. Dai and J. Ni Phys. Rev. B, vol. 73, p. 113309, 2006.
- [28] R. K. Hayden, L. Eaves, M. Henini, D. K. Maude, and J. C. Portal *Phys. Rev. B*, vol. 49, p. 10745, 1994.
- [29] T. C. L. G. Sollner, E. R. Brown, W. D. Goodhue, and H. Q. Le Appl. Phys. Lett., vol. 50, p. 332, 1987.
- [30] T. J. Shewchuk, J. M. Gering, P. C. Chapin, P. D. Coleman, W. Kopp, C. K. Peng, and H. Morkoc Appl. Phys. Lett., vol. 47, p. 986, 1985.
- [31] E. Schombury *Electron. Lett.*, vol. 35, p. 1419, 1999.
- [32] K. Kofbeck IEEE Microwave Guid. Wave Lett., vol. 8, p. 427, 1990.
- [33] N. Kishimoto, S. Suzuki, A. Teranishi, and M. Asada Appl. Phys. Express, vol. 1, p. 042003, 2008.
- [34] B. Rico and M. Y. Azbel *Phys. Rev. B*, vol. 29, p. 1970, 1994.
- [35] K. L. Jensen and F. A. Buot *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, p. 1078, 1991.
- [36] C. Presilla, G. Jona-Lasinio, and F. Capasso Phys. Rev. B, vol. 43, p. 5200, 1991.
- [37] D. Woolard, P. Zhao, and H. L. Cui *Physica B*, vol. 314, p. 108, 2002.
- [38] F. A. Buot and A. K. Rajagopal *Phys. Rev. B*, vol. 23, p. 17217, 1993.
- [39] P. Zhao, H. L. Cui, and D. L. Woolard *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 48, p. 614, 2001.
- [40] P. Zhao, D. L. Woolard, H. L. Cui, and N. J. M. Horing *Physics Letters A*, vol. 311, p. 432, 2003.
- [41] P. Zhao, D. L. Woolard, and H. L. Cui Phys. Rev. B, vol. 67, p. 085312, 2003.
- [42] P. Zhao, H. L. Cui, D. L. Woolard, K. L. Jensen, and F. A. Buot J. Appl. Phys., vol. 87, p. 1337, 2000.
- [43] P. Zhao, H. L. Cui, and D. L. Woolard Phys. Rev. B, vol. 63, p. 075302, 2001.
- [44] J. A. Gaj, J. Ginter, and R. R. Gałazka *Phys. Status Solidi*, vol. 89, p. 655, 1978.
- [45] M. Jaczyński, J. Kossut, and R. R. Gałazka Phys. Status Solidi, vol. 88, p. 73, 1978.
- [46] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. von Molnár, and L. L. Chang Phys. Rev. Lett., vol. 68, p. 2664, 1992.
- [47] K. Ando Appl. Phys. Lett., vol. 82, p. 100, 2003.
- [48] C. Liu, F. Yun, and H. Morkor J. Mater. Sci.: Mater. Electron., vol. 16, p. 555, 2005.
- [49] T. Jungwirth, J. Sinova, J. Masek, J. Kucera, and A. H. MacDonald Rev. Mod. Phys., vol. 78, p. 809, 2006.
- [50] T. Dietl, H. Ohno, and F. Matsukura *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 195205, 2001.
- [51] F. Matsukura, H. Ohno, and Y. Suguwara *Phys. Rev. B*, vol. 57, p. R2037, 1998.
- [52] H. Akai Phys. Rev. Lett., vol. 81, p. 3002, 1998.
- [53] T. Jungwirth, M. Abolfath, J. Sinova, J. Kucera, and A. H. MacDonald Appl. Phys. Lett., vol. 81, p. 4029, 2002.
- [54] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand Science, vol. 287, p. 1019, 2000.
- [55] J. C. Egues *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, p. 4578, 1998.

- [56] J. K. Furdyna J. Appl. Phys., vol. 64, pp. R29–R64, 1988.
- [57] W. Y. Yu, A. Twardowski, L. P. Fu, A. Petrou, and B. T. Jonker *Phys. Rev. B*, vol. 51, p. 9722, 1995.
- [58] Y. Guo, B. L. Gu, H. Wang, and Y. Kawazoe *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 214415, 2001.
- [59] N. N. Beletskii, G. P. Berman, and S. A. Borysenko Phys. Rev. B, vol. 71, p. 125325, 2005.
- [60] A. Slobodskyy, C. Gould, T. Slobodskyy, C. R. Becker, G. Schmidt, and L. W. Molenkamp Phys. Rev. Lett., vol. 90, p. 246601, 2003.
- [61] P. Havu, N. Tuomisto, R. Väänänen, M. J. Puska, and R. M. Nieminen Phys. Rev. B, vol. 71, p. 235301, 2005.
- [62] M. Rüth, C. Gould, and L. W. Molenkamp Phys. Rev. B, vol. 83, p. 155408, 2011.
- [63] C. Gould, A. Slobodskyy, D. Supp, T. Slobodskyy, P. Grabs, P. Hawrylak, F. Qu, G. Schmidt, and L. W. Molenkamp *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, p. 017202, 2006.
- [64] C. Sanchez, C. Gould, G. Schmidt, and L. W. Molankamp IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 54, p. 984, 2007.
- [65] A. Saffarzadeh and R. Daqiq J. Appl. Phys., vol. 106, p. 084308, 2009.
- [66] P. Sankowski, P. Kacman, J. A. Majewski, and T. Dietl Phys. Rev. B, vol. 75, p. 045306, 2007.
- [67] P. Sankowski, P. Kacman, and J. A. Majewski Phys. Rev. B, vol. 103, p. 103709, 2008.
- [68] P. Van Drope, W. Van Roy, J. De Boeck, G. Borghs, P. Sankowski, P. Kacman, J. A. Majewski, and T. Dietl Phys. Rev. B, vol. 72, p. 205322, 2005.
- [69] M. Tanaka and Y. Higo Phys. Rev. Lett., vol. 82, p. 026602, 2001.
- [70] S. Ohya, P. N. Hai, and M. Tanaka Appl. Phys. Lett., vol. 71, p. 245306, 2005.
- [71] R. Mattana, M. Elsen, J. M. George, F. N. van Dau, A. Fert, and J. Olivier Phys. Rev. B, vol. 71, p. 75206, 2005.
- [72] T. Sasaki, S. Sonda, Y. Yamamoto, K. Suga, S. Shimizu, K. Kindo, and H. Hori J. Appl. Phys., vol. 91, p. 7484, 2002.
- [73] M. K. Li, N. M. Kim, S. J. Lee, H. C. Jeon, and T. W. Kang Appl. Phys. Lett., vol. 88, p. 162102, 2006.
- [74] Y. Liu, J. Wang, H. Xing, N. Tang, B. Lv, H. Mao, Q. Zhao, Y. Zhang, and Z. Zhu Solid State Communications, vol. 149, p. 156, 2009.

- [75] Z. J. Qui, S. L. Zhang, and R. Liu Appl. Phys. Lett., vol. 92, p. 242110, 2008.
- [76] J. Wang, Y. L. Liu, H. Mao, Q. Zhao, J. Yu, Y. Zhang, Z. Zhu, and J. Chu Appl. Phys. Lett., vol. 94, p. 172501, 2009.
- [77] A. Satandi, P. P. Ruden, and K. F. Brennan Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 14, pp. 3435–3443, 2002.
- [78] C. Ertler and J. Fabian Appl. Phys. Lett., vol. 89, p. 193507, 2006.
- [79] C. Ertler and J. Fabian *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 195323, 2007.
- [80] M. K. Li, N. M. Kim, and T. W. Kang Appl. Phys. Lett., vol. 91, p. 103103, 2007.
- [81] M. K. Li, N. M. Kim, S. J. Lee, J. W. Kim, and T. W. Kang Phys. Rev. B, vol. 75, p. 212106, 2007.
- [82] M. K. Li, T. W. Kang, and N. M. Kim Appl. Phys. Lett., vol. 94, p. 123505, 2009.
- [83] E. Wigner *Phys. Rev. B*, vol. 40, p. 749, 1932.
- [84] H. Weyl Zeitschrift für Physik, vol. 46, p. 1, 1927.
- [85] H. Ibach and H. Lüth, Fizyka Ciała Stałego. Wydawnictwo Naukowe PWN, 1996.
- [86] W. R. Frensley *Phys. Rev. Lett.*, vol. 57, p. 2853, 1986.
- [87] W. R. Frensley *Phys. Rev. B*, vol. 36, p. 1570, 1987.
- [88] W. R. Frensley Rev. Mod. Phys., vol. 62, p. 745, 1990.
- [89] N. C. Klukshdahl, A. M. Kriman, D. K. Ferry, and C. Ringhofer *Phys. Rev. B*, vol. 39, p. 7720, 1989.
- [90] B. A. Biegel and J. D. Plummer *Phys. Rev. B*, vol. 54, p. 8070, 1996.
- [91] K. L. Jensen and F. A. Buot IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 38, p. 2337, 1991.
- [92] K. L. Jensen and F. A. Buot J. Appl. Phys., vol. 67, p. 7602, 1990.
- [93] K. L. Jensen and A. K. Ganguly J. Appl. Phys., vol. 73, p. 4409, 1993.
- [94] H. Tsuchiya, M. Ogawa, and T. Miyoshi *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 38, p. 1246, 1991.
- [95] K. Y. Kim and B. Lee Solid-State Electronics, vol. 43, p. 81, 1999.

- [96] H. Lange, B. Toomire, and P. F. Zweifel Reports on mathematical physics, vol. 33, p. 317, 1993.
- [97] H. Lange, B. Toomire, and P. F. Zweifel Reports on mathematical physics, vol. 36, p. 331, 1995.
- [98] L. D. Landau and J. M. Lifszyc, *Teoria Pola*. Wydawnictwo Naukowe PWN, 2009.
- [99] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and J. P. Bird, *Transport in nanostructures*. Cambridge University Press, 2009.
- [100] W. B. Joyce and R. W. Dixon Appl. Phys. Lett., vol. 31, p. 354, 1977.
- [101] M. Bylicki, W. Jaskolski, and O. R J. Phys.: Condens. Matter, vol. 8, p. 6393, 1996.
- [102] V. A. Mandelshtam, T. R. Ravuri, and H. S. Taylor Phys. Rev. Lett., vol. 13, p. 1932, 1993.
- [103] L. D. Macks, S. A. Brown, R. G. Clark, and R. P. Starrett Phys. Rev. B, vol. 54, p. 4857, 1996.
- [104] P. D. Buckle, P. Dawson, C. Y. Kuo, A. H. Roberts, W. S. Truscott, M. Lynch, and M. Missous J. Appl. Phys., vol. 83, p. 882, 1998.
- [105] P. Wójcik, M. Wołoszyn, B. J. Spisak, and J. Adamowski Acta Physica Polonica A, vol. 114, p. 1431, 2008.
- [106] P. Wójcik, B. J. Spisak, M. Wołoszyn, and J. Adamowski Semicond. Sci. Technol., vol. 24, p. 095012, 2009.
- [107] P. Wójcik, B. J. Spisak, M. Wołoszyn, and J. Adamowski Semicond. Sci. Technol., vol. 25, p. 125012, 2010.
- [108] K. H. J. Buschow and F. R. de Boer, Physics of Magnetism and Magnetic Materials. Kluwer Academic Publisher, 2003.
- [109] B. J. Spisak, A. Paja, and G. J. Morgan phys. stat. sol. (b), vol. 242, p. 1460, 2005.
- [110] B. J. Spisak, M. Wołoszyn, P. Wójcik, and G. J. Morgan J. Phys.: Conf. Ser., vol. 193, p. 012130, 2009.
- [111] J. P. Perdew and A. Zunger *Phys. Rev. B*, vol. 23, p. 5048, 1981.
- [112] P. Wójcik, B. J. Spisak, M. Wołoszyn, and J. Adamowski Acta Physica Polonica A, vol. 119, p. 648, 2011.
- [113] P. Wójcik, B. J. Spisak, M. Wołoszyn, and J. Adamowski arXiv:1103:0408, 2011.

- [114] A. Twardowski, M. von Ortenberg, M. Demianiuk, and R. Pauthenet Solid State Commun., vol. 51, p. 849, 1984.
- [115] C. Chauvet, E. Tournié, and J. P. Faurie Phys. Rev. B, vol. 61, p. 5332, 2000.
- [116] S. Ganguly, A. H. MacDonald, L. F. Register, and S. Benerjee Phys. Rev. B, vol. 73, p. 033310, 2006.
- [117] S. Ganguly, L. F. Register, S. Benerjee, and A. H. MacDonald Phys. Rev. B, vol. 71, p. 245306, 2005.