

**EFFETTI DINAMICI
NEL TUNNELING RISONANTE DI ELETTRONI
IN MICROSTRUTTURE SEMICONDUCTRICI**

DISSERTAZIONE
SOTTOMESSA PER IL CONSEGUIMENTO
DEL TITOLO DI
DOTTORE DI RICERCA IN FISICA

Carlo Presilla

Università degli Studi di Roma "La Sapienza"

Sommario

In questa tesi viene presentato lo studio della evoluzione temporale del tunneling risonante di elettroni attraverso microstrutture semiconduttrici. In particolare, si mostra che l'interazione elettronica è in grado di indurre un comportamento oscillante nel tempo delle correnti trasmesse e riflesse. Tali oscillazioni hanno un periodo variabile tra 10^{-14} e 10^{-12} secondi e la loro esistenza è suscettibile di verifica sperimentale. Il fenomeno è di rilevanza tecnologica per la progettazione di dispositivi elettronici molto più veloci di quelli realizzabili attualmente. Esso, inoltre, presenta un interesse concettuale in quanto costituisce un esempio di transiente quantistico con proprietà che non hanno riscontro classico.

Nel capitolo 1 si introduce criticamente la fisica del trasporto quantistico in eterostrutture semiconduttrici suggerendone una interpretazione rigorosa in termini di potenziali ed equazioni efficaci allo scopo di evidenziare alcune incongruenze, quali quella di una massa efficace variabile, che potrebbero sorgere da una schema di tipo fenomenologico. Nel capitolo 2 viene discussa una equazione di Schrödinger non lineare che descrive, nel limite di campo medio, il tunneling risonante di un sistema di elettroni mutuamente interagenti. Si illustra in dettaglio l'evoluzione temporale del processo e il conseguente comportamento oscillante della carica dinamicamente intrappolata negli stati risonanti. L'approfondimento del fenomeno delle oscillazioni in relazione ad una possibile indagine sperimentale e l'analisi di alcune situazioni fisiche di particolare interesse, quali i sistemi dotati di risonanze multiple e i sistemi magnetici, costituiscono, infine, l'argomento del capitolo 3.

Ringraziamenti

Tra coloro che mi hanno aiutato nel portare a termine il presente lavoro di tesi desidero ringraziare in primo luogo Federico Capasso e Giovanni Jona-Lasinio i quali sono stati i suggeritori dell'argomento di ricerca e ne hanno seguito criticamente i progressi. Il contatto con loro ha rappresentato per me una importante occasione di maturazione scientifica. La mia riconoscenza va anche a Fabio Marchesoni, Roberto Onofrio e Francesco Sacchetti per le critiche e i suggerimenti di cui sono stati prodighi. Infine, voglio ringraziare i colleghi della Scuola del Dottorato di Ricerca i quali, insieme al coordinatore Giovanni Jona-Lasinio, hanno contribuito a creare uno stimolante ambiente di lavoro.

Indice

Sommario	ii
Ringraziamenti	iii
Indice	iv
Elenco delle Figure	v
1. ARCHITETTURA QUANTISTICA	1
1.1 Potenziale efficace di una eterogiunzione	2
1.2 Il problema della massa efficace	9
1.3 Tunneling risonante	12
2. DINAMICA DEL TUNNELING RISONANTE	17
2.1 Interazione in campo medio	17
2.2 Potenziale di interazione efficace	21
2.3 Evoluzione temporale	23
2.4 Interferenza e non linearità	28
3. OSCILLAZIONI NEI SISTEMI FISICI	40
3.1 Calcolo realistico	40
3.2 Risonanze Multiple	44
3.3 Sistemi magnetici	48
Appendice A. DOPPIA BARRIERA DI POTENZIALE	51
Appendice B. SIMULAZIONE NUMERICA	55
RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI	60

Elenco delle Figure

1	2
2	5
3	7
4	13
5	14
6	15
7	26
8	29
9	34
10	36
11	39
12	42
13	45
14	46
15	49

1. ARCHITETTURA QUANTISTICA

Dieci anni fa la fabbricazione e lo studio di dispositivi elettronici le cui dimensioni spaziali erano dell'ordine di 1 micron rappresentava la frontiera nel campo delle microstrutture. Oggi il termine *microstrutture* è, strettamente parlando, improprio: vengono realizzati dispositivi con dimensioni comprese tra 10 e 100 nanometri¹.

La capacità di miniaturizzare i dispositivi elettronici convenzionali, da una parte, ne ha ampliato la risposta in frequenza riducendo i tempi di transito delle cariche ma, d'altro canto, rappresenta un limite ultimo al loro funzionamento che è di tipo classico. Per dimensioni inferiori ai 100 nanometri gli effetti quantistici non possono più essere trascurati².

Il comportamento quantistico dei portatori di carica è alla base del funzionamento di una nuova classe di dispositivi elettronici costituiti da cristalli artificiali denominati *eterostrutture*. In questi il trasporto di carica avviene principalmente in direzione trasversa a strati alternati di semiconduttori differenti. La variazione nella composizione del cristallo si riflette in un potenziale efficace di trasporto approssimativamente rappresentato da barriere unidimensionali attraversate dalle cariche per effetto *tunnel*.

L'epitassia a fascio molecolare (MBE) e la deposizione a fase vapore mediante chimica metallo-organica (MOCVD) permettono di creare eterostrutture formate da strati dello spessore di poche costanti reticolari con una definizione quasi ideale delle interfacce³. La versatilità e l'efficacia della tecnologia a disposizione consentono, perciò, di parlare di una vera e propria *architettura quantistica* nelle cui intenzioni le eterostrutture costituiscono lo strumento per lo studio⁴ e l'utilizzazione⁵ di una vasta classe di fenomeni mesoscopici.

In questo capitolo viene criticamente discussa la questione del potenziale efficace da attribuire alle eterostrutture. In particolare se ne suggerisce una deduzione quantisticamente rigorosa a partire dai calcoli microscopici sottolineando, in contrapposizione, alcune difficoltà dello schema fenomenologico a cui viene fatto comunemente riferimento in letteratura.

1.1 POTENZIALE EFFICACE DI UNA ETEROGIUNZIONE

L'esempio più semplice di eterostruttura è costituito da una *eterogiunzione*, *i.e.* un cristallo composto da due differenti materiali, tipicamente semiconduttori, congiunti attraverso un piano reticolare. In una eterogiunzione ideale l'interfaccia tra i due materiali è netta. Questa schematizzazione, mostrata nella Fig. 1 non è troppo lontana dalla realtà. Le tecniche di crescita epitassiale, alle quali si è fatto riferimento, permettono, infatti, di ottenere interfacce quasi del tutto esenti da difetti atomici.

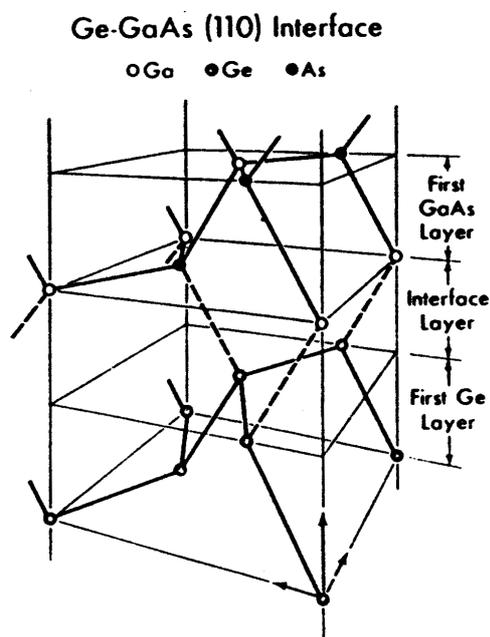


Figura 1. Posizioni atomiche della eterogiunzione ideale $Ge - GaAs$ avente per interfaccia il piano cristallografico (110). Le linee continue indicano i legami tra gli atomi dello stesso materiale, quelle tratteggiate i legami di interfaccia. La differenza tra le costanti reticolari del Ge e del $GaAs$ è stata ignorata.

La caratterizzazione microscopica di una interfaccia, anche ideale, costituisce un formidabile problema ed è attualmente un dibattuto tema di ricerca⁶.

Una notevole semplificazione è ottenuta nel caso in cui i reticoli dei due materiali costituenti la giunzione possono essere considerati identici. Per quanto riguarda le eterogiunzioni semiconduttrici, a cui si farà riferimento, questa proprietà è ben soddisfatta per molte coppie di materiali. Nella giunzione $Ge - GaAs$ della Fig. 1 si ha una differenza nella costante reticolare dell'ordine di 0.15%. Nella giunzione $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$, di grande rilevanza tecnologica, si scende a 0.03%. L'uguaglianza delle costanti reticolari minimizza la presenza di campi di forze dovute al riaggiustamento dei cristalli in prossimità della interfaccia. In assenza di tali campi di forze le posizioni degli ioni possono essere considerate identiche a quelle che essi occuperebbero in un monocristallo. Questa semplificazione rende accessibile la determinazione delle proprietà elettroniche della giunzione mediante un calcolo numerico *ab initio*⁷⁻¹³.

I risultati di un calcolo microscopico, tuttavia, hanno il significato di veri e propri dati sperimentali e la loro utilità nel capire i fenomeni relativi alle eterogiunzioni è spesso modesta. Questo ha stimolato un certo numero di tentativi di schematizzare le eterogiunzioni mediante modelli *efficaci* estremamente semplificati i quali, al tempo stesso, ne riproducano le proprietà fisiche fondamentali¹⁴.

Un simile modo di procedere è ben noto nella analisi del trasporto in un monocristallo semiconduttore. L'interazione degli elettroni con la struttura reticolare periodica genera stati di Bloch delocalizzati in tutto il cristallo. In conseguenza di ciò, la risposta di elettroni in banda di conduzione, o di buche in quella di valenza, alla azione di campi di forze esterne può essere assimilata a quella di particelle libere dotate di opportuna massa efficace¹⁵.

In una eterogiunzione la periodicità del potenziale reticolare è persa nella direzione ortogonale al piano della interfaccia. La natura degli autostati elettronici diventa più complicata rispetto al caso di un monocristallo. I risultati dei calcoli microscopici mostrano che, accanto ad autostati delocalizzati in tutta l'eterogiunzione, si possono formare autostati localizzati da una parte o dall'altra della interfaccia,

i.e. funzioni d'onda che in uno dei due semispazi individuati dalla superficie di giunzione sono sostanzialmente simili a stati di Bloch ma che nel semispazio opposto diventano onde evanescenti. Gli elettroni o le buche associati a questi stati possono muoversi nel semispazio in cui la funzione d'onda è delocalizzata ma penetrano solo quantisticamente in quello in cui la funzione d'onda è evanescente. Infine, sono possibili stati ancora più complicati localizzati in prossimità della sola interfaccia.

Una interpretazione rigorosa delle proprietà elettroniche di una eterogiunzione può essere cercata nell'ambito della approssimazione semiclassica proposta da Jona-Lasinio, Martinelli e Scoppola^{16,17} per lo studio del tunneling multiplo, *i.e.* la determinazione dello spettro quantistico di una particella che si muove in un potenziale dotato di molti minimi equivalenti. Tali autori hanno mostrato che gli stati di tunneling in potenziali complicati possono essere studiati con l'ausilio di potenziali efficaci più semplici. Per meglio comprendere questa affermazione e la connessione con il problema delle eterogiunzioni si consideri la Fig. 2 Nella parte a) viene mostrata una sequenza qualitativa di barriere di potenziale unidimensionali tratta dal Rif. 18. Le proprietà semiclassiche dello stato fondamentale e della parte bassa dello spettro di un potenziale di questo tipo possono essere ottenute equivalentemente a partire dal potenziale efficace mostrato nella parte b) della stessa figura¹⁸. Il gradino di potenziale di opportuna altezza riproduce lo stesso grado di penetrazione evanescente dello stato fondamentale e dei primi stati eccitati nella regione di barriere alte mostrate in a).

Un comportamento del tutto simile capita nel caso di una eterogiunzione. Nella parte c) della Fig. 2 è riportato il risultato di un calcolo *ab initio*⁹ del potenziale cristallino, mediato nel piano della interfaccia, della giunzione $Ge-GaAs$ (110) della Fig. 1. La somiglianza con il potenziale modello mostrato nella parte a) della stessa figura e quindi l'equivalenza con il problema del tunneling multiplo, sono evidenti.

La determinazione del potenziale efficace di una eterogiunzione è complicata da effetti dimensionali. È il potenziale efficace con cui si intende simulare il potenziale cristallino tridimensionale che deve risultare per motivi di simmetria unidimensionale. Partire da un potenziale cristallino già unidimensionale, come quello mostrato

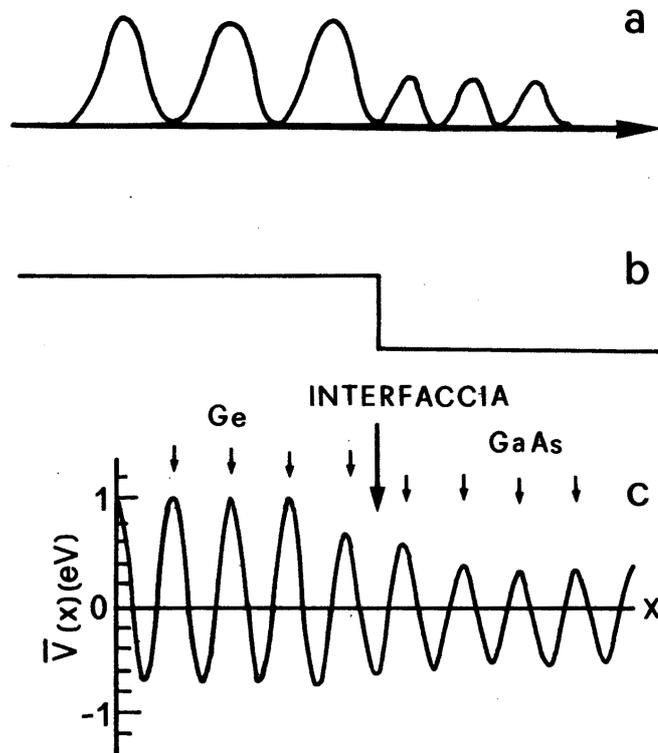


Figura 2. a) Esempio di potenziale unidimensionale in cui lo stato fondamentale risulta localizzato nel semiasse corrispondente a barriere basse. b) Potenziale efficace che riproduce la localizzazione dello stato fondamentale in a). c) Potenziale cristallino della giunzione *Ge – GaAs* (110) mediato nel piano della interfaccia.

nella parte c) della Fig. 2 porta, in generale, a risultati completamente diversi per quanto riguarda le proprietà di tunneling del sistema. Il metodo proposto da Jonalasinio, Martinelli e Scoppola risulta valido per potenziali di qualunque dimensionalità ma solo nel caso unidimensionale sono stati trovati efficienti algoritmi^{19,20} che permettono di ricavare potenziali efficaci rigorosi.

In mancanza di una deduzione rigorosa del potenziale efficace da attribuire alle eterogiunzioni si è finora ragionato sulla base di uno schema fenomenologico molto intuitivo^{21,22}. L'idea è quella di descrivere l'eterogiunzione raccordando opportunamente le proprietà di volume dei suoi costituenti. Come schematizzato nella Fig. 3

tra zone accessibili e non accessibili al trasporto classico si creano delle discontinuità interpretate come profilo di un potenziale efficace della eterogiunzione.

Per semplicità si considerino i semiconduttori 1 e 2 formanti la giunzione non drogati e alla temperatura di 0 K . Le loro proprietà di volume sono caratterizzate da un potenziale cristallino $V^{(1,2)}(\mathbf{r})$ ed una struttura a bande $E_n^{(1,2)}(\mathbf{k})$. A causa degli effetti di schermaggio il potenziale cristallino della eterogiunzione, $V_g(\mathbf{r})$, ad opportune distanze, l_1 ed l_2 , dalla interfaccia deve identificarsi, a meno di una traslazione in energia, con i potenziali di volume dei due semiconduttori:

$$V_g(\mathbf{r}) = \begin{cases} V^{(1)}(\mathbf{r}) + \Delta^{(1)} & x < -l_1 \\ V^{(2)}(\mathbf{r}) + \Delta^{(2)} & l_2 < x \end{cases} \quad (1)$$

avendo preso $x = 0$ come piano geometrico della interfaccia. Le traslazioni $\Delta^{(1,2)}$ usualmente sono dedotte dalla condizione di allineamento di opportuni livelli di riferimento. Il livello di vuoto è chiaramente un livello di riferimento appropriato per una interfaccia altamente inerte. Il limite opposto è rappresentato da una interfaccia metallo-metallo in cui è il livello di Fermi a servire da riferimento. Nel caso di un semiconduttore la determinazione di un buon livello di riferimento, o addirittura la validità di un tale concetto, costituisce motivo di dibattito¹⁴. Indipendentemente dal valore effettivamente posseduto è importante sottolineare che le traslazioni $\Delta^{(1,2)}$ determinano, come verrà mostrato nel seguito, il potenziale efficace da attribuire alla giunzione.

L'eterogiunzione non possiede una struttura a bande, almeno nel senso usualmente dedotto dal teorema di Bloch, in quanto il suo potenziale non ne soddisfa le condizioni. Il concetto di struttura a bande può, tuttavia, essere recuperato in senso locale in modo da connettere le proprietà di volume dei semiconduttori 1 e 2. Per la i -esima cella unitaria del reticolo della eterogiunzione si definisca la struttura a bande $E_n^{(1,2)}(\mathbf{k}, i)$ come quella ottenuta, in accordo con il teorema di Bloch, da un immaginario cristallo in cui tutte le celle siano identiche alla i -esima considerata. Poiché nel cristallo reale il potenziale $V_g(\mathbf{r})$ varia da cella a cella, ad eccezione delle zone di volume $x < -l_1$ e $x > l_2$, la struttura a bande così definita si trasforma da

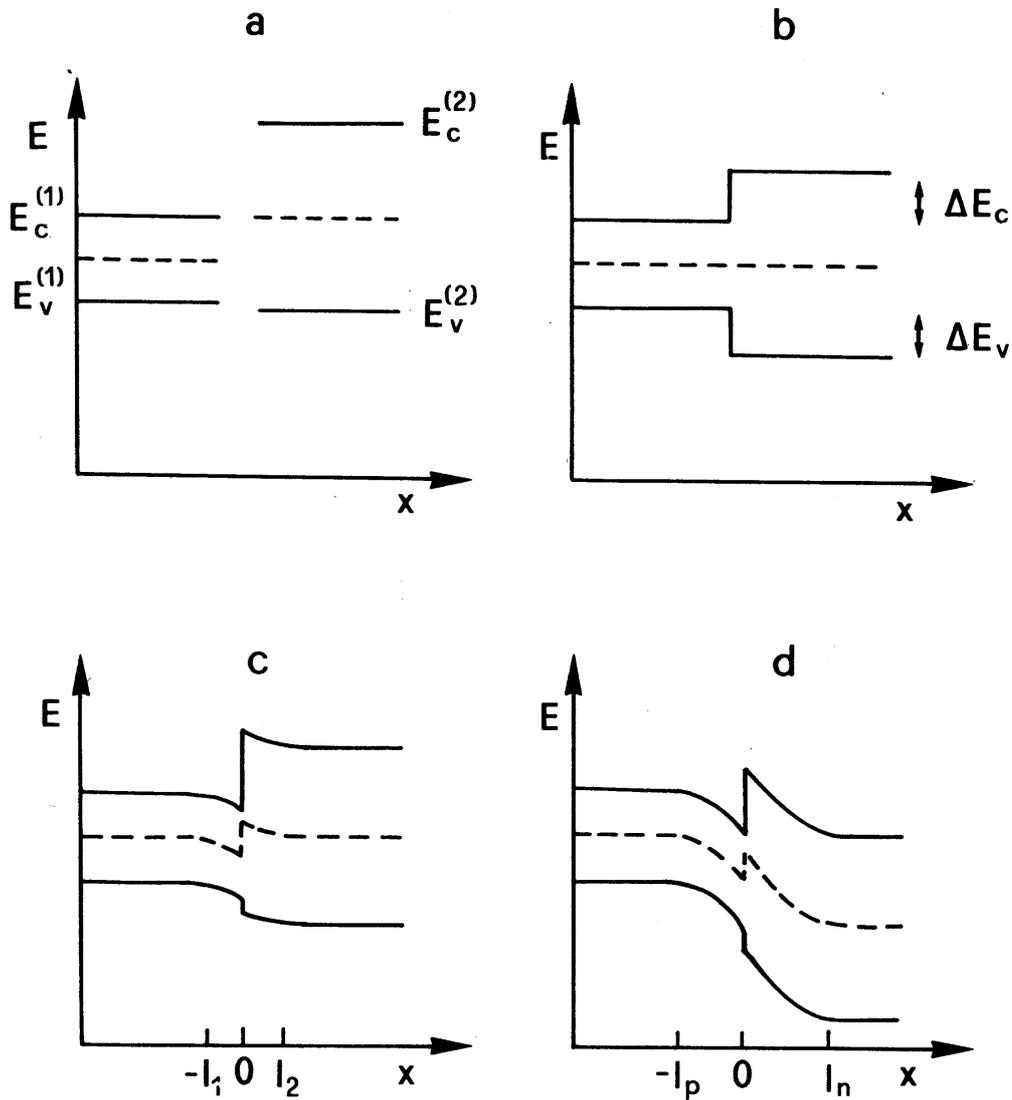


Figura 3. Diagramma a bande di una eterogiunzione. a) I semiconduttori 1 e 2 costituenti la giunzione sono separati. I livelli minimo della banda di conduzione $E_C^{(1,2)}$ e massimo di quella di valenza $E_V^{(1,2)}$ schematizzano le loro proprietà elettroniche di volume. b) I semiconduttori sono congiunti utilizzando, ad esempio, come livello di riferimento il centro della gap che rappresenta l'energia di Fermi dei due materiali intrinseci. Nel profilo delle bande si formano delle discontinuità ΔE_C e ΔE_V . c) Il profilo delle bande è alterato dalla presenza di uno strato dipolare dovuto agli stati elettronici di interfaccia. d) Il drogaggio dei semiconduttori permette di ottenere distorsioni di notevole entità. Nel caso mostrato il materiale a sinistra è di tipo p quello a destra di tipo n .

quella di volume di un semiconduttore a quella di volume dell'altro quando la cella i -esima viene mossa lungo l'asse x :

$$E_n(\mathbf{k}, i) = \begin{cases} E_n^{(1)}(\mathbf{k}) + \Delta^{(1)} & x_i < -l_1 \\ E_n^{(2)}(\mathbf{k}) + \Delta^{(2)} & l_2 < x_i \end{cases} \quad (2)$$

dove x_i indica, ad esempio, la coordinata del centro della i -esima cella nella direzione x . Nella zona $-l_1 < x_i < l_2$, le cui dimensioni non sono superiori a qualche costante reticolare⁹, la struttura a bande locale della eterogiunzione può discostarsi notevolmente da quella di volume di entrambi i semiconduttori 1 e 2 a causa della formazione di stati elettronici di interfaccia.

In una analisi dei fenomeni di trasporto è possibile ignorare, in prima approssimazione, il dettaglio microscopico rappresentato dall'intervallo $[-l_1, l_2]$ e trattare l'eterogiunzione come caratterizzata da un brusco passaggio tra le strutture a bande di volume $E_n^{(1)}(\mathbf{k})$ ed $E_n^{(2)}(\mathbf{k})$. I disallineamenti che si formano tra i profili delle bande di conduzione, ΔE_C , e di valenza, ΔE_V , dipendono dalla natura del livello di riferimento, ovvero, prescindendo da questo, dalla entità delle traslazioni $\Delta^{(1,2)}$. Nell'esempio b) della Fig. 3 l'utilizzazione del centro della gap come livello di riferimento causa necessariamente $\Delta E_C = \Delta E_V$. Tale condizione, tuttavia, non è generale. Nella maggior parte dei materiali i disallineamenti tra le bande di conduzione e di valenza risultano tra loro differenti⁶. Gli elettroni in banda di conduzione e le buche in banda di valenza vedono la giunzione come un gradino di potenziale di valore ΔE_C e ΔE_V , rispettivamente. Questo è il potenziale efficace che può essere attribuito alla giunzione.

A volte gli stati elettronici localizzati in prossimità della interfaccia non possono essere del tutto trascurati. L'eventuale carica netta, positiva o negativa, che si stabilisce alla giunzione produce un campo elettrico che distorce nell'intervallo $[-l_1, l_2]$ la struttura a bande locale²¹. In questo caso il potenziale efficace della giunzione assume un aspetto più complicato di un semplice gradino. Se all'interfaccia, ad esempio, si crea uno strato dipolare, il profilo delle bande diventa qualitativamente come mostrato nella parte c) della Fig. 3.

Distorsioni del potenziale efficace dal modello a gradino possono essere volontariamente ottenute mediante drogaggio di uno o entrambi i semiconduttori costituenti la giunzione. Nella parte d) della Fig. 3 viene mostrato cosa può succedere ai profili delle bande nel caso in cui il semiconduttore 1, a sinistra della giunzione, sia drogato di tipo p mentre l'altro, a destra, sia di tipo n . Il trasferimento di elettroni tra i due materiali crea una regione di carica spaziale, indicata dall'intervallo $[-l_p, l_n]$, la cui estensione dipende dalla entità del drogaggio. Essa è comunque dell'ordine di qualche decina di costanti reticolari, *i.e.* è tutt'altro che trascurabile su scala mesoscopica. Il posizionamento delle bande nelle zone di volume viene ottenuto dall'allineamento dei livelli di Fermi in accordo con il fatto che il drogaggio rende i materiali conduttori. I profili delle bande nella zona di carica spaziale sono calcolati con procedure analoghe a quelle per le tradizionali giunzioni $n - p$, assumendo, empiricamente, che alla interfaccia si formi un dislivello pari alla differenza delle affinità elettroniche dei due semiconduttori²¹.

Il ragionamento fenomenologico di prendere il profilo delle bande locali quale potenziale efficace della giunzione è di sicuro qualitativamente corretto. È difficile però dire se le proprietà di tunneling degli elettroni siano quantitativamente descrivibili nell'ambito di una simile schematizzazione. Va d'altro canto riconosciuto che questo modo di procedere ha portato ad un certo successo nella progettazione dei dispositivi elettronici ad eterogiunzione⁶.

1.2 IL PROBLEMA DELLA MASSA EFFICACE

La costruzione del potenziale efficace delle eterogiunzioni a partire da una analisi fenomenologica basata sull'uso della struttura a bande locale presenta alcuni aspetti insoddisfacenti. Ciò è particolarmente vero per quanto riguarda il concetto di massa efficace.

In un monocristallo semiconduttore l'uso della massa efficace, salvo il caso di presenza di forze esterne rapidamente variabili nel tempo²³, è rigorosamente giustificabile. Il potenziale cristallino $V(\mathbf{r})$ genera una struttura a bande $E_n(\mathbf{k})$ con stati di Bloch $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ equamente delocalizzati in tutte le celle. Ogni pacchetto

d'onde ψ , sovrapposizione di stati di Bloch appartenenti ad una singola banda n , si propaga attraverso il cristallo secondo l'equazione di Schrödinger¹⁵

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E_n(-i\nabla) \psi \quad (3)$$

in cui l'operatore $E_n(-i\nabla)$ è ottenuto dalla relazione di dispersione con la sostituzione $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$. Se gli stati che compongono il pacchetto corrispondono ad una porzione della banda n in cui la relazione di dispersione è ben approssimata da termini quadratici, *e.g.* il fondo della banda di conduzione,

$$E_n(\mathbf{k}) \simeq E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4)$$

l'Eq. 3 può essere letta dicendo che il pacchetto d'onde ψ rappresenta la propagazione di un elettrone libero dotato di massa efficace m^* ed energia cinetica, per la componente \mathbf{k} , pari a $E_n(\mathbf{k}) - E_C$.

La trasposizione di questa schematizzazione al caso di una eterogiunzione causa delle ambiguità. Si consideri ad esempio il moto di un pacchetto d'onde con energia media compresa, in riferimento alla Fig. 3, tra $E_C^{(1)}$ ed $E_C^{(2)}$. Nel semispazio in cui gli stati elettronici sono delocalizzati, *i.e.* dove si ha propagazione di tipo classico, ha ancora senso parlare di una massa efficace. Ma che cos'è la massa efficace nel semispazio in cui le funzioni d'onda sono evanescenti? Nel modello fenomenologico di giunzione basato sull'uso della struttura a bande locale tale regione risulta proibita, *i.e.* non esistono livelli energetici. La definizione di massa efficace, d'altro canto, ha origine da una relazione di dispersione senza la quale non può essere introdotta.

Senza dubbio la massa efficace o, meglio, ciò che essa in ultima analisi rappresenta, *i.e.* l'interazione con il potenziale cristallino, gioca un ruolo importante nella definizione delle proprietà di tunneling delle eterogiunzioni²⁴. In qualche modo tale contributo va considerato.

Spesso in letteratura viene usato un linguaggio in termini di massa efficace variabile da una regione all'altra della giunzione. La conservazione del flusso di

particelle impone speciali condizioni di raccordo delle funzioni d'onda alla interfaccia^{25–28}. Equivalentemente ciò corrisponde ad usare una equazione di Schrödinger efficace con l'operatore energia cinetica opportunamente modificato

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{4}\left[\nabla^2\frac{1}{m^*(\mathbf{r})} + \frac{1}{m^*(\mathbf{r})}\nabla^2\right] \quad (5)$$

in modo da risultare ancora hermitiano²⁹. La determinazione della massa efficace $m^*(\mathbf{r})$ necessita una qualche cautela e non può essere identificata, in generale, con quella dei monocristalli che compongono la eterogiunzione³⁰. Gli autostati elettronici della eterogiunzione possono essere ottenuti, in ciascuno dei due semispazi, come sovrapposizione di quelli del corrispondente monocristallo. Ad una energia compresa, in riferimento ancora alla Fig. 3, tra $E_C^{(1)}$ ed $E_C^{(2)}$, gli autostati della eterogiunzione tendono ad identificarsi con quelli del relativo monocristallo nella zona a potenziale basso. Nella zona a potenziale alto, invece, essi sono necessariamente una effettiva combinazione lineare degli autostati del secondo monocristallo, il quale, per tale valore di energia, presenta una *gap*. Di conseguenza, nelle zone classicamente accessibili al trasporto la massa efficace $m^*(\mathbf{r})$ si riduce alla massa efficace della banda di conduzione del primo tipo di materiale. Nelle zone classicamente proibite, invece, la massa efficace è fortemente rinormalizzata rispetto al valore di volume del secondo tipo di materiale³⁰.

Alternativamente è possibile pensare ad una descrizione della eterogiunzione in termini di una massa efficace unica. Il problema della sua determinazione, in questo caso, non è sconnesso da quello della determinazione, quantisticamente rigorosa, del potenziale efficace. Le proprietà di evanescenza della funzione d'onda nelle zone classicamente proibite sono determinate, infatti, unicamente dal vettore d'onda sotto barriera³¹, *i.e.* dal prodotto della massa e del potenziale efficaci, piuttosto che da ciascuno di essi singolarmente. Un metodo del tipo di quello proposto da Jona-Lasinio, Martinelli e Scoppola dovrebbe essere in grado di evidenziare contemporaneamente sia il comportamento evanescente dei singoli stati quantistici in presenza di una giunzione, *i.e.* l'*effetto barriera*, sia l'andamento delle relazioni di

dispersione nelle bande degli stati, *i.e.* l'effetto massa efficace. Il tutto, è bene ricordarlo ancora, tenendo in considerazione la natura tridimensionale della vera eterogiunzione che influenza evidentemente anche il manifestarsi dell'effetto massa efficace²⁷.

Come sottolineato alla fine del paragrafo precedente, le difficoltà nell'ottenere una descrizione efficace rigorosa del trasporto elettronico attraverso eterostrutture non impediscono di fare progressi. Allo scopo di investigare qualitativamente il comportamento quantistico di elettroni in presenza di eterogiunzioni si può procedere mediante una schematizzazione fenomenologica. L'ordine di grandezza degli effetti trovati *non può dipendere* dalla forma precisa del potenziale e della massa efficaci. Anzi la *robustezza* di tali effetti a modifiche del modello va interpretata come segnale positivo della loro reale esistenza. Nell'ambito di questa filosofia e relativamente al moto di elettroni, ci si accinge a schematizzare le eterogiunzioni come gradini di potenziale del valore di qualche decimo di elettronvolt. La massa efficace degli elettroni viene considerata costante e ovunque, ad eccezione del calcolo realistico presentato nel capitolo 3, si fa uso della massa vera dell'elettrone.

1.3 TUNNELING RISONANTE

Tra le numerose situazioni quantistiche che la tecnologia delle eterostrutture permette di investigare, un ruolo predominante, per interesse sia teorico che pratico, è rivestito dai dispositivi a tunneling risonante³². Nella versione più semplice un tale dispositivo, mostrato nella Fig. 4 è costituito da una serie alternata di eterogiunzioni, ad esempio $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$, il cui potenziale efficace, visto da elettroni che si propagano nella banda di conduzione del $GaAs$ ortogonalmente alle interfacce, è schematizzato da una doppia barriera di potenziale.

L'analisi quantistica dello scattering su potenziali quasi confinanti del tipo di quello mostrato in Fig. 4 conduce ai ben noti fenomeni di risonanza³³. Nella Appendice A viene mostrato il calcolo dettagliato delle autofunzioni $\phi_k(x)$ descrittive dello scattering stazionario di una particella proveniente da $x = -\infty$ che si muove con impulso $\hbar k = \sqrt{2mE}$ contro un potenziale del tipo di quello della Fig. 4.

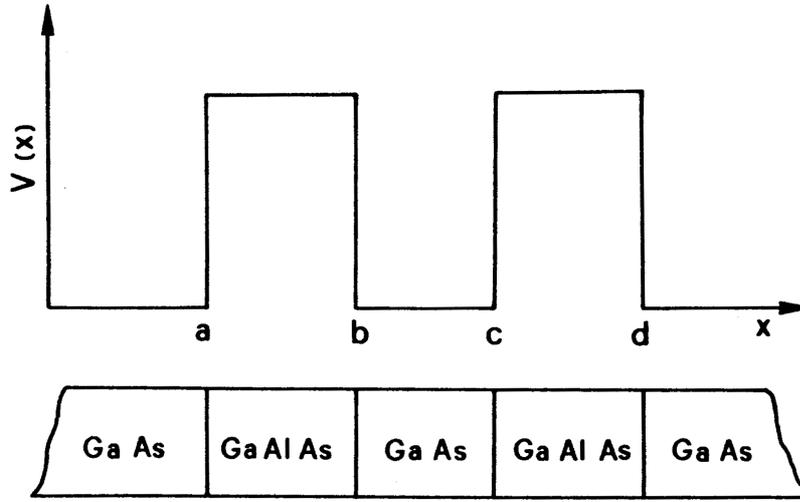


Figura 4. Esempio di eterostruttura in cui il potenziale efficace $V(x)$ assume l'aspetto di una doppia barriera unidimensionale. x è la direzione ortogonale alle interfacce.

In corrispondenza a determinati valori dell'energia E della particella incidente le autofunzioni $\phi_k(x)$ *risuonano* all'interno della buca formata dalla doppia barriera localizzandosi massimamente in tale regione. Un esempio di questo comportamento è mostrato nella Fig. 5 dove si è considerato il caso, fisicamente rilevante, di un potenziale in cui le barriere, alte 0.3 eV e spesse $20 a_0$, sono separate da una buca larga $15 a_0$, essendo $a_0 \equiv \hbar^2/me^2 \simeq 0.529 \text{ \AA}$ il raggio di Bohr.

La formazione delle risonanze è dovuta alla tendenza del potenziale a confinare la funzione d'onda in prossimità dei suoi minimi. Nel caso del potenziale mostrato nella Fig. 4, l'energia delle risonanze diventa, per barriere sufficientemente spesse, uguale a quella per la quale si avrebbero stati legati nel potenziale confinante ottenuto nel limite $a \rightarrow -\infty$ e $d \rightarrow +\infty$. Con i valori citati la doppia barriera considerata ammette un solo stato risonante ad energia $E_R \equiv \hbar^2 k_R^2/2m \simeq V_0/2$.

In conseguenza della localizzazione degli autostati nella buca la probabilità che una particella incidente riesca ad attraversare per effetto tunnel la doppia barriera aumenta di ordini di grandezza. Questo comportamento è quantificato

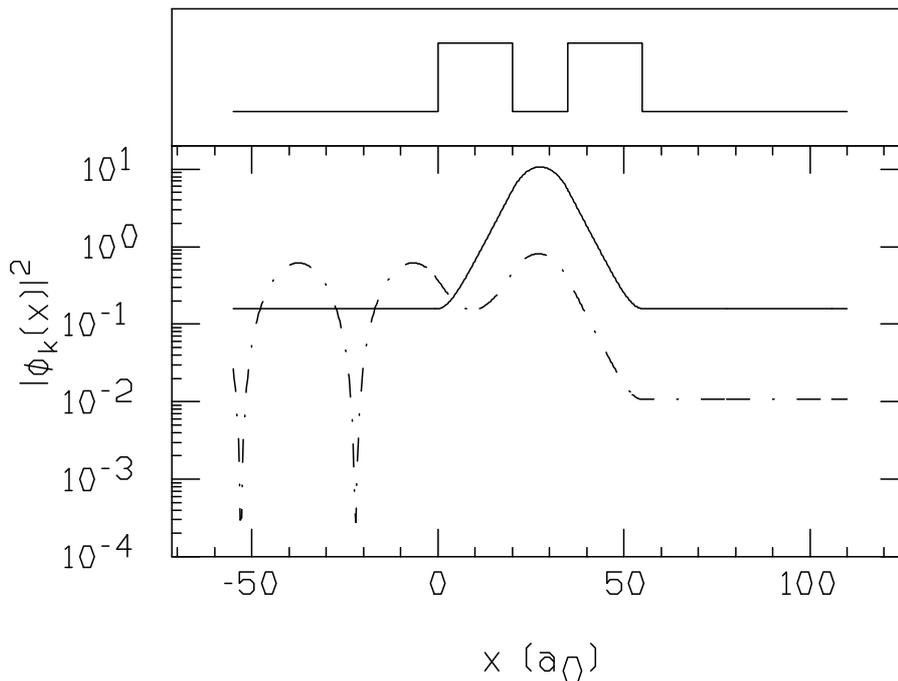


Figura 5. Localizzazione degli autostati $\phi_k(x)$ in condizione di risonanza $k = k_R$ (curva continua) in confronto alla situazione di non risonanza $k \neq k_R$ (curva tratteggiata). Il potenziale è mostrato nel riquadro in alto.

dall'andamento del coefficiente di trasmissione $T(E)$ che presenta un massimo in corrispondenza di ogni risonanza. La Fig. 6 mostra quello che succede nel caso della doppia barriera precedentemente considerata. In prossimità di una risonanza la forma del coefficiente di trasmissione è approssimativamente di tipo lorentziano

$$T(E) \simeq \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_R}{\Gamma_R/2}\right)^2} \quad (6)$$

con un valore massimo unitario, *i.e.* assenza di riflessione, quando le barriere sono simmetriche³³. La risonanza è caratterizzata da una larghezza Γ_R inversamente proporzionale allo spessore delle barriere. Ciò in accordo con il fatto che nel limite di barriere infinitamente spesse lo spettro continuo degli stati di scattering è rimpiazzato dagli autostati discreti della buca divenuta confinante.

Quelle descritte finora sono le proprietà stazionarie del tunneling risonante. Le predizioni fornite dalla meccanica quantistica in una *analisi stazionaria* sono sintetizzabili nel valore dei coefficienti di riflessione e trasmissione, *i.e.* nella conoscenza

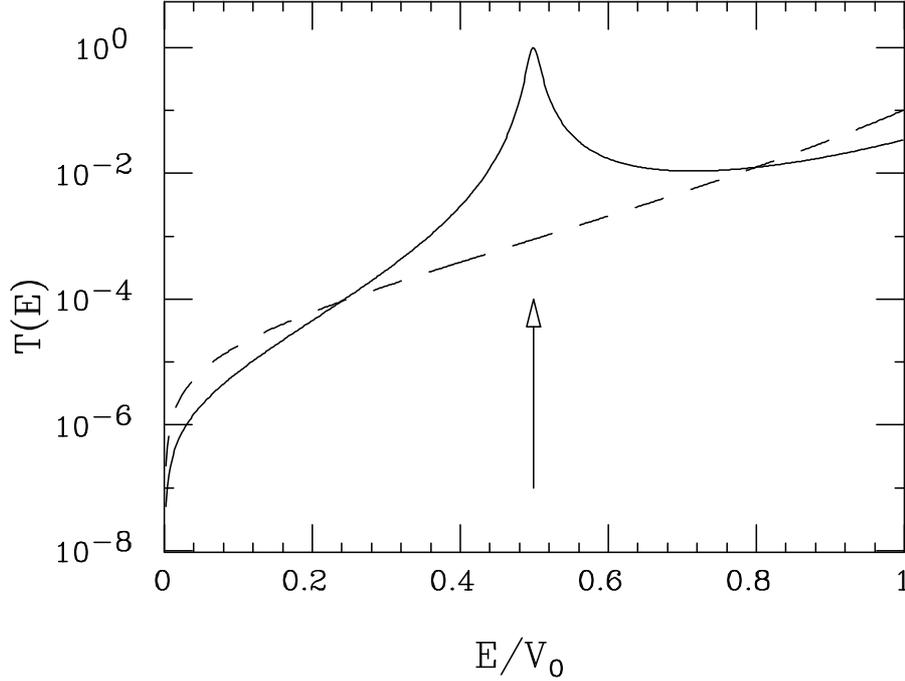


Figura 6. Risonanza nel coefficiente di trasmissione (curva continua) per il potenziale della figura precedente. La linea tratteggiata rappresenta il coefficiente di trasmissione dello stesso potenziale quando la buca è assente, *i.e.* $b = c$. La freccia, infine, indica la posizione dello stato discreto posseduto dalla buca rettangolare ottenuta nel limite di barriere infinitamente spesse, *i.e.* $a \rightarrow -\infty$ e $d \rightarrow +\infty$.

della sezione d'urto. Si tratta di una informazione di natura probabilistica riguardo la popolazione dei canali di scattering infinitamente dopo e infinitamente lontano dal tempo e dal luogo ove l'interazione avviene. Questo costituisce un quadro incompleto dell'evento di scattering. Solo una *analisi dinamica* esaurisce le capacità predittive della meccanica quantistica permettendo di esplorare completamente il fenomeno nel corso del suo svolgimento. Tuttavia, lo studio del transiente quantistico per un processo di scattering è del tutto inusuale in letteratura e pochissimi progressi sono stati compiuti. Il motivo di questo ritardo risiede sicuramente nelle difficoltà presentate dal problema. La fisica delle eterostrutture, riconducibile in molti casi ad una sola dimensione, costituisce un ambiente ideale per esplorare le proprietà dinamiche dello scattering. Infatti, in questo caso è possibile tentare con successo uno studio analitico³⁴, o numerico^{35,36}, in grado di fornire informazioni sulla funzione d'onda del sistema ad ogni istante.

La difficoltà di analizzare l'evoluzione temporale del tunneling di elettroni attraverso una eterostruttura è ulteriormente accresciuta dalla natura a molti corpi del processo stesso. Nel contesto che si sta analizzando, il termine *molti corpi* può generare confusione ed è necessario far chiarezza su questo punto. Sia il tunneling di un solo elettrone, sia quello di una nuvola di elettroni, costituiscono, in generale, un problema a molti corpi per la presenza dei gradi di libertà della struttura semiconduttrice attraversata. I gradi di libertà non relativi agli elettroni di cui si vuole studiare il tunneling possono essere eliminati, mediante integrazione sul loro dominio^{37,38}, facendo muovere tali elettroni in un potenziale efficace dipendente dalle loro stesse coordinate. Nel caso di una giunzione di ridotte dimensioni laterali, il potenziale autoconsistente così determinato può risultare sensibile al tunneling di una singola carica elettronica³⁹. In conseguenza di ciò, si ottengono degli effetti, il più conosciuto tra i quali è il *Coulomb blockade*^{39,40}, che possono essere definiti effetti a molti corpi in presenza di una singola carica. Le cose vanno diversamente quando la giunzione ha dimensioni laterali tali da costituire una superficie praticamente illimitata. In questo caso non si ha sensibilità ad una singola carica elettronica. Quando, tuttavia, si è in presenza di una nuvola di elettroni, il potenziale efficace continua a dipendere dalle coordinate di tali elettroni attraverso la loro mutua interazione. Gli effetti prodotti da questo potenziale autoconsistente possono ora essere definiti effetti a molti corpi in presenza di una nuvola di carica.

Dal punto di vista delle proprietà dinamiche, gli effetti a molti corpi in presenza di una nuvola di carica offrono, oggi, la possibilità di una verifica sperimentale diretta⁴¹. Ciò stimola il loro studio anche in prospettiva di possibili applicazioni tecnologiche.

2. DINAMICA DEL TUNNELING RISONANTE

Gli effetti dovuti alla interazione tra gli elettroni sono amplificati in un processo di tunneling risonante. In questo caso, infatti, la trasmissione è efficiente solo in prossimità delle risonanze. Variazioni anche piccole del potenziale efficace possono indurre mutamenti consistenti nella quantità di carica trasmessa. Inoltre, la presenza delle risonanze produce un fenomeno di localizzazione all'interno dei minimi del potenziale. L'aumento della densità elettronica in tali regioni esalta ulteriormente gli effetti di mutua interazione.

In questo capitolo vengono esplorate le proprietà dinamiche del tunneling risonante di una nuvola di elettroni⁴²⁻⁴⁴. In opportune condizioni, quando l'interazione tra gli elettroni è presa in considerazione, viene effettivamente osservato il comportamento oscillante immaginato da Ricco e Azbel⁴⁵.

2.1 INTERAZIONE IN CAMPO MEDIO

Si consideri la situazione in cui un sistema di elettroni tenta di attraversare una eterostruttura il cui potenziale efficace forma una doppia barriera di potenziale. Come già notato, a differenza del caso di un solo elettrone, il tunneling di una nuvola di elettroni è in grado di produrre consistenti effetti, legati alla mutua interazione, anche in eterostrutture non confinate lateralmente. La possibilità di considerare il cristallo illimitato nel piano parallelo alle giunzioni porta ad una grande semplificazione. Infatti, come verrà mostrato più avanti, l'inclusione della interazione nel limite di campo medio non altera in questo caso l'unidimensionalità del problema in assenza di interazione. Inoltre, questa è proprio la condizione sperimentale del cosiddetto *trasporto balistico* nelle eterostrutture^{46,47}. Una nuvola di elettroni viene creata all'interno di un contatto della eterostruttura, *i.e.* in una

estremità di natura metallica del cristallo artificiale, mediante, ad esempio, una eccitazione laser. Una differenza di potenziale applicata in una susseguente porzione della eterostruttura accelera gli elettroni contro la doppia barriera di potenziale.

A prescindere dalla preparazione sperimentale della nuvola, si assume che venga attuata una sorta di selezione nella energia cinetica degli elettroni. Tutti gli N elettroni appartenenti alla nuvola hanno, *e.g.* a causa del meccanismo di accelerazione, la stessa energia cinetica media e la stessa dispersione in energia cinetica nella direzione x ortogonale alle eterogiunzioni formanti la doppia barriera di potenziale. In altre parole, all'istante $t = 0$, subito dopo il meccanismo di accelerazione, essi si trovano nello stesso stato di particella singola $\psi(x, 0)$ per quanto riguarda la coordinata x .

La bosonizzazione degli elettroni della nuvola nella direzione x , *i.e.* la proprietà di simmetria rispetto allo scambio delle coordinate x , non crea problemi. I gradi di libertà trasversali y e z ristabiliscono la corretta antisimmetria della funzione d'onda totale del sistema di N elettroni al tempo $t = 0$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; 0) = \prod_{i=1}^N \psi(x_i, 0) \Omega(y_1, z_1, y_2, z_2, \dots, y_N, z_N; 0) \quad (7)$$

Per Ω antisimmetrico rispetto allo scambio di ogni coppia di coordinate elettroniche \mathbf{r}_i (lo spin degli elettroni viene ignorato), la medesima proprietà è goduta dallo stato globale Ψ .

La separazione tra gradi di libertà longitudinali e trasversali assunta all'istante $t = 0$ nella Eq. 7 tende ad essere distrutta con il passare del tempo. In questo senso agiscono sia la mutua interazione tra gli N elettroni, sia l'interazione di questi ultimi con il resto del cristallo.

A temperature non troppo elevate l'interazione con il reticolo può essere trascurata. In tali condizioni, infatti, e sulla scala di tempi alla quale si è interessati, la termalizzazione dei gradi di libertà dovuta allo scattering elettrone-fonone è del tutto ignorabile⁴⁸.

L'interazione elettronica richiede una discussione più dettagliata. Nel limite

di campo medio, appropriato per $N \gg 1$, ciascun elettrone della nuvola si trova nello stesso stato di funzione d'onda $\mu(\mathbf{r}, t)$ ed interagisce con gli altri attraverso un potenziale medio $W(\mathbf{r}, t)$. Effetti relativistici a parte, questo non è altro che il potenziale elettrostatico

$$W(\mathbf{r}, t) = e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad (8)$$

generato dalla densità elettronica

$$\rho(\mathbf{r}, t) = N |\mu(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (9)$$

degli altri $N - 1 \simeq N$ elettroni. L'Eq. 8 è scritta nel sistema di Gauss ed e è la carica di un elettrone. Una espressione equivalente, ma più maneggevole, è rappresentata dalla equazione di Poisson. Eseguendo la trasformata di Fourier si ottiene

$$W(\mathbf{q}, \omega) = 4\pi e^2 \frac{\rho(\mathbf{q}, \omega)}{q^2 \varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \quad (10)$$

La costante dielettrica $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ è stata inserita per tenere in conto l'interazione della nuvola elettronica con l'ambiente cristallino. In essa è inclusa anche una dipendenza dalla coordinata x dovuta alla presenza dei differenti strati semiconduttori lungo tale direzione. Con questa osservazione e nell'intervallo di frequenze e vettori d'onda ai quali si è interessati, può essere usata la seguente semplice approssimazione⁴⁸:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) \simeq \varepsilon(q_x) \left[1 + \frac{\kappa(q_x)^2}{q^2} \right] \quad (11)$$

Nella Eq. 11 l'interazione tra gli N elettroni immersi nell'ambiente cristallino è caratterizzata da una lunghezza di schermaggio $l(q_x) = 2\pi/\kappa(q_x)$ che tiene in conto le variazioni artificiali di composizione lungo la direzione x . Il rapporto tra la lunghezza di schermaggio e le dimensioni della nuvola elettronica è il parametro che decide il mescolamento dei gradi di libertà longitudinali e trasversali. Si supponga che la nuvola elettronica abbia ad un certo istante, *e.g.* $t = 0$, dimensioni lineari L

nel piano yz con una densità uniforme nello stesso piano N/L^2 . Necessariamente $\rho(\mathbf{q}, 0)$ è diverso da zero nella regione $|q_y| \leq \pi/L$, $|q_z| \leq \pi/L$. Quando risulta $L \gg l(q_x)$, usando l'Eq. 11 l'equazione di Poisson fornisce

$$W(\mathbf{q}, 0) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon(q_x)} \frac{\rho(\mathbf{q}, 0)}{\kappa(q_x)^2 + q_x^2} \quad (12)$$

La condizione $L \gg l(q_x)$ garantisce che la densità di carica trasversale nel piano yz non cambia nel tempo. L'Eq. 12 continua ad essere valida agli istanti successivi ed il potenziale di interazione $W(\mathbf{r}, t)$ riduce la sua dipendenza alla sola coordinata x .

Alla luce di queste considerazioni, nel limite di bassa temperatura e per dimensioni della nuvola elettronica non troppo piccole, il disaccoppiamento tra i gradi di libertà trasversali e longitudinali, realizzato all'istante $t = 0$, viene mantenuto anche nei tempi successivi. I gradi di libertà trasversali assicurano il rispetto del principio di Pauli. Nella analisi del moto quantistico della nuvola elettronica attraverso la doppia barriera essi possono essere ignorati sostituendo la funzione d'onda Ω nella Eq. 7 con il fattore costante $\sqrt{N/L^2}$ che tiene conto della densità trasversale nel piano yz .

L'approssimazione di campo medio, utilizzata nella giustificazione del disaccoppiamento dei gradi di libertà, permette anche di semplificare la descrizione della evoluzione temporale della nuvola elettronica. Lo stato iniziale del sistema è un prodotto di funzioni d'onda unidimensionali tutte identiche.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; 0) = \sqrt{N/L^2} \prod_{i=1}^N \psi(x_i, 0) \quad (13)$$

Il teorema 5.7 del lavoro di Spohn⁴⁹ assicura che, nel limite di campo medio, lo stato totale del sistema rimane ad ogni istante uno stato prodotto

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) = \sqrt{N/L^2} \prod_{i=1}^N \psi(x_i, t) \quad (14)$$

Lo stato di particella singola $\psi(x, t)$, uguale per tutti gli elettroni, soddisfa l'equazione di Schrödinger non lineare

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + W(x, t) \right] \psi(x, t) \quad (15)$$

$V(x)$ è il potenziale esterno assegnato, *e.g.* la doppia barriera mostrata nella Fig. 4. $W(x, t)$ rappresenta l'interazione tra gli elettroni nel limite di campo medio

$$W(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \frac{4\pi e^2}{\varepsilon(q_x)} \frac{\rho(q_x, t)}{\kappa(q_x)^2 + q_x^2} \exp\{iq_x x\} \quad (16)$$

dove $\rho(q_x, t)$ indica la trasformata di Fourier di

$$\rho(x, t) = N/L^2 |\psi(x, t)|^2 \quad (17)$$

L'approssimazione di campo medio permette, in definitiva, di ridurre il problema tridimensionale ad N corpi relativo al moto della nuvola elettronica ad un problema unidimensionale ad un solo corpo. Assegnata la condizione iniziale $\psi(x, 0)$ e la densità trasversale N/L^2 della nuvola, la soluzione autoconsistente della Eq. 15 e della Eq. 16 fornisce ogni altra informazione sulla evoluzione del sistema nel potenziale $V(x)$.

2.2 POTENZIALE DI INTERAZIONE EFFICACE

Il potenziale efficace della eterostruttura, alla quale non sono applicate differenze di potenziale, è assunto essere una funzione a gradino del tipo

$$V(x) = V_0 [\theta(x - a)\theta(b - x) + \theta(x - c)\theta(d - x)] \quad (18)$$

con $a < b < c < d$ e dove $\theta(x)$ è la funzione di Heaviside.

Si è già visto come il potenziale a doppia barriera della Eq. 18 si comporta, riguardo allo scattering stazionario di elettroni, come un filtro passa banda con

bande passanti centrate intorno agli stati risonanti. In conseguenza di ciò, il contributo fornito dal potenziale di interazione $W(x, t)$ è riducibile al seguente effetto. Nelle regioni lontane dalla doppia barriera l'interazione produce una rinormalizzazione del potenziale efficace che può essere pensata conglobata in una variazione della massa efficace. L'influenza sulle proprietà di tunneling è irrilevante. In prossimità della doppia barriera $W(x, t)$, invece, è responsabile di uno spostamento delle risonanze proporzionalmente alla quantità di carica presente nella regione stessa. Poiché la carica in tale regione è massimamente confinata all'interno della buca tra b e c , si può trascurare la deformazione nella zona delle barriere e costruire un potenziale efficace di interazione del tipo:

$$W(x, t) \simeq V_Q(t)\theta(x - b)\theta(c - x) \equiv \lambda Q(t)\theta(x - b)\theta(c - x) \quad (19)$$

Il fondo della buca, e in una qualche misura, quindi, anche la posizione delle risonanze, viene spostato della quantità $V_Q(t)$ proporzionale alla carica di singolo elettrone presente all'istante t nella buca

$$Q(t) \equiv \int_b^c dx |\psi(x, t)|^2 \quad (20)$$

La costante λ ha le dimensioni di una energia. Dalla forma della Eq. 16 è evidente che essa dipende dalla densità trasversale della nuvola elettronica e da una media ε_m della costante dielettrica della eterostruttura

$$\lambda = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_m} w N / L^2 \quad (21)$$

con w che ha le dimensioni di una lunghezza ed è definito in base alla relazione

$$\frac{w}{\varepsilon_m} Q(t) N / L^2 \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq_x \frac{1}{\varepsilon(q_x)} \frac{\rho(q_x, t)}{\kappa(q_x)^2 + q_x^2} \exp\{iq_x x\} \quad (22)$$

Si noti che, a causa della forma posseduta dalla costante λ , $V_Q(t)$ rappresenta la differenza di energia potenziale elettrostatica che si stabilisce tra due piani separati da una distanza w e sui quali è depositata una densità di carica per unità di superficie $\pm eQ(t)N/L^2$. Da un punto di vista fenomenologico il modello rappresentato dalla Eq. 19 corrisponde dunque ad assegnare alle eterogiunzioni relative ai piani $x = b$ e $x = c$ una capacità elettrica per unità di superficie pari a

$$C \equiv \frac{eQ(t)N/L^2}{V_Q(t)} = \frac{\varepsilon_m}{4\pi w} \quad (23)$$

Più precisamente l'Eq. 19 è il risultato di una schematizzazione, analoga a quella per il potenziale efficace $V(x)$, valida su scala mesoscopica. Le giunzioni sono rappresentate da condensatori piani di opportuna capacità ed il dettaglio microscopico, *i.e.* l'andamento del potenziale nelle regioni di dimensioni w , viene approssimato da una variazione brusca in prossimità delle superfici geometriche delle giunzioni stesse.

Nella letteratura relativa alla fisica dei semiconduttori la descrizione degli effetti di interazione è comunemente fatta in termini macroscopici di capacità attribuite alle eterogiunzioni²¹. Il ragionamento precedente mostra come una analisi microscopica porti a risultati del tutto simili. Tuttavia, quest'ultimo modo di procedere offre, oltre ad un maggiore rigore, il vantaggio di evitare l'uso di quantità ambiguamente definite. Si pensi, ad esempio, al parametro w che definisce la spaziatura tra le armature dell'ipotetico condensatore la cui stima, al pari del problema della massa efficace, pone non pochi problemi⁵⁰.

2.3 EVOLUZIONE TEMPORALE

D'ora in poi si indagherà il comportamento quantistico del sistema di N elettroni in presenza del termine di interazione schematizzato secondo l'Eq. 19. λ viene trattato come un parametro i cui valori permettono di esplorare agevolmente varie situazioni fisiche. Successivamente la validità dei risultati ottenuti nell'ambito di questo semplice modello sarà confermata da un calcolo più realistico basato sulla Eq. 16.

Occorre, innanzitutto, assegnare la condizione iniziale $\psi(x, 0)$ che rappresenta lo stato di ogni singolo elettrone della nuvola subito dopo il meccanismo di produzione della stessa. Una ragionevole scelta è quella di un pacchetto d'onde gaussiano

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2 + ik_0x\right] \quad (24)$$

In questa rappresentazione gli elettroni si trovano localizzati all'istante $t = 0$ intorno al punto $x_0 < a$, supposto tanto lontano da a che $Q(0) \simeq 0$. Essi, inoltre, si muovono verso la doppia barriera con impulso medio $\hbar k_0$ ed energia cinetica media, per $k_0 \gg \sigma^{-1}$, $E_0 \simeq \hbar^2 k_0^2 / 2m$. La trasformata di Fourier dello stato iniziale

$$\psi(k, 0) = \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{k-k_0}{\sigma^{-1}}\right)^2 + ix_0(k-k_0)\right] \quad (25)$$

fornisce, infine, la dispersione in energia cinetica Γ_0 , definita come la larghezza a metà altezza in energia del modulo quadrato della Eq. 25, in termini della localizzazione spaziale σ e dell'impulso medio $\hbar k_0$

$$\Gamma_0 = 2\sqrt{\ln 2} \frac{\hbar^2 k_0}{m\sigma} \quad (26)$$

A partire dalla condizione iniziale $\psi(x, 0)$ l'evoluzione temporale della nuvola è descritta dalla Eq. 15 insieme con l'Eq. 18 e l'Eq. 19. Si tratta di una complicata equazione differenziale alle derivate parziali non lineare. Si noti, infatti, che $W(x, t)$ dipende funzionalmente da $\psi(t)$. La soluzione formale è data da

$$\psi(x, t) = T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[H_0 t + \int_0^t dt' W(x, t')\right]\right\} \psi(x, 0) \quad (27)$$

dove T indica ordinamento cronologico ed H_0 è l'hamiltoniana descrivente il processo di tunneling in assenza di interazione elettronica

$$H_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (28)$$

É difficile trovare per tale espressione una valutazione esplicita praticabile. Sia nel caso del semplice modello indicato nella Eq. 19, sia nel caso più generale della Eq. 16, la forma del termine $W(x, t)$ fa sì che il problema in esame non rientri in nessuna delle classi di equazioni differenziali non lineari risolvibili mediante trasformazione spettrale⁵¹. D'altro canto, l'applicazione di metodi perturbativi per la valutazione della Eq. 27 conduce ad approssimazioni difficilmente controllabili. Per evitare i problemi legati alla natura dubbia di una soluzione approssimata si è fatto ricorso ad una integrazione numerica. Nella Appendice B viene mostrato in dettaglio un algoritmo mediante il quale la funzione d'onda di singola particella $\psi(x, t)$ è calcolata numericamente nei punti di un opportuno reticolo bidimensionale. Come spiegato nella medesima appendice i risultati così trovati costituiscono una simulazione praticamente esatta del limite continuo.

L'analisi temporale di un processo di scattering risonante si rivela estremamente ricca di proprietà non classiche. Un esempio è mostrato nella Fig. 7 Si tratta di un pacchetto d'onde gaussiano del tipo di quello descritto nella Eq. 24 che si muove contro la doppia barriera di potenziale data dalla Eq. 18. Per il momento si ignorano i fenomeni di interazione, *i.e.* si pone $\lambda = 0$. I parametri a, b, c, d e V_0 sono scelti come indicato alla fine del capitolo 1 in modo tale che $V(x)$ possieda una sola risonanza ad energia $E_R \simeq V_0/2$ con una larghezza $\Gamma_R \simeq 5 \text{ meV}$. Il pacchetto incidente ha una energia cinetica media coincidente con la risonanza, $E_0 = E_R$, ma una dispersione $\Gamma_0 = 43.2 \text{ meV}$ molto maggiore di Γ_R . Allorché il pacchetto si avvicina alle barriere si formano delle oscillazioni spaziali tipiche dei fenomeni di interferenza. Poi, progressivamente, si rigenerano un pacchetto trasmesso ed uno riflesso. Nel caso in questione la componente riflessa è molto maggiore di quella trasmessa in accordo con la definizione delle probabilità di riflessione, R_0 , e trasmissione, T_0 , dell'intero pacchetto incidente

$$R_0 \equiv \int_{-\infty}^a dx |\psi(x, t \rightarrow +\infty)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dk |\psi(k, 0)|^2 R(k) \quad (29)$$

$$T_0 \equiv \int_{-d}^{+\infty} dx |\psi(x, t \rightarrow +\infty)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dk |\psi(k, 0)|^2 T(k) \quad (30)$$

dove $R(k)$ e $T(k)$ sono i coefficienti di riflessione e trasmissione determinati dal potenziale $V(x)$. Essendo $\Gamma_0 \gg \Gamma_R$, gran parte delle componenti di Fourier del pacchetto hanno come peso un coefficiente di riflessione quasi unitario e $R_0 \simeq 1$.

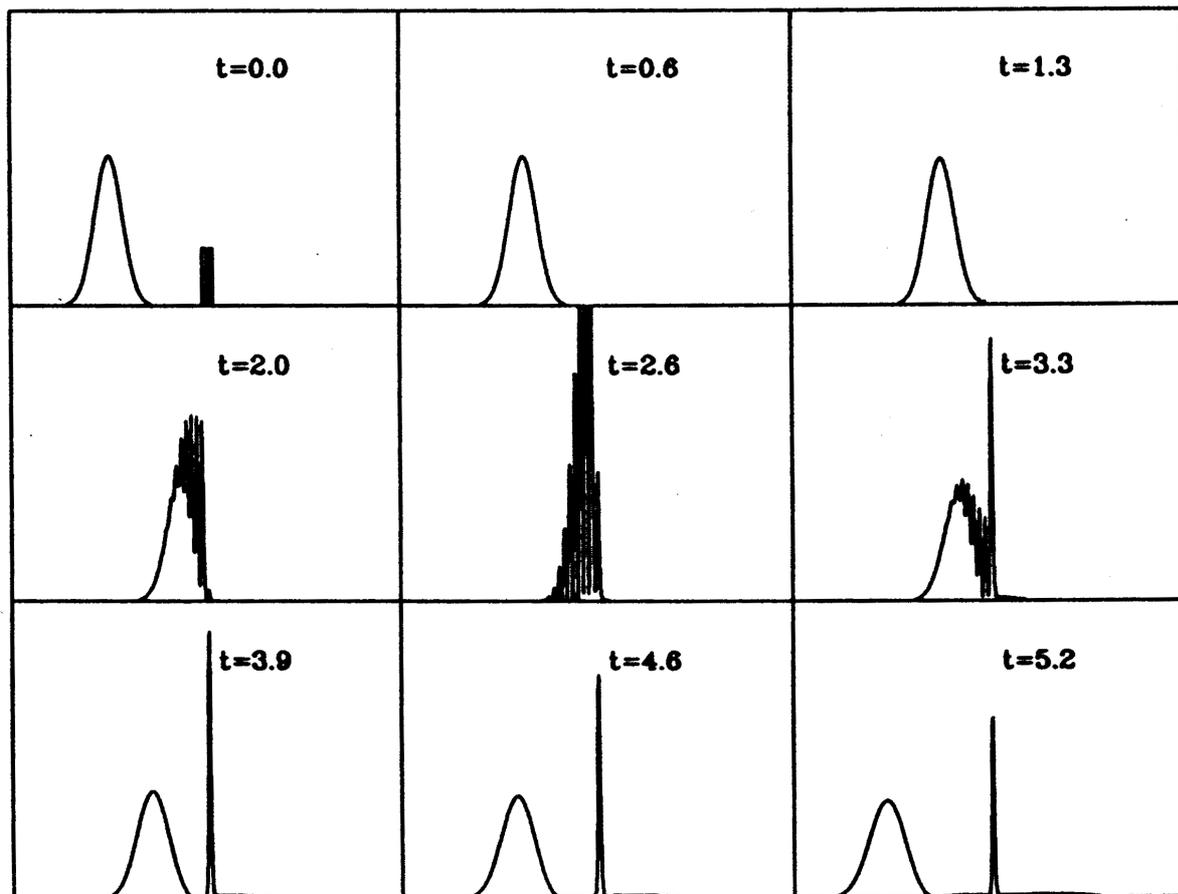


Figura 7. Esempio di evoluzione temporale di un pacchetto d'onde che si muove da sinistra verso destra contro una doppia barriera di potenziale. Ciascun riquadro si riferisce al tempo in esso indicato in 10^3 unità atomiche, *i.e.* $10^3 \cdot 4.83 \cdot 10^{-17}$ secondi. Nelle ordinate è riportata la densità di probabilità di posizione $|\psi(x, t)|^2$ e nelle ascisse la coordinata x . La posizione della doppia barriera è mostrata nel riquadro al tempo $t = 0$.

La presenza di uno stato risonante tende a modificare sostanzialmente la scala dei tempi sulla quale un processo di tunneling può dirsi compiuto⁵²⁻⁵⁴. Ciò risulta

evidente ancora dalla Fig. 7. Lo stretto picco al centro di ogni riquadro a partire dal tempo $t = 2$ è dovuto agli autostati prossimi alla risonanza quasi localizzati all'interno della buca. Essi vengono popolati su una scala di tempi simile a quella su cui si muove il pacchetto incidente ma decadono, nel caso in questione, assai più lentamente. Queste differenze nelle scale temporali per quanto riguarda il popolamento ed il decadimento degli stati risonanti sono responsabili, come si vedrà, di interessanti effetti dinamici quando viene presa in considerazione l'interazione tra gli elettroni.

Il comportamento dinamico mostrato nell'esempio della Fig. 7 può essere efficacemente sintetizzato, almeno per quanto riguarda gli effetti legati al tunneling risonante, dall'andamento della carica di singola particella $Q(t)$ intrappolata nella buca. Ogni altra grandezza di interesse sperimentale, *e.g.* i flussi trasmesso o riflesso, è, infatti, strettamente correlata all'andamento di $Q(t)$. Ciò è conseguenza di un principio di conservazione della carica che vale per l'Eq. 15 a causa della natura reale del termine non lineare $W(x, t)$.

Sulla base di queste considerazioni l'andamento di $Q(t)$ è stato oggetto di una indagine sistematica. I risultati principali sono raggruppati nella Fig. 8 In essa vengono confrontate un certo numero di simulazioni significative nelle quali è variata sia la dispersione in energia cinetica Γ_0 che la costante fenomenologica di interazione λ . Ciascun caso corrisponde ad una differente situazione sperimentale circa la natura della nuvola elettronica *e/o* della eterostruttura. Per quanto riguarda la dispersione in energia cinetica sono illustrati i casi in cui questa è molto maggiore, $\Gamma_0 = 43.2 \text{ meV}$, confrontabile, $\Gamma_0 = 5.8 \text{ meV}$, e molto minore, $\Gamma_0 = 0.8 \text{ meV}$, rispetto alla larghezza della risonanza $\Gamma_R \simeq 5 \text{ meV}$. Per comodità la costante λ è stata riparametrizzata nel seguente modo:

$$\lambda \equiv \alpha \frac{V_0}{Q_0} \quad (31)$$

Q_0 è una carica di normalizzazione che dipende dalla forma dello stato iniziale

$$Q_0 \equiv \int_{x_0-(c-b)/2}^{x_0+(c-b)/2} dx |\psi(x, 0)|^2 \quad (32)$$

La sua introduzione permette di ottenere un potenziale efficace di interazione $W(x, t)$ proporzionale alla carica normalizzata $Q(t)/Q_0$. Questa quantità, riportata nella Fig. 8, risulta dello stesso ordine di grandezza per ogni valore di Γ_0 ed il confronto fra i vari casi è semplificato. Il parametro adimensionale α tiene conto di vari effetti. Un grande valore di α implica alte densità elettroniche N/L^2 e/o piccole capacità C delle giunzioni. Per $V_0 = 0.3$ eV valori fisicamente ragionevoli sono ottenuti nell'intervallo $0 \leq \alpha \leq 100$.

Allo scopo di sottolineare gli effetti dinamici indotti dalla interazione fra gli elettroni della nuvola, nella Fig. 8 sono innanzitutto riportati i casi $\alpha = 0$ e Γ_0 variabile come detto sopra. Per $\alpha = 0$ l'interazione è ignorata. La carica presenta un andamento nel tempo molto semplice: una crescita ed una decrescita monotone. Quando $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$ crescita e decrescita sono simmetriche rispetto ad un opportuno tempo. Quando $\Gamma_0 \gg \Gamma_R$ la carica decresce molto lentamente con legge esponenziale lineare.

Per $\alpha \neq 0$ l'interazione è presa in considerazione. A parte una variazione di intensità nulla succede nella evoluzione temporale della carica rispetto al caso non interagente quando $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$. Quando però $\Gamma_0 \geq \Gamma_R$ compaiono delle oscillazioni. Più esattamente tale comportamento si verifica per un valore di α sufficientemente grande. All'ulteriore aumentare di α il numero delle oscillazioni effettuate da $Q(t)$ aumenta e la loro intensità diminuisce.

2.4 INTERFERENZA E NON LINEARITÀ

Il comportamento oscillante della carica $Q(t)$ intrappolata nella buca, e quindi anche dei flussi trasmesso e riflesso, è il risultato di un complicato fenomeno di interferenza e non linearità. Ciò è immediatamente riconosciuto scrivendo la funzione d'onda di singola particella, il cui modulo quadro determina $Q(t)$, in termini degli

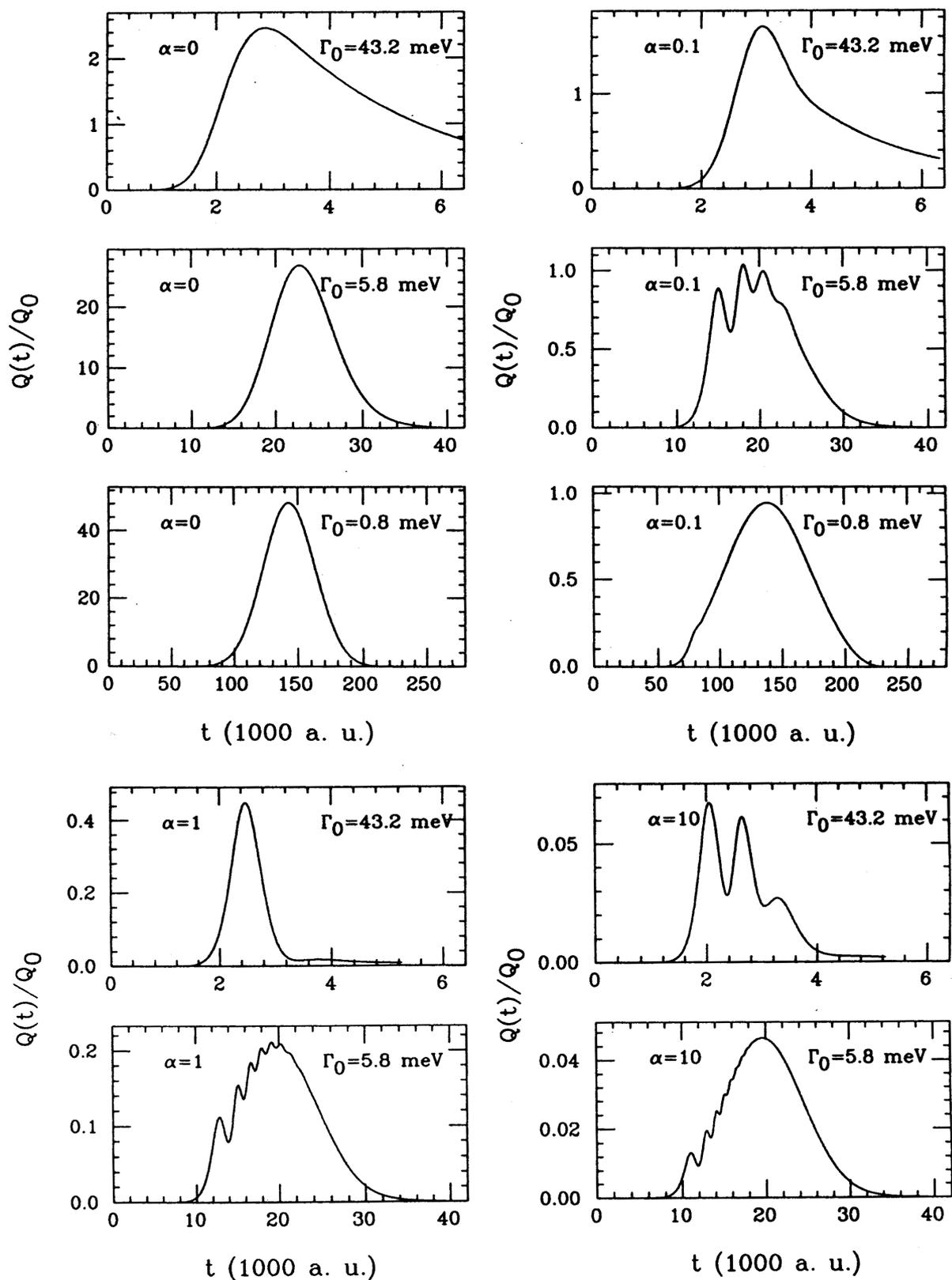


Figura 8. Evoluzione temporale della carica $Q(t)$ in varie situazioni sperimentali.

autostati della hamiltoniana H_0 definita nella Eq. 28

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk c(k, t) \phi_k(x) \quad (33)$$

con

$$H_0 \phi_k(x) = E_k \phi_k(x) \quad (34)$$

Questo problema agli autovalori è risolto nella Appendice A nella quale H_0 è ottenuto per $V_1 = 0$. I coefficienti $c(k, t)$ soddisfano il sistema di infinite equazioni differenziali non lineari

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c(k, t) = E_k c(k, t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \langle k|W(t)|k' \rangle c(k', t) \quad (35)$$

con la condizione iniziale

$$c(k, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_k(x)^* \psi(x, 0) \quad (36)$$

L'elemento di matrice

$$\langle k|W(t)|k' \rangle \equiv \lambda Q(t) \int_b^c dx \phi_k(x)^* \phi_{k'}(x) \quad (37)$$

dipende, tramite $Q(t)$, dagli stessi $c(k, t)$ e costituisce l'aspetto non lineare del processo. Inoltre, la sua dipendenza temporale rende l'evoluzione della carica $Q(t)$ funzione della sua stessa storia. Esso, infine, produce un mescolamento tra le varie componenti k che è all'origine del comportamento oscillante registrato nella Fig. 8. Le oscillazioni, infatti, risultano assenti proprio quando tale mescolamento diventa inefficace, *i.e.* per $\alpha = 0$, oppure $c(k, 0)$ di tipo deltiforme rispetto alla larghezza della risonanza.

Si cominci con l'analizzare il caso lineare $\alpha = 0$ in cui l'interazione fra gli elettroni è trascurata. In tali condizioni l'Eq. 35 fornisce

$$c(k, t) = c(k, 0) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_k t\right\} \quad (38)$$

Facendo uso della Eq. 24 con la condizione $Q(0) \simeq 0$, *i.e.* $a - x_0 \gg \sigma$, l'Eq. 36 permette, inoltre, di ricavare

$$c(k, 0) \simeq \psi(k, 0) + r(k)^* \psi(-k, 0) \quad (39)$$

essendo $r(k)$ l'ampiezza di riflessione definita nella Appendice A. La funzione d'onda $\psi(x, t)$, e quindi la carica $Q(t)$, sono ottenute integrando sulle componenti k come indicato nella Eq. 33. Le autofunzioni $\phi_k(x)$ hanno, tuttavia, una dipendenza da k (si faccia riferimento ancora alla Appendice A con i coefficienti $r(k)$, $t(k)$, $A^\pm(k)$, $B^\pm(k)$ e $C^\pm(k)$ valutati per $V_1 = 0$) talmente complicata che è in generale impossibile ottenere una soluzione analitica.

Nel limite $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$ i coefficienti delle autofunzioni $\phi_k(x)$ sono lentamente variabili in k rispetto alla trasformata di Fourier $\psi(k, 0)$ dello stato iniziale centrata in $k = k_0$. L'Eq. 33 può essere ridotta ad una somma di integrali gaussiani. Per $b < x < c$ si ha:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) \simeq & B^+(k_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi(k, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} e^{ikx} + \\ & + B^-(k_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi(k, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} e^{-ikx} + \\ & + r(-k_0)^* B^+(-k_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi(-k, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} e^{ikx} + \\ & + r(-k_0)^* B^-(-k_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \psi(-k, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} e^{-ikx} \end{aligned} \quad (40)$$

Nel caso delle simulazioni riportate nella Fig. 8 si considera $k_0 = k_R$ e quindi $r(-k_0)^* = r(k_0) = 0$. L'Eq. 40 si riduce, di conseguenza, ai soli primi due termini. Di questi il secondo rappresenta il moto libero dello stato iniziale che si allontana dalla doppia barriera ed è trascurabile. L'unico termine rilevante rimane il primo. Esso rappresenta il moto libero dello stato iniziale in direzione della doppia barriera. Questo risultato è ovvio alla luce della condizione $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$. Ogni componente di Fourier del pacchetto d'onde iniziale sente un coefficiente di trasmissione quasi unitario e tutto va come se le barriere non ci fossero. Infine, la carica nella buca è

ottenuta prendendo il quadrato del modulo della Eq. 40 ed integrandolo tra b e c . Per il teorema della media l'integrazione fornisce

$$Q(t) = \frac{c-b}{\sigma\sqrt{\pi}} \frac{|B^+(k_0)|^2}{\sqrt{1+(t/t_1)^2}} \exp\left\{-\frac{(t-t_0)^2/\tau_0^2}{1+(t/t_1)^2}\right\} \quad (41)$$

dove

$$\tau_0 \equiv 2\sqrt{\ln 2} \frac{\hbar}{\Gamma_0} \quad (42)$$

$$t_0 \equiv \frac{\xi(t) - x_0}{\hbar k_0/m} \quad (43)$$

$$t_1 \equiv \frac{\sigma}{\hbar k_0/m} \quad (44)$$

e $b < \xi(t) < c$. Quando, come nel caso della Fig. 8, il fenomeno della dispersione può essere trascurato, *i.e.* $t \ll t_1$, e ponendo inoltre

$$t_0 \simeq \frac{(b+c)/2 - x_0}{\hbar k_0/m} \quad (45)$$

si ottiene

$$Q(t) = \frac{c-b}{\sigma\sqrt{\pi}} |B^+(k_0)|^2 \exp\left\{-\left(\frac{t-t_0}{\tau_0}\right)^2\right\} \quad (46)$$

Questa formula descrive quantitativamente la crescita e la decrescita simmetriche mostrate dalla carica nella simulazione $\alpha = 0$, $\Gamma_0 = 0.8 \text{ meV}$.

Il limite opposto $\Gamma_0 \gg \Gamma_R$ è complicato dalla difficoltà di operare approssimazioni efficaci nella integrazione della Eq. 33. In questo caso, infatti, è la trasformata di Fourier dello stato iniziale $\psi(k, 0)$ ad essere lentamente variabile rispetto ai coefficienti delle autofunzioni $\phi_k(x)$. Alcune semplici considerazioni permettono, tuttavia, di individuare l'andamento qualitativo della carica. La crescita di $Q(t)$ è sostanzialmente caratterizzata dal moto libero del pacchetto d'onde incidente. Essa quindi è descritta da una legge non troppo diversa da quella della Eq. 46 con un tempo caratteristico dell'ordine di \hbar/Γ_0 . A partire dall'istante t_0 in cui la carica

raggiunge il suo valore massimo $Q(t_0)$ la funzione d'onda all'interno della buca può rappresentarsi come uno stato quasi-stazionario descritto dalla sovrapposizione

$$\psi(x, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \beta(k) \phi_k(x) \quad (47)$$

Trascurando i contributi forzanti dovuti al pacchetto d'onde incidente, la funzione $|\beta(k)|^2$ pesa gli autostati proporzionalmente al loro grado di localizzazione nella buca

$$|\beta(k)|^2 \propto \int_b^c dx |\phi_k(x)|^2 \quad (48)$$

Questo integrale, calcolato nella Appendice A, è dato dal prodotto di due fattori: il coefficiente di trasmissione $T(k)$ ed una espressione, alquanto complicata, ma sostanzialmente costante nella scala in cui $T(k)$ presenta una risonanza. Passando alla variabile energia ed usando la forma indicata nella Eq. 6 per il coefficiente di trasmissione in prossimità della risonanza, si giunge a scrivere

$$|\beta(E)|^2 = \frac{1}{2\pi\Gamma_R} \frac{1}{1 + \left(\frac{E-E_R}{\Gamma_R/2}\right)^2} \quad (49)$$

avendo scelto la costante in modo da normalizzare la funzione peso. Si è dunque alle prese con il decadimento di uno stato quasi-stazionario lorentziano che, come è ben noto⁵⁵, avviene con legge esponenziale lineare. La decrescita della carica ha perciò la forma

$$Q(t) = Q(t_0) \exp\left\{-\frac{t-t_0}{\tau_R}\right\} \quad (50)$$

con

$$\tau_R \equiv \frac{\hbar}{\Gamma_R} \quad (51)$$

Le considerazioni fatte per il caso lineare $\alpha = 0$ trovano piena conferma nella Fig. 9 In essa i risultati delle simulazioni in Fig. 8 sono rielaborati in modo da riportare in ordinata la quantità $\sqrt{-\ln[Q(t)/Q(t_0)]}$. Quando la legge indicata nella Eq. 46 è soddisfatta, il grafico deve rappresentare la retta $|t-t_0|/\tau_0$. Ciò si verifica

nel caso $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$. Negli altri casi questo capita solo durante la crescita della carica, *i.e.* per $t < t_0$. Per $\Gamma_0 \gg \Gamma_R$ la decrescita della carica segue la legge indicata nella Eq. 50, in base alla quale è la quantità $-\ln[Q(t)/Q(t_0)]$ ad andare linearmente come $(t - t_0)/\tau_R$.

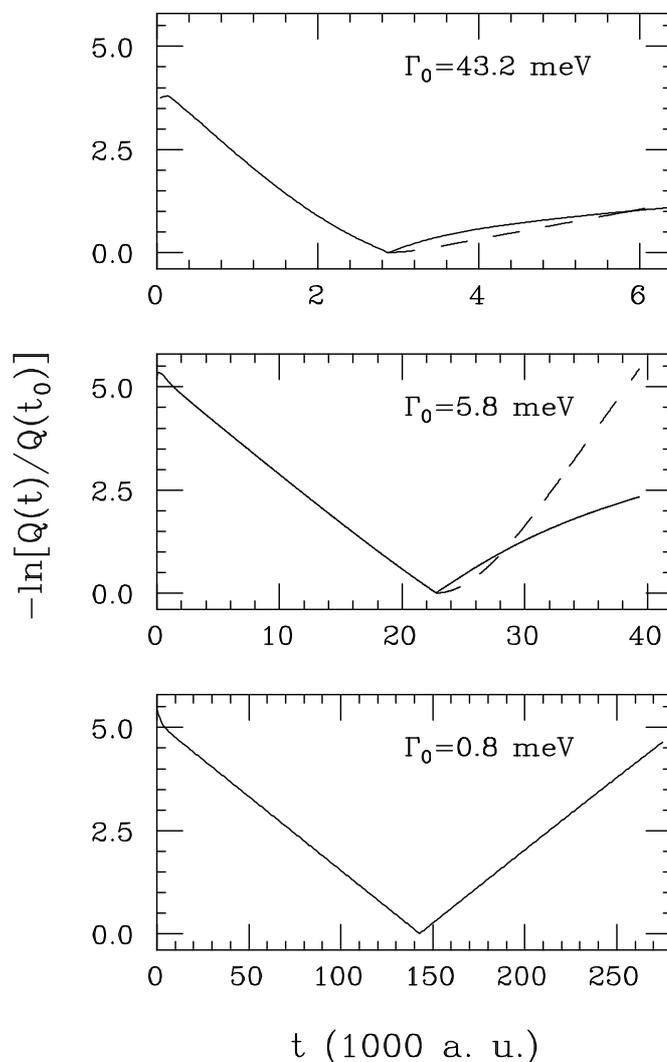


Figura 9. Andamento della indicata funzione della carica nel caso $\alpha = 0$. t_0 è l'istante in cui $Q(t)$ assume il valore massimo. Le porzioni tratteggiate mostrano l'andamento di $-\ln[Q(t)/Q(t_0)]$.

Esaurito il caso lineare si consideri ora la situazione in cui $\alpha \neq 0$. I fenomeni da interpretare sono due: in talune circostanze la carica oscilla nel tempo e sempre assume valori minori del corrispettivo caso lineare.

La questione della diminuzione della carica rispetto al caso lineare e al crescere

del parametro α è una ovvia conseguenza del termine di interazione. La nuvola elettronica si avvicina alla doppia barriera di potenziale in condizioni di risonanza $E_0 = E_R$. Il potenziale di interazione $W(x, t)$ rompe tale condizione spostando le risonanze. La trasmissione fuori risonanza, come mostrato nella Fig. 6, diventa estremamente inefficiente e quindi una minore quantità di carica risulta presente ad ogni istante nella buca rispetto al caso risonante.

La dipendenza del valore della carica $Q(t)$ dai parametri Γ_0 e α può essere ottenuta ragionando in termini di una carica costante Q . Questa definisca il problema di scattering stazionario in cui il fondo della buca del potenziale $V(x)$ sia fissato al valore

$$V_Q = \alpha V_0 \frac{Q}{Q_0} \quad (52)$$

Tale problema è ancora risolto nella Appendice A per $V_1 = V_Q$. Si supponga, inoltre, che il modulo quadrato dello stato iniziale $|\psi(k, 0)|^2$ descriva il contenuto spettrale di una corrente stazionaria di elettroni che si propagano in direzione della doppia barriera. Tale corrente darebbe luogo ad una quantità di carica nella buca pari a

$$Q(V_Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk |\psi(k, 0)|^2 \left[\int_b^c dx |\phi_k(x)|^2 \right] \quad (53)$$

in cui la dipendenza da V_Q è dovuta all'integrale tra parentesi quadre. La condizione iniziale $\psi(k, 0)$, *i.e.* Γ_0 , e il valore del parametro α determinano univocamente la carica Q se si impone la relazione di autoconsistenza

$$\frac{V_Q}{\alpha V_0} = \frac{Q(V_Q)}{Q_0} \quad (54)$$

Si consideri, ora, la situazione non stazionaria. Se con Q si intende, ad esempio, il massimo valore raggiunto dalla carica $Q(t)$ nel corso del tempo, si può tentare di scrivere una relazione di autoconsistenza del tipo

$$\frac{V_Q}{\alpha V_0} = \gamma \frac{Q(V_Q)}{Q_0} \quad (55)$$

Fissando la costante γ nel caso lineare $\alpha = 0$ in modo tale che Q abbia il giusto valore dedotto dalle simulazioni numeriche, l'Eq. 55 permette di prevedere Q per

$\alpha \neq 0$. Tale equazione è risolta per via grafica nella Fig. 10 ottenuta calcolando numericamente l'integrale in k contenuto nella Eq. 53. I punti di incontro delle rette $V_Q/\alpha V_0$ con le curve $\gamma Q(V_Q)/Q_0$ costituiscono le predizioni per i massimi valori di $Q(t)/Q_0$ registrati nella Fig. 8. Come si può osservare, l'andamento di Q in funzione di α e Γ_0 è in pieno accordo con i risultati delle simulazioni.

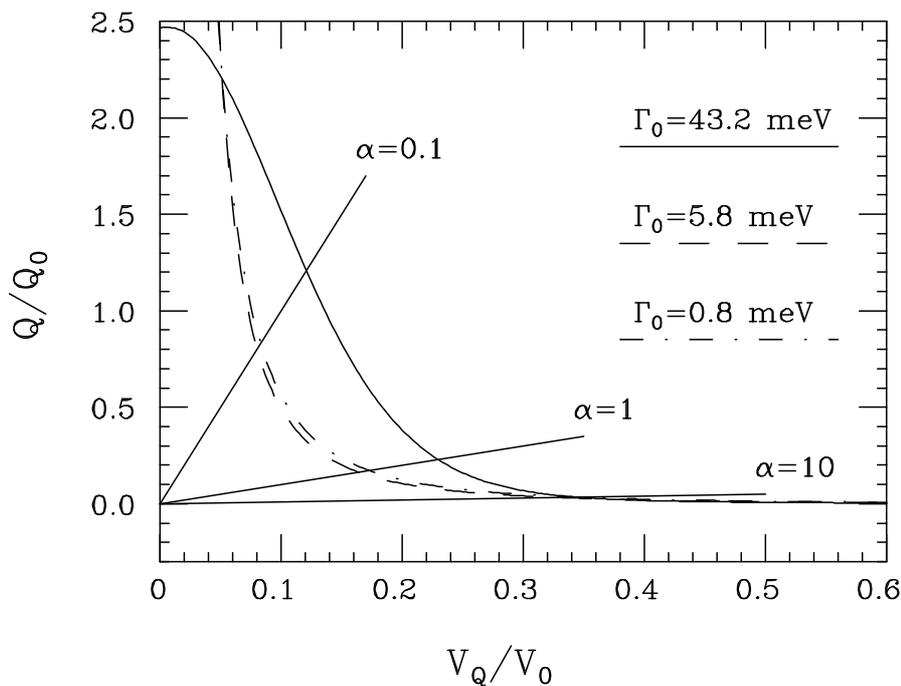


Figura 10. Stima autoconsistente della carica massima presente nella buca per differenti valori dei parametri α e Γ_0 .

Rimane da interpretare il fenomeno delle oscillazioni. Le considerazioni precedentemente svolte aiutano a far luce sulla questione. Nel caso lineare si è visto che crescita e decrescita della carica possono avvenire con costanti di tempo e leggi differenti quando $\Gamma_0 \geq \Gamma_R$. Si può tentare, quindi, di interpretare il fenomeno delle oscillazioni in termini della competizione di due processi: *a*) il riempimento della buca da parte del pacchetto d'onde incidente e *b*) il naturale decadimento della carica in essa presente. In opportune circostanze i due processi possono essere alternativamente prevalenti in modo tale da generare oscillazioni della carica $Q(t)$.

Per indagare la possibilità di oscillazioni occorre innanzitutto stimare l'efficacia dei processi *a*) e *b*). In analogia con il caso lineare si può pensare che essi avvengano

con leggi di tipo esponenziale, non importa se lineari o quadratiche per la stima che qui si vuole fare, caratterizzate da costanti di tempo τ_{in} e τ_{out} . Per comodità è più opportuno parlare di *larghezze*, proporzionali ai tassi di crescita e decrescita, $\Gamma_{in} = \hbar/\tau_{in}$ e $\Gamma_{out} = \hbar/\tau_{out}$. Il processo di caricamento non può andare molto diversamente dal caso lineare. Esso, infatti, è determinato più dal moto libero del pacchetto d'onde incidente che dalle condizioni di risonanza o fuori risonanza di quest'ultimo. La Fig. 9 mostra che Γ_0 costituisce una buona stima per Γ_{in} indipendentemente dal tipo di stato iniziale e dal valore assunto dalla carica. L'entità del processo di decadimento può essere, invece, sensibilmente dipendente dal valore della carica stessa. L'Eq. 53 rappresenta una stima della distribuzione spettrale della carica in funzione del valore V_Q del potenziale di interazione. La larghezza a metà altezza della funzione integranda nella Eq. 53, che verrà indicata come $\eta(k)$, può essere presa a rappresentare Γ_{out} . Naturalmente $\Gamma_{out} = \Gamma_{out}(V_Q)$.

Nel caso lineare $V_Q = 0$ il processo di caricamento, finché presente, domina sempre quello di decadimento e non si hanno oscillazioni. Ciò è una conseguenza del valore di Γ_{out} a $V_Q = 0$. La funzione $\eta(k)$ è in questo caso il prodotto del modulo quadrato della trasformata di Fourier del pacchetto incidente e della funzione $|\beta(k)|^2$ precedentemente analizzata. Passando alla variabile energia si ha

$$\eta(E) \propto \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_0/2} \right)^2 \right] \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_R}{\Gamma_R/2} \right)^2} \quad (56)$$

avendo approssimato l'esponenziale $|\psi(E, 0)|^2$ con la parabola tra parentesi quadre. Sfruttando la condizione di risonanza $E_0 = E_R$, si ricava immediatamente la larghezza a metà altezza di $\eta(E)$ che rappresenta $\Gamma_{out}(V_Q = 0)$

$$\Gamma_{out}(V_Q = 0) = \frac{\Gamma_0 \Gamma_R}{\sqrt{\Gamma_0^2 + \Gamma_R^2}} \quad (57)$$

Tale quantità è sempre più piccola di $\Gamma_{in} = \Gamma_0$, *i.e.* il processo di caricamento, finché dura, è dominante.

Nel caso non lineare V_Q può assumere valori tali da modificare sostanzialmente la larghezza della funzione spettrale $\eta(E)$. A causa della forma di $\eta(E)$ ciò può avvenire solo quando il pacchetto incidente non è troppo monocromatico. Per i casi precedentemente analizzati le cose vanno come mostrato nella Fig. 11. Si consideri innanzitutto il caso $\Gamma_0 = 43.2 \text{ meV}$. Per $V_Q \leq 0.3 V_0$ Γ_{out} è minore di Γ_{in} . Quando V_Q supera tale valore la situazione si rovescia. Facendo riferimento alla Fig. 10 si vede che il valore critico $V_Q/V_0 \simeq 0.3$ è raggiunto per $\alpha > 1$. Oscillazioni sono dunque assenti per $\alpha \leq 1$ e presenti per valori maggiori di α . Ciò è quanto capita nelle simulazioni della Fig. 8. Nel caso $\Gamma_0 \simeq 5.8 \text{ meV}$ il valore critico di V_Q/V_0 a cui capita l'inversione di prevalenza tra Γ_{in} e Γ_{out} è molto più piccolo, circa 0.04. La Fig. 10 predice, correttamente, che in tutte le simulazioni della Fig. 8 le oscillazioni devono essere presenti. Le oscillazioni spariscono per un valore molto piccolo di α , circa 0.001, non riportato nella Fig. 8. Nel caso $\Gamma_0 = 0.8 \text{ meV}$, infine, una netta inversione di prevalenza tra Γ_{in} e Γ_{out} è assente. A parte una variazione di intensità la carica evolve nel tempo non troppo diversamente dal caso lineare per ogni valore di α .

Le considerazioni fatte sono di natura generale. Le oscillazioni sono assenti per nuvole elettroniche molto monocromatiche, *i.e.* $\Gamma_0 \ll \Gamma_R$. Per $\Gamma_0 \geq \Gamma_R$ oscillazioni compaiono quando α ha un valore abbastanza elevato, *e.g.* la densità N/L^2 della nuvola elettronica è sufficientemente grande.

Naturalmente la forma precisa delle oscillazioni di $Q(t)$ non può essere prevista sulla base dei semplici ragionamenti precedenti. Solo la valutazione analitica della soluzione formale mostrata nella Eq. 27 permetterebbe di fare progressi in questo senso. Tuttavia, i risultati delle simulazioni numeriche sono approssimativamente descritti da una legge empirica del tipo

$$Q(t) = f(t) \sin^2 \left[\frac{1}{2} \int_0^t dt' \frac{V_Q(t')}{\hbar} \right] \quad (58)$$

dove $f(t)$ ha un andamento non oscillante simile a quello assunto dalla carica stessa quando l'interazione è trascurata. I massimi e i minimi presentati dalla ca-

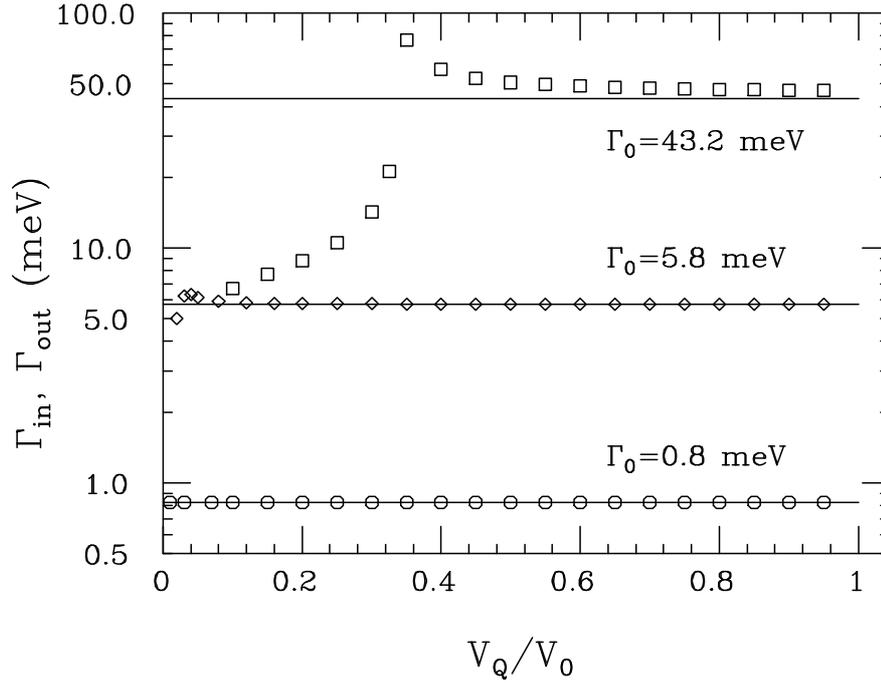


Figura 11. Confronto delle larghezze Γ_{in} (linee continue) e Γ_{out} (quadrati, losanghe e cerchi) per differenti dispersioni Γ_0 . Γ_{out} , proporzionale al tasso di decadimento della carica, dipende dal valore di quest'ultima. Γ_{in} è costante.

rica $Q(t)$ nella Fig. 8 capitano quando la funzione integrale mostrata nella Eq. 58 assume un valore circa uguale ad un numero intero, rispettivamente, dispari o pari di π . L'Eq. 58 riproduce correttamente l'aumentare del numero di oscillazioni al crescere del parametro α . Infine, essa mostra che le oscillazioni non costituiscono un fenomeno periodico nel senso stretto del termine. Ciò è confermato dalla analisi spettrale delle simulazioni della Fig. 8 dalla quale non si evidenzia nessuna singola frequenza caratteristica ma, piuttosto, una banda continua di frequenze componenti.

3. OSCILLAZIONI NEI SISTEMI FISICI

L'analisi fin qui svolta ha teso ad evidenziare i punti cruciali che caratterizzano l'evoluzione temporale di una nuvola di elettroni propagantesi attraverso una eterostruttura semiconduttrice. In questo quadro il potenziale di interazione elettronica è stato sostituito con un potenziale efficace più semplice. Investigare la possibilità di una verifica sperimentale del fenomeno delle oscillazioni di carica richiede un calcolo maggiormente realistico. A tale scopo è dedicata la prima parte del presente capitolo. I risultati confermano quanto ottenuto con il modello a potenziale di interazione efficace mostrando tempi caratteristici di oscillazione alla portata delle tecniche di misura ottiche.

Nella seconda parte si illustra il comportamento di alcuni sistemi complessi. È il caso, ad esempio, di eterostrutture che presentino più livelli risonanti. Oppure il caso di eterostrutture magnetiche, nelle quali lo spin dei portatori di carica diventa una variabile importante. In entrambe queste situazioni il fenomeno delle oscillazioni si manifesta in accordo con lo schema interpretativo proposto nel capitolo precedente.

3.1 CALCOLO REALISTICO

Si potrebbe pensare che il comportamento dinamico nel tunneling risonante di una nuvola di elettroni evidenziato nel capitolo 2 sia un effetto del modello impiegato. Le cose non stanno assolutamente così. Sono state effettuate un gran numero di *prove di stabilità* il cui esito conferma i risultati trovati.

La scelta della forma gaussiana per lo stato iniziale sembra abbastanza ragionevole. Ma non è sicuramente l'unica scelta possibile. Simulazioni numeriche,

nelle quali la densità longitudinale della nuvola elettronica differisce da una gaussiana, presentano, tuttavia, comportamenti dinamici simili a quelli della Fig. 8. Anche l'aggiunta di fattori modulanti spazialmente tale densità, ad esempio rappresentanti effetti reticolari, non alterano il comportamento della nuvola durante il tunneling e la presenza delle oscillazioni.

Il potenziale efficace a doppia barriera della eterostruttura $V(x)$, per quanto rozzo e per certi versi, come notato nel capitolo 1, insoddisfacente, riproduce egregiamente le proprietà di risonanza. Un gran numero di verifiche sperimentali assicurano la validità di una simile schematizzazione⁶.

Rimane, infine, da provare la robustezza del potenziale di interazione efficace introdotto nella Eq. 19. La scelta di questa forma per il potenziale di interazione è stata dettata dalla volontà di ottenere i principali effetti fisici semplificando al massimo la loro analisi matematica. Una volta riconosciuti e interpretati tali effetti non è particolarmente gravoso, da un punto di vista numerico, evitare l'uso del potenziale efficace e fare ricorso a quello più fisico dettato dalla equazione di Poisson. Al tempo stesso i vari parametri analizzati nel capitolo 2 possono essere fissati in modo da risultare rilevanti da un punto di vista sperimentale.

Un esempio di calcolo realistico è riportato nella Fig. 12. Le dimensioni della eterostruttura analizzata sono comuni nella prassi sperimentale. In riferimento alla Fig. 4 si sono considerate barriere spesse 50 \AA ed alte 0.3 eV . Le barriere sono separate da una distanza di 40 \AA . Agli elettroni è stata assegnata una massa efficace $m^* = 0.067 m$ dove m è la massa elettronica vera. Il sistema così configurato verosimilmente riproduce una eterogiunzione $GaAs - Ga_{0.7}Al_{0.3}As^3$. È presente un solo stato risonante ad energia $E_R \simeq 0.11 \text{ eV}$ con una larghezza $\Gamma_R \simeq 1 \text{ meV}$. La densità trasversale della nuvola elettronica è assunta di 10^{15} cm^{-2} e quella longitudinale di tipo gaussiano con una semilarghezza, si veda l'Eq. 24, $\sigma = 423 \text{ \AA}$.

La densità elettronica della nuvola all'istante iniziale risulta perciò

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{r}, 0) &= \frac{N/L^2}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left\{-\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2\right\} \\ &\simeq 10^{20} \exp\left\{-\left(\frac{x-x_0}{\sigma}\right)^2\right\} \text{ cm}^{-3}\end{aligned}\quad (59)$$

L'energia cinetica media longitudinale degli elettroni è scelta prossima alla risonanza: $E_0 = E_R \simeq 0.11 \text{ meV}$. La dispersione Γ_0 risulta perciò fissata e pari a circa 15 meV .

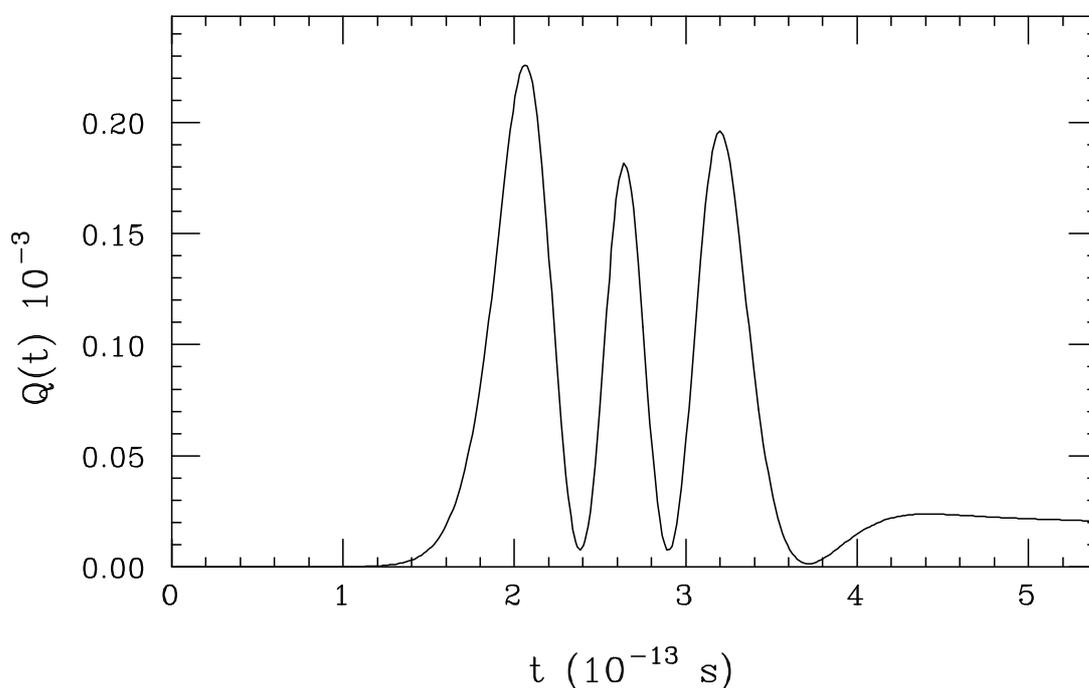


Figura 12. Calcolo realistico della evoluzione temporale della carica di singola particella presente nella buca, in frazioni della carica elettronica, per una densità trasversale di 10^{15} elettroni/cm².

L'interazione tra gli elettroni è stata calcolata risolvendo ad ogni istante l'equazione di Poisson a partire dalla densità iniziale mostrata nella Eq. 59. Invece di passare alla trasformata di Fourier come indicato nella Eq. 16, si è risolta l'equazione di Poisson nello spazio reale

$$\frac{d^2}{dx^2} W(x, t) = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon} (N/L^2) |\psi(x, t)|^2 \quad (60)$$

con la condizione $W(x \leq a, t) = W(x \geq d, t) = 0$ ed ε costante. Questa procedura corrisponde a considerare una situazione fisica in cui le zone $x \leq a$ e $x \geq d$ sono metalliche con lunghezza di schermaggio nulla. Nella zona $a < x < d$ la lunghezza di schermaggio è considerata infinita e le variazioni nella costante dielettrica tra la buca e le barriere trascurate. Il valore assunto, $\varepsilon = 13$, è adeguato per il materiale $GaAs^3$.

L'analisi della Fig. 12 conferma in pieno la validità delle approssimazioni fatte nel capitolo 2. La carica presenta delle oscillazioni addirittura più nette di quelle ottenute nelle simulazioni con il potenziale di interazione efficace. Il numero delle oscillazioni, mantenendo inalterate le caratteristiche della eterostruttura, può essere aumentato o diminuito variando nella stessa direzione la densità elettronica trasversale N/L^2 . Nella Fig. 12 il tempo caratteristico di ogni oscillazione è dell'ordine di 10^{-13} secondi.

I risultati riportati alimentano la speranza che sia possibile ottenere una conferma sperimentale del fenomeno analizzato. Il trasporto balistico di nuvole elettroniche è comunemente realizzato inserendo una eterostruttura a doppia barriera nella base di un transistor unipolare⁴⁶. Più problematico può risultare il raggiungimento della necessaria risoluzione temporale per la misura delle oscillazioni. È possibile però immaginare situazioni in cui le oscillazioni di carica siano rallentate di almeno un ordine di grandezza rispetto a quanto mostrato nella Fig. 12. Sulla base delle considerazioni svolte nel capitolo 2 le oscillazioni si instaurano durante il caricamento della buca da parte della nuvola incidente, *i.e.* su una scala di tempi \hbar/Γ_0 . È necessario allora rendere Γ_0 piccolo agendo sul meccanismo di preparazione della nuvola elettronica. Al tempo stesso però occorre diminuire Γ_R , aumentando ad esempio la distanza tra le barriere, in modo tale da mantenere la condizione $\Gamma_0 \geq \Gamma_R$ necessaria per la presenza delle oscillazioni. Il restringimento di Γ_R non può essere tuttavia eccessivo. Una risonanza più stretta implica il tunneling di una minore quantità di carica e quindi effetti di interazione più deboli. L'ottimizzazione di tutti questi parametri è in grado di rendere la misurazione delle oscillazioni alla portata delle tecniche di campionamento elettro-ottiche la cui risoluzione arriva fino

a qualche decimo di picosecondo^{41,56}.

3.2 RISONANZE MULTIPLE

Finora, per semplicità, sono sempre stati considerati casi in cui il potenziale efficace a doppia barriera della eterostruttura ammette una sola risonanza nel coefficiente di trasmissione. In molte realizzazioni sperimentali si hanno, tuttavia, più risonanze. È evidente che in queste situazioni possono registrarsi comportamenti dinamici più complicati di quelli incontrati in precedenza.

Per concretezza si consideri il caso di due risonanze ad energie $E_{R1} < E_{R2}$. È regola generale che la risonanza ad energia più bassa possieda una larghezza Γ_{R1} nel coefficiente di trasmissione minore di quella Γ_{R2} della seconda. Per quanto visto in precedenza, nuvole elettroniche che si propagano nella eterostruttura attraverso l'una o l'altra risonanza presentano tempi caratteristici di oscillazione differenti, in quanto differente risulta nei due casi il rapporto Γ_0/Γ_R che li determina.

È possibile immaginare situazioni in cui, a causa degli effetti di interazione, la trasmissione degli elettroni avvenga attraverso entrambe le risonanze con la generazione contemporanea di due tipi di oscillazioni. Questa possibilità è stata indagata nell'ambito del modello a potenziale efficace discusso nel capitolo 2. Un esempio dei comportamenti riscontrabili è mostrato nella Fig. 13 la cui interpretazione può essere ottenuta con l'aiuto della Fig. 14. Il caso analizzato si riferisce ad una eterostruttura del tutto identica a quella considerata nelle simulazioni del capitolo 2 ma con la distanza tra le barriere aumentata da 15 a 35 a_0 . La maggiore ampiezza della buca permette la presenza di due risonanze ad energie $E_{R1} \simeq 0.06 \text{ eV}$ ed $E_{R2} \simeq 0.21 \text{ eV}$ le cui larghezze sono rispettivamente $\Gamma_{R1} \simeq 0.2 \text{ meV}$ e $\Gamma_{R2} \simeq 3.8 \text{ meV}$. Lo stato elettronico iniziale possiede una energia cinetica media longitudinale $E_0 = E_{R2}$ uguale alla risonanza superiore ed una dispersione $\Gamma_0 = 5.6 \text{ meV}$ maggiore di entrambe le larghezze di risonanza e molto minore della loro loro distanza $E_{R2} - E_{R1}$.

Quando il parametro α che regola l'intensità del potenziale efficace di interazione ha un valore più piccolo di un certo valore critico, ad esempio $\alpha = 1$, come

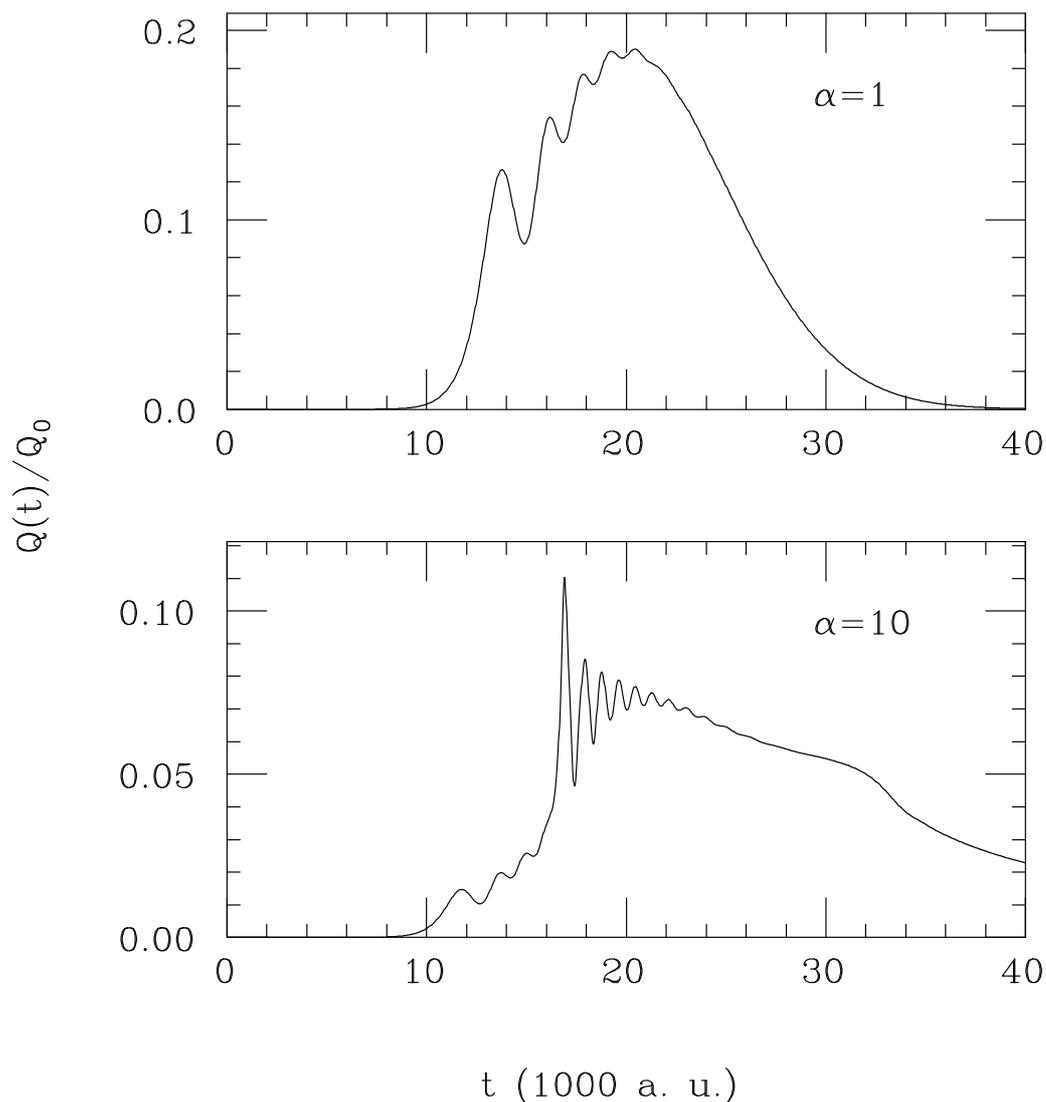


Figura 13. Evoluzione temporale della carica $Q(t)$ in presenza di una doppia risonanza per due diversi valori della costante fenomenologica α .

mostrato nella Fig. 13, la carica presenta un andamento oscillante simile a quello delle simulazioni con una sola risonanza. Se però il valore del parametro viene aumentato, ad esempio $\alpha = 10$, si genera un doppio comportamento oscillante. Più esattamente all'inizio si hanno oscillazioni simili a quelle del caso precedente poi, repentinamente, si instaura una oscillazione più intensa e rapida.

Il comportamento descritto è interpretabile sulla base dello schema proposto nel capitolo 2. Nella parte a) della Fig. 14 è mostrata la stima autoconsistente dei massimi valori di $Q(t)$ ottenuta in base alla Eq. 55. La curva descritta dalla Eq. 53

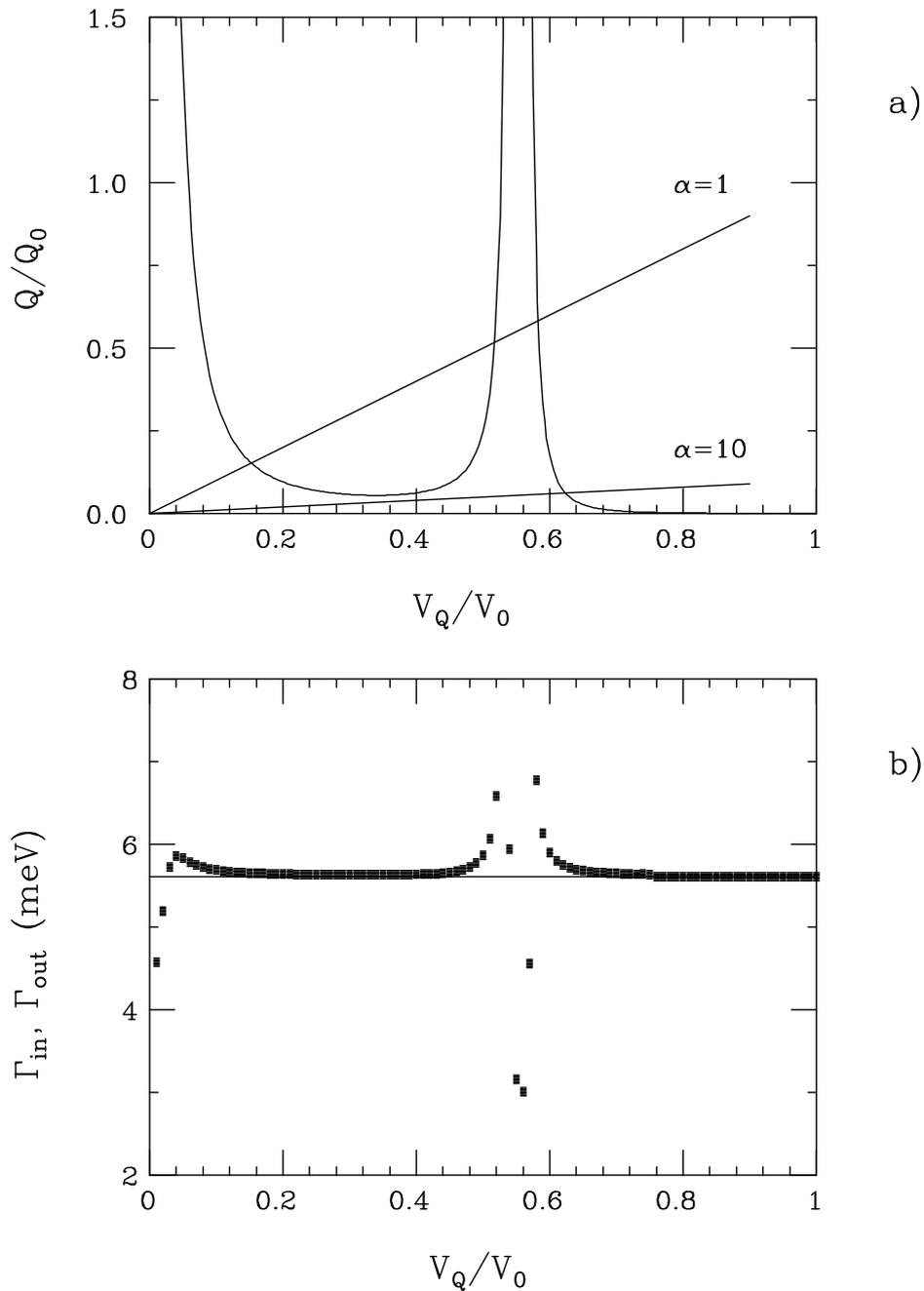


Figura 14. a) Stima autoconsistente della carica massima presente nella buca. b) Confronto delle larghezze Γ_{in} (linea continua) e Γ_{out} (punti). Sia a) che b) si riferiscono al caso delle simulazioni riportate nella precedente figura.

presenta ora due massimi in accordo con il fatto che l'integrale in x che in essa compare è proporzionale al coefficiente di trasmissione della doppia barriera che ha due risonanze. La retta corrispondente ad $\alpha = 10$ interseca tale curva in un solo

punto e fornisce una stima $Q/Q_0 \simeq 0.1$ in accordo con la simulazione della Fig. 13. Nel caso $\alpha = 1$ si hanno tre punti di intersezione. Il primo a $Q/Q_0 \simeq 0.15$ è quello che fornisce la giusta stima della carica massima registrata nella corrispondente simulazione. La parte b) della Fig. 14 permette di interpretare il comportamento oscillante della carica. A differenza del caso di una sola risonanza ora le larghezze Γ_{in} e Γ_{out} , proporzionali ai tassi di crescita e decrescita della carica, mostrano una doppia inversione di prevalenza. Una prima inversione, analoga al caso di una sola risonanza, capita per $V_Q/V_0 \simeq 0.02$. La seconda, dovuta alla presenza della risonanza ad energia E_{R1} , è ottenuta per $V_Q/V_0 \simeq 0.55$. La differenza tra i casi $\alpha = 1$ e $\alpha = 10$ è allora presto spiegata. Nel caso $\alpha = 1$ la massima carica intrappolabile nella buca permette di raggiungere solo la prima inversione di prevalenza tra Γ_{in} e Γ_{out} . Si hanno oscillazioni di un solo tipo con un tempo caratteristico dettato dal rapporto Γ_0/Γ_{R2} . Nel caso $\alpha = 10$ la carica può andare fino ad un valore massimo che permette di raggiungere entrambi i punti di inversione tra Γ_{in} e Γ_{out} . Di conseguenza all'inizio sono presenti oscillazioni analoghe a quelle del caso precedente. Poi, quando $Q(t)/Q_0 \simeq 0.055$ e quindi $V_Q(t)/V_0 \simeq 0.55$, viene raggiunto il secondo punto di inversione e si forma un altro tipo di oscillazioni con un tempo caratteristico deciso da Γ_0/Γ_{R1} più piccolo del precedente.

La transizione dal primo tipo di oscillazioni al secondo tipo avviene in corrispondenza ad un rapido aumento della carica $Q(t)$. Tale comportamento è interpretabile in termini di un effetto di *feedback* positivo prodotto dal potenziale di interazione. Alla fine della serie di oscillazioni del primo tipo il sistema si trova in una condizione di minima trasmissione con le due risonanze ad energia una minore e l'altra maggiore rispetto all'energia cinetica media E_0 degli elettroni incidenti. In questa situazione un aumento della carica $Q(t)$ intrappolata nella buca induce, tramite il potenziale W , un avvicinamento ad E_0 della risonanza ad energia minore. La probabilità di trasmissione cresce e quindi si ha un ulteriore aumento di $Q(t)$.

Gli effetti descritti sono una minima parte degli innumerevoli giochi di composizione che l'architettura quantistica delle eterostrutture permette di ideare. Inoltre, vale la pena di sottolineare che non è necessario eseguire esplicitamente le simula-

zioni numeriche per ottenere l'andamento qualitativo della carica. Lo schema interpretativo riassunto nella Fig. 14 consente letteralmente di cercare gli effetti dinamici desiderati sulla base della sola conoscenza delle proprietà di scattering stazionarie del sistema in esame.

3.3 SISTEMI MAGNETICI

Nella analisi svolta fino a questo punto si è assunto che i materiali componenti le microstrutture semiconduttrici siano non magnetici. Essendo gli effetti relativistici del tutto trascurabili, questo ha permesso di ignorare lo spin degli elettroni. Recentemente, tuttavia, le eterostrutture di tipo magnetico hanno suscitato notevole interesse proprio a causa degli effetti dipendenti dallo spin che in esse possono avere luogo⁵⁷.

Il tunneling di una nuvola di elettroni attraverso una eterostruttura di tipo magnetico può essere descritto attribuendo a quest'ultima una coppia di potenziali efficaci $V^\pm(x)$. Gli elettroni nello stato di spin $+$ vedono l'eterostruttura magnetica come un potenziale efficace $V^+(x)$ e viceversa. Questo ha naturalmente delle conseguenze già sulle proprietà di tunneling stazionarie. L'energia di ogni risonanza E_R^\pm risulta, infatti, dipendente dallo stato di spin ed è possibile ottenere, a tunneling avvenuto, una polarizzazione del fascio elettronico incidente.

Quando gli effetti di interazione sono presi in considerazione e si analizza dinamicamente il processo di tunneling, gli eventuali fenomeni di polarizzazione diventano dipendenti dal tempo. Un esempio è mostrato nella Fig. 15. La situazione considerata è del tutto identica a quella relativa alla Fig. 8 nel caso $\Gamma_0 = 43.2 \text{ meV}$, $\alpha = 10$, salvo per il fatto che ora il materiale della regione compresa tra b e c nella Fig. 4 è di tipo magnetico. I potenziali efficaci $V^\pm(x)$ sono supposti identici al potenziale $V(x)$ definito nella Eq. 18 a meno di una variazione di livello nella regione magnetica

$$V^\pm(x) = V(x) \pm \Delta V \theta(x - b)\theta(c - x) \quad (61)$$

Nella Fig. 15 si considera $\Delta V = 30 \text{ meV}$.

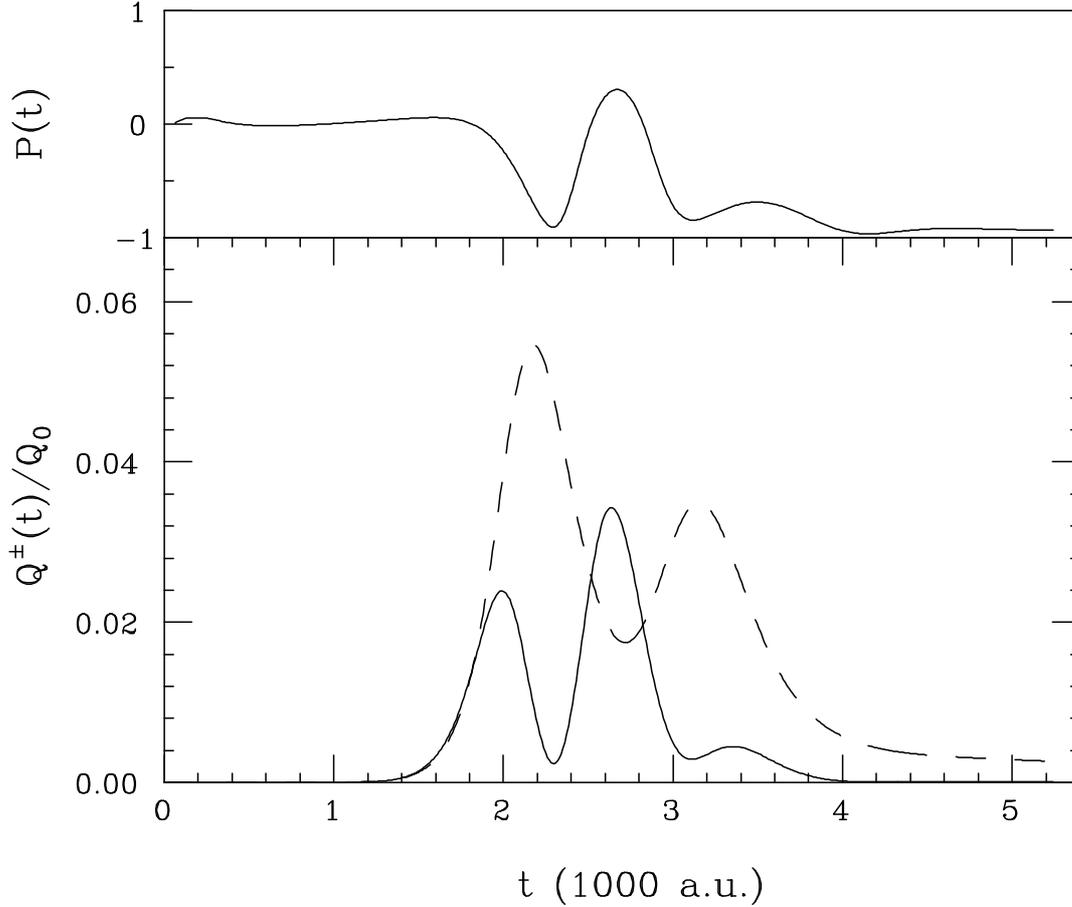


Figura 15. Evoluzione temporale delle cariche $Q^+(t)$ (linea continua) e $Q^-(t)$ (linea tratteggiata) attraverso una eterostruttura magnetica. L'andamento della polarizzazione $P(t)$ è mostrato nel riquadro in alto.

La nuvola elettronica è assunta, all'istante $t = 0$, non polarizzata. $N/2$ elettroni si trovano nello stato spinoriale di singola particella

$$\begin{pmatrix} \psi^+(x, 0) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (62)$$

e l'altra metà nello stato

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \psi^-(x, 0) \end{pmatrix} \quad (63)$$

dove $\psi^\pm(x, 0)$ sono ancora date dalla Eq. 24. Trascurando l'interazione spin-spin tra gli elettroni, le componenti $\psi^\pm(x, t)$ evolvono ciascuna secondo l'Eq. 15 con $V(x)$ sostituito da $V^\pm(x)$. Il termine di interazione elettrostatica $W(x, t)$ è ancora

scrivibile nella forma della Eq. 19 purché

$$Q(t) = Q^+(t) + Q^-(t) \quad (64)$$

con

$$Q^\pm(t) \equiv \int_b^c dx |\psi^\pm(x, t)|^2 \quad (65)$$

La polarizzazione netta della carica presente nella buca

$$P(t) \equiv \frac{Q^+(t) - Q^-(t)}{Q^+(t) + Q^-(t)} \quad (66)$$

varia nel tempo. Nella Fig. 15 gli elettroni partono in condizioni di fuori risonanza $E_0 = (E_R^+ + E_R^-)/2$. In assenza del termine di interazione ed essendo $\Delta V \gg \Gamma_R^\pm$ si avrebbe una trasmissione minima con $P(t) \simeq 0$. La presenza di $W(x, t)$ produce un aumento di trasmissione per entrambe le componenti $Q^\pm(t)$ con una polarizzazione di tipo oscillante.

Un esperimento del tipo di quello descritto nel Rif. 57 dovrebbe essere in grado di evidenziare le previste oscillazioni di polarizzazione. La carica intrappolata nella buca, irraggiata da un laser ad impulsi, genera radiazione di luminescenza il cui grado di polarizzazione può essere preso a misura di $P(t)$. La risoluzione di 150 fs ottenuta sperimentalmente⁵⁷ non è troppo lontana dai tempi caratteristici mostrati nella Fig. 15.

Appendice A. DOPPIA BARRIERA DI POTENZIALE

In questa appendice viene risolta l'equazione di Schrödinger stazionaria

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\phi(x) = 0 \quad (67)$$

per un potenziale unidimensionale costante a tratti del tipo:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < a \\ V_0 & a \leq x < b \\ V_1 & b \leq x < c \\ V_0 & c \leq x < d \\ 0 & d \leq x \end{cases} \quad (68)$$

dove $a < b < c < d$ ed inoltre V_0 e V_1 sono positivi. Quando $V_0 > V_1$ il potenziale $V(x)$ assume l'aspetto di una doppia barriera all'interno della quale si trova una buca di profondità $V_0 - V_1$.

L'Eq. 67 presenta per $E \geq 0$ uno spettro continuo e doppiamente degenere. Ad ogni autovalore E corrispondono i due autostati $\phi_k(x)$ e $\phi_{-k}(x)$ con il vettore d'onda k definito da:

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (69)$$

Introducendo i *vettori d'onda* nelle zone a potenziale V_0 e V_1

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (70)$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1)} \quad (71)$$

le autofunzioni $\phi_k(x)$ sono esprimibili nel seguente modo:

$$\phi_k(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \begin{cases} e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} & x < a \\ A^+(k)e^{k_0x} + A^-(k)e^{-k_0x} & a \leq x < b \\ B^+(k)e^{ik_1x} + B^-(k)e^{-ik_1x} & b \leq x < c \\ C^+(k)e^{k_0x} + C^-(k)e^{-k_0x} & c \leq x < d \\ t(k)e^{ikx} & d \leq x \end{cases} \quad (72)$$

In questa forma lo stato $+k$ descrive lo scattering stazionario di una particella proveniente da $x = -\infty$ con impulso $\hbar k$. La costante di normalizzazione è scelta in modo tale che le autofunzioni siano ortogonalizzate rispetto al vettore d'onda⁵⁸:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_k(x)^* \phi_{k'}(x) = \delta(k - k') \quad (73)$$

La particella viene riflessa o trasmessa rispettivamente con probabilità

$$\begin{aligned} R(k) &= |r(k)|^2 \\ T(k) &= |t(k)|^2 \end{aligned} \quad (74)$$

L'equazione di continuità per il flusso di particelle impone ai coefficienti di riflessione, $R(k)$, e trasmissione, $T(k)$, di soddisfare la regola di normalizzazione per le probabilità

$$R(k) + T(k) = 1 \quad (75)$$

Le ampiezze di riflessione, $r(k)$, e di trasmissione, $t(k)$, sono determinate insieme con i coefficienti $A^\pm(k)$, $B^\pm(k)$ e $C^\pm(k)$ imponendo la continuità delle autofunzioni e delle loro derivate prime nei punti di discontinuità del potenziale. Il risultato dell'operazione di raccordo fornisce:

$$t(k) = \frac{16kk_1k_0^2}{f_-(k) - f_+(k)} e^{-ik(d-a)} \quad (76)$$

dove

$$f_{\pm}(k) = e^{\mp k_0(b-a)}(k_0 \pm ik) \cdot \left[e^{-ik_1(c-b)}(k_0 \pm ik_1)g_+(k) + e^{+ik_1(c-b)}(k_0 \mp ik_1)g_-(k) \right] \quad (77)$$

$$g_{\pm}(k) = e^{\mp k_0(d-c)}(k_0 + ik_1)(k_0 \pm ik) - e^{\pm k_0(d-c)}(k_0 - ik_1)(k_0 \mp ik) \quad (78)$$

Da questo seguono gli altri coefficienti

$$C^{\pm}(k) = \frac{e^{\mp k_0 d}}{2k_0} t(k) e^{ikd} (k_0 \pm ik) \quad (79)$$

$$B^{\pm}(k) = \frac{e^{\mp ik_1 c}}{2ik_1} \left[C^+(k) e^{k_0 c} (ik_1 \pm k_0) + C^-(k) e^{-k_0 c} (ik_1 \mp k_0) \right] \quad (80)$$

$$A^{\pm}(k) = \frac{e^{\mp k_0 b}}{2k_0} \left[B^+(k) e^{ik_1 b} (k_0 \pm ik_1) + B^-(k) e^{-ik_1 b} (k_0 \mp ik_1) \right] \quad (81)$$

$$r(k) = \frac{e^{ika}}{2ik} \left[A^+(k) e^{k_0 a} (ik - k_0) + A^-(k) e^{-k_0 a} (ik + k_0) \right] \quad (82)$$

Interessa infine valutare la sovrapposizione di due autostati k e k' nella regione tra b e c . Facendo uso della Eq. 72 e della Eq. 80 si ricava immediatamente

$$\int_b^c dx \phi_k(x)^* \phi_{k'}(x) = p(k, k') \frac{\sin[(k_1 - k'_1)(c - b)/2]}{\pi(k_1 - k'_1)} + q(k, k') \frac{\sin[(k_1 + k'_1)(c - b)/2]}{\pi(k_1 + k'_1)} \quad (83)$$

con

$$p(k, k') = B^+(k)^* B^+(k') e^{-i(k_1 - k'_1)(c+b)/2} + B^-(k)^* B^-(k') e^{i(k_1 - k'_1)(c+b)/2} \quad (84)$$

$$q(k, k') = B^+(k)^* B^-(k') e^{-i(k_1 + k'_1)(c+b)/2} + B^-(k)^* B^+(k') e^{i(k_1 + k'_1)(c+b)/2} \quad (85)$$

dove, analogamente alla Eq. 71, si è definito

$$k'_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E' - V_1)} \quad (86)$$

Nel caso particolare $k' = k$ l'Eq. 83 assume la forma

$$\int_b^c dx |\phi_k(x)|^2 = p(k, k) \frac{c-b}{2\pi} + q(k, k) \frac{\sin[k_1(c-b)]}{2\pi k_1} \quad (87)$$

con

$$p(k, k) = T(k) \frac{(k_0^2 + k^2)(k_1^2 + k_0^2) \cosh[2k_0(d-c)] + (k_0^2 - k^2)(k_1^2 - k_0^2)}{4k_0^2 k_1^2} \quad (88)$$

$$q(k, k) = T(k) \left\{ \sin[k_1(c-b)] \frac{(k_0^2 + k^2) \sinh[2k_0(d-c)]}{k_0 k_1} + \cos[k_1(c-b)] \cdot \right. \\ \left. \cdot \frac{(k_0^2 + k^2)(k_1^2 - k_0^2) \cosh[2k_0(d-c)] + (k_0^2 - k^2)(k_1^2 + k_0^2)}{2k_0^2 k_1^2} \right\} \quad (89)$$

Appendice B. SIMULAZIONE NUMERICA

In questa appendice viene discusso l'algoritmo con cui sono state realizzate le simulazioni numeriche presentate nei capitoli 2 e 3.

Matematicamente il problema consiste nella soluzione di una equazione differenziale alle derivate parziali non lineare del tipo (in unità $\hbar = 2m = 1$):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H([\psi]; x, t) \psi(x, t) \quad (90)$$

dove

$$H([\psi]; x, t) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + W([\psi]; x, t) \quad (91)$$

a partire da una qualche condizione iniziale $\psi(x, 0)$. $V(x)$ è un potenziale confinato in una regione spaziale limitata, ad esempio la doppia barriera descritta nella precedente appendice. $W([\psi]; x, t)$ è reale e possiede una dipendenza funzionale di tipo causale da ψ :

$$W([\psi]; x, t) = W([\psi(t'), t' \leq t]; x, t) \quad (92)$$

Un esempio di tale dipendenza funzionale è dato dalla Eq. 16 in cui $\rho(q_x, t)$ è proporzionale alla trasformata di Fourier di $|\psi(x, t)|^2$.

L'Eq. 90 può essere trasformata in una equazione alle differenze finite simulando il piano $x - t$ mediante un reticolo opportunamente dimensionato⁵⁹. Si supponga che la condizione iniziale $\psi(x, 0)$ corrisponda ad uno stato localizzato ed interessi seguire l'evoluzione temporale di questo stato nell'intervallo di tempo $[0, t_{max}]$ in cui esso interagisce con $V(x)$. Durante tutto l'intervallo $[0, t_{max}]$ lo stato $\psi(x, t)$ può ancora essere considerato localizzato in un opportuno intervallo spaziale

$[x_{min}, x_{max}]$. I punti del rettangolo $[0, t_{max}] \otimes [x_{min}, x_{max}]$ vengono discretizzati secondo la legge:

$$x \rightarrow x_{min} + j\Delta x \quad j = 0, 1, 2, \dots, J + 1 \quad (93)$$

$$t \rightarrow n\Delta t \quad n = 0, 1, 2, \dots, N \quad (94)$$

in cui il numero di punti del reticolo è legato alla spaziatura dello stesso dalle relazioni

$$(J + 1)\Delta x = x_{max} - x_{min} \quad (95)$$

$$N\Delta t = t_{max} \quad (96)$$

L'introduzione del reticolo riduce la funzione d'onda incognita ad una matrice

$$\psi(x, t) \rightarrow \psi_j^n \quad (97)$$

A meno di termini $O(\Delta x^3)$ l'azione dell'operatore H diventa

$$H\psi(x, t) \rightarrow (H\psi)_j^n = -\Delta x^{-2} \left(\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n \right) + V_j \psi_j^n + W_j^n \psi_j^n \quad (98)$$

dove V_j e W_j^n sono i valori delle corrispondenti funzioni continue calcolate nel punto j -esimo e all'istante n -esimo.

La discretizzazione dell'operatore $i\partial/\partial t$ richiede una maggiore attenzione. Va notato, infatti, che la norma della funzione d'onda soluzione della Eq. 90 è una quantità conservata nel tempo. L'esatto operatore di evoluzione temporale è dunque unitario. Il più semplice schema di evoluzione temporale alle differenze finite, corretto fino $O(\Delta t)$,

$$\psi(t + \Delta t) = U\psi(t) \quad U = 1 - i\Delta t H(t) \quad (99)$$

ha il vantaggio di essere esplicito, *i.e.* fornisce esplicitamente ψ_j^{n+1} in termini di ψ_j^n , ma non essendo unitario produce generalmente una esplosione della soluzione numerica al crescere dell'indice temporale n . Esso va quindi scartato. D'altro canto il cosiddetto operatore di evoluzione temporale alla Cayley:

$$U_C = \left[1 + \frac{i}{2}\Delta t H(t)\right]^{-1} \left[1 - \frac{i}{2}\Delta t H(t)\right] \quad (100)$$

risulta unitario e corretto fino $O(\Delta t)$ (la correttezza è $O(\Delta t^2)$ nel caso di hamiltoniana indipendente dal tempo). Lo schema alle differenze finite risulta in questo caso di tipo implicito:

$$\left[1 + \frac{i}{2}\Delta t H(t)\right]\psi(t + \Delta t) = \left[1 - \frac{i}{2}\Delta t H(t)\right]\psi(t) \quad (101)$$

Tale inconveniente però non è grave in quanto l'Eq. 101 si traduce, facendo uso della Eq. 98, in un semplice sistema lineare

$$\beta\psi_{j-1}^{n+1} + \alpha_j^n\psi_j^{n+1} + \beta\psi_{j+1}^{n+1} = \chi_j^n \quad (102)$$

con

$$\chi_j^n = \beta^*\psi_{j-1}^n + (\alpha_j^n)^*\psi_j^n + \beta^*\psi_{j+1}^n \quad (103)$$

ed avendo definito

$$\alpha_j^n = 1 + i\frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{i}{2}\Delta t(V_j + W_j^n) \quad (104)$$

$$\beta = -\frac{i}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (105)$$

Si consideri ora nota la funzione d'onda all'istante n così che il membro di destra della Eq. 102 sia noto. Facendo uso della condizione $\psi_0^n = \psi_{j+1}^n = 0$, esprime il fatto che ad ogni istante la funzione d'onda risulta localizzata all'interno

dell'intervallo $[x_{min}, x_{max}]$, si giunge al seguente sistema tridiagonale:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^n & \beta & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \beta & \alpha_2^n & \beta & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha_3^n & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_{J-2}^n & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta & \alpha_{J-1}^n & \beta \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \beta & \alpha_J^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^{n+1} \\ \psi_2^{n+1} \\ \psi_3^{n+1} \\ \vdots \\ \psi_{J-2}^{n+1} \\ \psi_{J-1}^{n+1} \\ \psi_J^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1^n \\ \chi_2^n \\ \chi_3^n \\ \vdots \\ \chi_{J-2}^n \\ \chi_{J-1}^n \\ \chi_J^n \end{pmatrix} \quad (106)$$

La risoluzione di tale sistema permette di ricavare, ad ogni intervallo di tempo Δt , la funzione d'onda in ogni punto del reticolo spaziale a partire dalla assegnata condizione iniziale ψ_j^0 .

La natura tridiagonale della matrice caratteristica associata al sistema della Eq. 106 ne rende particolarmente semplice e veloce la soluzione numerica. Questa viene ottenuta mediante la usuale tecnica di triangolarizzazione superiore ed inferiore⁶⁰ che richiede, nel caso di sistemi tridiagonali, un numero di operazioni dell'ordine della dimensione della matrice caratteristica associata. La soluzione del sistema mostrato nella Eq. 106 impiega circa $10^{-4} \cdot J$ secondi su VAX 8350.

Le dimensioni del reticolo spaziale, Δx e J , e di quello temporale, Δt e N , dipendono dalla forma del potenziale $V(x)$ e dalla scelta della condizione iniziale $\psi(x, 0)$. Per uno stato iniziale di forma gaussiana ed un potenziale a barriere rettangolari i parametri reticolari tali da consentire una corretta simulazione numerica della Eq. 90 possono essere dedotti dal lavoro di Goldberg, Schey e Schwartz⁵⁹. Per le simulazioni presentate nella Fig. 8 tali richieste impongono $J \simeq N \simeq 1200$ nel caso $\Gamma_0 = 43.2 \text{ meV}$, $J \simeq N \simeq 9000$ nel caso $\Gamma_0 = 5.8 \text{ meV}$ e $J \simeq N \simeq 63000$ nel caso $\Gamma_0 = 0.8 \text{ meV}$. I tempi di calcolo per ogni simulazione sono dunque, su VAX 8350, circa 2.4 minuti, 2.3 ore e 4.6 giorni rispettivamente. Nel caso $\Gamma_0 = 0.8 \text{ meV}$ si è fatto ricorso al CRAY X-MP/48 del CERN che riduce il tempo di calcolo per simulazione a circa 2.5 ore.

Infine, la affidabilità delle simulazioni è stata verificata osservando che nes-

suna apprezzabile differenza numerica viene prodotta dall'aumento di risoluzione del reticolo rispetto alle condizioni di lavoro scelte.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

1. H. I. Smith e H. G. Craighead, *Phys. Today*, **43** (2), 24 (1990)
2. *Foundamentals of the Theory of Metals*, A. A. Abrikosov (North-Holland, Amsterdam 1988)
3. *Physics and Application of Semiconductor Microstructures*, M. Jaros (Clarendon Press, Oxford 1989)
4. *Mesoscopic Phenomena in Solids*, B. L. Al'tshuler, P. A. Lee e R. A. Webb Ed. (Elsevier, Amsterdam 1990)
5. F. Capasso e S. Datta, *Phys. Today*, **43** (2), 74 (1990)
6. *Heterojunction Band Discontinuities*, F. Capasso e G. Margaritondo Ed. (North-Holland, Amsterdam 1987)
7. M. van Schilfgaarde e N. Newman, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2728 (1990)
8. G. A. Baraff, J. A. Appelbaum e D. R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 237 (1977)
9. W. E. Pickett, S. G. Louie e M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **17**, 815 (1978)
10. W. E. Pickett e M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **18**, 939 (1978)
11. J. Ihm e M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **20**, 729 (1979)
12. C. G. Van de Walle e R. M. Martin, *J. Vac. Sci. & Technol. B* **3**, 1256 (1985)
13. C. G. Van de Walle e R. M. Martin, *J. Vac. Sci. & Technol. B* **4**, 1055 (1986)
14. J. Tersoff, in *Heterojunction Band Discontinuities*, F. Capasso e G. Margaritondo Ed. (North-Holland, Amsterdam 1987)
15. *Introduction to Solid State Theory*, O. Madelung (Springer-Verlag, Berlin 1978)
16. G. Jona-Lasinio, F. Martinelli e E. Scoppola, *Phys. Rep.* **77**, 313 (1981)
17. G. Jona-Lasinio, F. Martinelli e E. Scoppola, *Ann. Inst. Henri Poincaré* **42**, 73 (1985)
18. G. Jona-Lasinio, F. Martinelli e E. Scoppola, in *Mathematics + Physics*,

- Lectures on Recent Results II*, L. Streit Ed. (World Scientific, Singapore 1986)
19. F. Cesi, *J. Phys. A* **22**, 1027 (1989)
 20. F. Cesi, *Ann. Phys.* **191**, 286 (1989)
 21. *Physical Properties of Semiconductors*, C. M. Wolfe, N. Holonyak Jr. e G. E. Stillman (Prentice Hall, Englewood Cliffs 1989)
 22. M. Jaros, *Rep. Prog. Phys.* **48**, 1091 (1985)
 23. W. Kohn, *Phys. Rev.* **105**, 509 (1957)
 24. H. Ohno, E. E. Mendez e W. I. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1793 (1990)
 25. G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 5693 (1981)
 26. T. Ando e S. Mori, *Surf. Science* **113**, 124 (1982)
 27. M. O. Vassell, J. Lee e H. F. Lockwood, *J. Appl. Phys.* **54**, 5206 (1983)
 28. K. F. Brennan e C. J. Summers, *J. Appl. Phys.* **61**, 614 (1987)
 29. W. R. Frensley, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 745 (1990)
 30. G. Brozak, E. A. de Andrada e Silva, L. J. Sham, F. De Rosa, P. Miceli, S. A. Schwarz, J. P. Harbison L. T. Florez e S. J. Allen Jr., *Phys. Rev. Lett.* **64**, 471 (1991)
 31. *Quantum Theory*, D. Bohm (Prentice Hall, New York 1951)
 32. *Physics of Quantum Electron Devices*, F. Capasso Ed. (Springer-Verlag, Heidelberg 1990)
 33. *Quantum Mechanics*, E. Merzbacher (Wiley, New York 1970)
 34. *On the Time Dependence of Double Barrier Resonant Tunneling*, A. Grincwajg (Diploma thesis, Institute of Theoretical Physics, Chalmers University of Technology, Göteborg 1986)
 35. S. Collins, D. Lowe e J. R. Barker, *J. Phys. C* **20**, 6233 (1987)
 36. R. K. Mains e G. I. Haddad, *J. Appl. Phys.* **64**, 3564 (1988)
 37. R. P. Feynman e F. L. Vernon Jr., *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963)
 38. A. O. Caldeira e A. J. Legget, *Physica A* **121**, 587 (1983)
 39. T. A. Fulton e G. J. Dolan, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 109 (1987)
 40. S. M. Girvin, L. I. Glazman, M. Jonson, D. R. Penn e M. D. Stiles, *Phys.*

- Rev. Lett. **64**, 3183 (1990)
41. K. Leo, J. Shah, O. Göbel, T. C. Damen, S. Schmitt-Rink, W. Schäfer e K. Köhler, Phys. Rev. Lett. **66**, 201 (1991)
 42. C. Presilla, G. Jona-Lasinio e F. Capasso, Phys. Rev. B (Rapid Comm.) **43**, 5200 (1991)
 43. C. Presilla, G. Jona-Lasinio e F. Capasso, in *Resonant Tunneling in Semiconductors: Physics and Applications*, L. L. Chang Ed. (Plenum Press, New York 1990)
 44. F. Capasso, G. Jona-Lasinio e C. Presilla, in *Microscopic Aspect of Non-Linearity in Condensed Matter*, V. Tognetti Ed. (Plenum Press, New York 1990)
 45. B. Ricco e M. Ya Azbel, Phys. Rev. B **29**, 1970 (1984)
 46. H. Heiblum, M. J. Nathan, D. C. Thomas e C. M. Knoedler, Phys. Rev. Lett. **55**, 2200 (1985)
 47. S. Luryi in *Heterojunction Band Discontinuities*, F. Capasso e G. Margaritondo Ed. (North-Holland, Amsterdam 1987)
 48. *Theoretical Solid State Physics* Vol. 1, W. Jones e N. H. March (Dover Publications, New York 1973)
 49. H. Spohn, Rev. Mod. Phys. **53**, 569 (1980)
 50. W. R. Frensley, Phys. Rev. B **36**, 1570 (1987)
 51. *Spectral Transform and Solitons, I*, F. Calogero e A. Degasperis (North-Holland, Amsterdam 1982)
 52. S. Collins, D. Lowe e J. R. Barker, J. Phys. C **20**, 6213 (1987)
 53. E. H. Hauge e J. A. Stovngeng, Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989)
 54. T. P. Spiller, T. D. Clark, R. J. Prance e H. Prance, Europhys. Lett. **12**, 1 (1990)
 55. *Meccanica Quantistica*, A. S. Davydov (Edizioni Mir, Mosca 1981)
 56. J. F. Whitaker, G. A. Mourou, T. C. L. G. Sollner e W. D. Goodhue, Appl. Phys. Lett. **53**, 385 (1989)
 57. M. R. Freeman, D. D. Awschalom, J. M. Hong e L. L. Chang, Phys. Rev.

Lett. **64**, 2430 (1990)

58. *Quantum Mechanics, non relativistic theory*, L. D. Landau e E. M. Lifshitz (Pergamon Press, Oxford, 1977)
59. A. Goldberg, H. M. Schey e J. L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967)
60. *Numerical Recipes: the Art of Scientific Computing*, W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling (Cambridge University Press, Cambridge 1986)