

01

Теория резонансного туннелирования носителей заряда в рамках метода функций Грина и биортогонального формализма

© М.В. Захарченко, Г.Ф. Глинский

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,
197376 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: mikhailvzakh@gmail.com

Поступило в Редакцию 13 мая 2023 г.

В окончательной редакции 27 июля 2023 г.

Принято к публикации 28 июля 2023 г.

Развит общий подход к анализу эффектов резонансного туннелирования и рассеяния в рамках метода функций Грина. Основу предлагаемого математического аппарата составил биортогональный формализм квантовой теории, позволяющий описывать системы с неэрмитовыми гамильтонианами. Рассмотрено стационарное уравнение Шредингера с источником частиц в абстрактной операторной форме. Решение задачи выражено в общем виде через соответствующий оператор Грина. Для одиночного прямоугольного потенциального барьера и двойного барьера гауссовой формы определены коэффициенты прохождения и их зависимости от энергии частиц. Результат численного расчета для одиночного прямоугольного барьера сопоставлен с известным аналитическим решением этой задачи. Предлагаемый метод позволил с высокой точностью анализировать процессы туннелирования и рассеяния частиц в структурах с произвольным числом и формой потенциальных барьеров.

Ключевые слова: резонансное туннелирование, резонансное рассеяние, потенциальный барьер, функция Грина, биортогональная квантовая механика.

DOI: 10.61011/JTF.2023.10.56275.125-23

Введение

В последние годы эффекты резонансного туннелирования и рассеяния носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах стали широко использоваться при разработке всевозможных приборов оптической и квантовой электроники [1–3]. В частности, они лежат в основе разрабатываемых в настоящее время новых устройств связи, детекторов, а также компактных излучателей, работающих в терагерцовом диапазоне длин волн [4–6]. В этой связи возникает насущная необходимость в разработке простых численных методов, позволяющих в рамках одночастичной квантовой механики анализировать эффекты туннелирования носителей заряда через одиночные и множественные потенциальные барьеры произвольной формы.

Обычно анализ процессов туннелирования и рассеяния сводится к решению стационарного уравнения Шредингера в координатном представлении с гамильтонианом, содержащим потенциальные барьеры в ограниченной области пространства. В этом случае предполагается наличие вдали от барьеров, слева или справа, источника частиц. В операторной форме соответствующее уравнение можно представить в следующем общем виде:

$$(\hat{H} - E)|\Psi(E)\rangle = |g\rangle. \quad (1)$$

Здесь \hat{H} — гамильтониан рассматриваемой системы, $|\Psi(E)\rangle$ — вектор, описывающий стационарное состояние частицы с энергией E , $|g\rangle$ — вектор, характеризующий

источник частиц. В этом уравнении энергия может принимать любые значения и является параметром задачи. В простейшем случае гамильтониан подобной системы имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\hat{\mathbf{x}}), \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса, $U(\hat{\mathbf{x}})$ — оператор потенциальной энергии.

Уравнение (1), как правило, решают в базисе состояний $|\mathbf{x}\rangle$, соответствующих определенному значению координаты частицы \mathbf{x} . Волновая функция в данном координатном представлении $\Psi(\mathbf{x}; E) = \langle \mathbf{x} | \Psi(E) \rangle$ позволяет рассчитать плотность потока вероятности для частицы, прошедшей через область с локализованным в пространстве потенциалом. Для одномерных систем интерес представляет коэффициент прохождения T , который определяется как отношение плотностей потоков прошедших и падающих частиц. В двумерных и трехмерных системах аналогичную роль играет сечение рассеяния. При этом предполагается, что в результате рассматриваемых процессов частица уходит на бесконечность. Отметим, что оператор кинетической энергии в гамильтониане в этих случаях является неэрмитовым. Это обусловлено тем, что доказательство эрмитовости оператора импульса в координатном представлении основывается на интегрировании по частям и пренебрежении внеинтегральным слагаемым, обращающимся в нуль только для затухающих функций. По указанной причине при поиске решений для частиц, уходящих на

бесконечность, в принципе приходится рассматривать неэрмитовы операторы с комплексными собственными значениями, стационарные волновые функции которых затухают со временем [7–10]. При этом мнимая часть собственных значений энергии определяет характерное время ухода частицы из системы.

В настоящей работе предлагается новый подход к решению этой задачи, в рамках которого вместо бесконечного пространства рассматривается большой, но ограниченный объем V . При этом предполагается, что потенциальные барьеры располагаются вблизи центра рассматриваемой области, а в систему дополнительно вводится плавно изменяющийся в пространстве диссипативный чисто мнимый потенциал, обеспечивающий затухание волновых функций вблизи границ. Если затухание достаточно мало, то вид волновой функции частицы в центральной области практически не отличается от случая неограниченного пространства. Таким образом, оказывается возможным аппроксимировать решение задачи о движении частицы, уходящей на бесконечность, рассматривая область конечного размера.

Введение пространственного ограничения в x -представлении с учетом затухания волновых функций $\Psi(\mathbf{x}; E)$ вблизи границ рассматриваемой области позволяет ввести периодическое продолжение исследуемой квантовой системы. Такой прием аналогичен введению циклических граничных условий Борна-Кармана. Решение задачи в этом случае удобно проводить в базисе состояний $|\mathbf{k}\rangle$, соответствующих определенным значениям импульса $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ или, что то же самое, волнового вектора частицы \mathbf{k} . Это представление связано с x -представлением преобразованием Фурье. Существенно, что в \mathbf{k} -представлении мы получаем возможность описывать систему дискретными переменными вместо непрерывных, а операторное уравнение (1) принимает вид системы линейных алгебраических уравнений. Предлагаемый подход существенно более удобен с точки зрения численного расчета. Он позволяет исследовать эффекты туннелирования в квантовых системах с любым числом потенциальных барьеров, имеющих произвольную форму, а также произвольное распределение в пространстве. В качестве примера этот метод используется для расчета коэффициента прохождения и его зависимости от энергии падающей частицы в двух одномерных системах, содержащих соответственно одиночный барьер прямоугольной формы и два близко расположенных барьера гауссовой формы.

1. Решение задачи методом функций Грина в биортогональной формулировке

Решение задачи с неэрмитовым гамильтонианом наиболее естественно изучать в рамках биортогонального формализма в квантовой теории [11]. В общем случае для неэрмитовых операторов необходимо рассматривать

две задачи на собственные значения, которые запишем в виде

$$\begin{aligned}\hat{H}|\psi_n\rangle &= E_n|\psi_n\rangle, \\ \hat{H}^\dagger|\varphi_n\rangle &= E_n^*|\varphi_n\rangle.\end{aligned}\quad (3)$$

Здесь индекс n устанавливает соответствие между собственными числами E_n , E_n^* и собственными векторами $|\psi_n\rangle$, $|\varphi_n\rangle$. Согласно (3), сопряженные векторы $\langle\psi_n|$, $\langle\varphi_n|$ являются решением сопряженных уравнений

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\hat{H}^\dagger &= E_n^*\langle\psi_n|, \\ \langle\varphi_n|\hat{H} &= E_n\langle\varphi_n|.\end{aligned}$$

В такой форме записи векторы $\langle\varphi_n|$ и $|\psi_n\rangle$ приобретают смысл „левого“ и „правого“ собственных векторов неэрмитового оператора \hat{H} , соответствующих одному комплексному собственному числу E_n . Определяемые таким образом собственные состояния операторов \hat{H} и \hat{H}^\dagger связаны следующими условиями биортонормированности и полноты

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\psi_{n'}\rangle &= \delta_{nn'}, \\ \sum_n |\psi_n\rangle\langle\varphi_n| &= 1.\end{aligned}\quad (4)$$

Использование двух наборов $|\psi_n\rangle$ и $\langle\varphi_n|$ позволяет привести к диагональному виду оба неэрмитовых оператора в уравнениях (3):

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\hat{H}|\psi_{n'}\rangle &= E_n\delta_{nn'}, \\ \langle\psi_n|\hat{H}^\dagger|\varphi_{n'}\rangle &= E_n^*\delta_{nn'}.\end{aligned}$$

Таким образом, операторы \hat{H} и \hat{H}^\dagger могут быть представлены в виде следующих разложений по собственным биортогональным состояниям

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_n |\psi_n\rangle E_n \langle\varphi_n|, \\ \hat{H}^\dagger &= \sum_n |\varphi_n\rangle E_n^* \langle\psi_n|.\end{aligned}\quad (5)$$

В качестве примера рассмотрим классическую одномерную задачу о падении частицы на прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины. Введем линейный размер ограниченной области D . Соответствующий потенциал определим следующим образом:

$$U_b(x) = U_{b0}f_b(x), \quad f_b(x) = \begin{cases} 1, & |x| \leq d/2, \\ 0, & |x| > d/2 \end{cases},$$

где $f_b(x)$ — характеристическая функция, определяющая ширину барьера, U_{b0} — амплитуда барьера, d — ширина барьера.

Введем в систему второй, чисто мнимый диссипативный потенциал $U_d(x)$, равный нулю в области вблизи исходного потенциала $U_b(x)$, и плавно возрастающий по

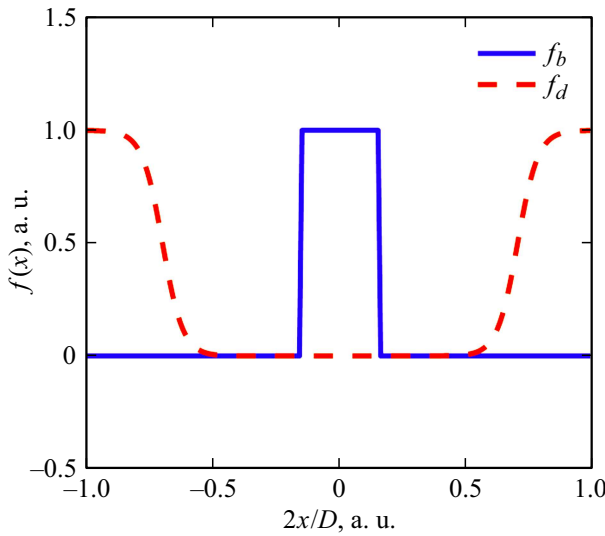


Рис. 1. Характеристические функции $f_b(x)$ и $f_d(x)$, определяющие вещественную и мнимую части потенциала соответственно.

мере приближения к границам рассматриваемой области слева и справа

$$U_d(x) = iU_{d0}f_d(x),$$

$$f_d(x) = \left[1 - \frac{1}{\exp[-\sigma(x + \mu)] + \exp[\sigma(x - \mu)] + 1} \right].$$

Здесь $f_d(x)$ — характеристическая функция, определяющая диссипативный потенциал, U_{d0} — амплитуда этого потенциала, μ — параметр, задающий положение двух областей диссипации, параметр σ определяет скорость роста мнимого потенциала. На рис. 1 представлены функции $f_b(x)$ и $f_d(x)$, с помощью которых задано распределение вещественного и мнимого потенциалов в системе.

Для представления операторного уравнения (1) в матричной форме воспользуемся базисом с определенным значением волнового вектора $|k\rangle$. Соотношения ортонормированности и полноты для векторов $|k\rangle$ имеют вид

$$\langle k|k'\rangle = \delta_{kk'},$$

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = 1.$$

Уравнение (1) в выбранном базисе представим как

$$\sum_{k'} \langle k|\hat{H} - E|k'\rangle\langle k'|\Psi(E)\rangle = \langle k|g\rangle. \quad (6)$$

Состояния $|k\rangle$ являются собственными состояниями оператора \hat{p} , поэтому в этом базисе он диагонален

$$\langle k|\hat{p}|k'\rangle = \hbar k\delta_{kk'}.$$

Оператор потенциальной энергии представим в виде суммы двух операторов

$$U(\hat{x}) = U_b(\hat{x}) + U_d(\hat{x}).$$

Его матричные элементы в базисе $|k\rangle$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} U_{kk'} &= \int dx dx' \langle k|x\rangle\langle x|U(\hat{x})|x'\rangle\langle x'|k'\rangle \\ &= \frac{1}{D} \int dx U(x) \exp[-i(k - k')x], \end{aligned}$$

где мы учли, что

$$\langle x|U(\hat{x})|x'\rangle = U(x)\delta(x - x'),$$

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{D}} \exp(ikx).$$

В результате матричный гамильтониан принимает следующий окончательный вид:

$$H_{kk'} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{kk'} + U_{kk'}.$$

Помещая локальный источник частиц в точку x_0 , будем иметь

$$g(x) = \langle x|g\rangle = A\delta(x - x_0),$$

где A — некоторая размерная константа. При этом точка x_0 выбирается исходя из условия $U_d(x_0) \cong 0$. Переходя в k -представление, получим

$$g_k = \langle k|g\rangle \int dx \langle k|x\rangle\langle x|g\rangle = \frac{A}{\sqrt{D}} \exp(-ikx_0).$$

Подставляя в (6) собственные векторы гамильтониана в соответствии с условием полноты (4) и разложением (5), будем иметь

$$\begin{aligned} \sum_{k',n,n'} \langle k|\psi_n\rangle\langle\varphi_n|\hat{H} - E|\psi_{n'}\rangle\langle\varphi_{n'}|k'\rangle\langle k'|\Psi(E)\rangle &= \langle k|g\rangle, \\ \sum_{k',n} \langle k|\psi_n\rangle(E_n - E)\langle\varphi_n|k'\rangle\langle k'|\Psi(E)\rangle &= \langle k|g\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Решение уравнения (7), параметрически зависящее от E , запишем в виде

$$\Psi_k(E) = \langle k|\Psi(E)\rangle = \sum_{n,k'} \langle k|\psi_n\rangle \frac{1}{(E_n - E)} \langle\varphi_n|k'\rangle\langle k'|g\rangle$$

или

$$\Psi_k(E) = \sum_{k'} \langle k|\hat{G}(E)|k'\rangle\langle k'|g\rangle = \sum_{k'} G_{kk'}(E)g_{k'}, \quad (8)$$

где матричные элементы $G_{kk'}(E)$ представляют собой функцию Грина уравнения (7) в k -представлении. Соответствующий оператор Грина может быть выражен в виде биортогонального разложения

$$\hat{G}(E) = \sum_n |\psi_n\rangle \frac{1}{E_n - E} \langle\varphi_n|.$$

Здесь E_n — комплексная величина, а $\hat{G}(E)$ — представляет собой обратный оператор исходного уравнения (1):

$$\hat{G}(E) = (\hat{H} - E)^{-1}.$$

После вычисления компонент волновой функции при заданном значении энергии по формуле (8) остается перейти к ее координатному представлению

$$\Psi(x; E) = \sum_k \langle x|k\rangle \langle k|\Psi(E)\rangle = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_k \exp(ikx) \Psi_k(E).$$

Полученные функции $\Psi(x; E)$ позволяют определить плотность потока вероятности $j(x; E)$, соответствующую прошедшей частице, и таким образом рассчитать зависимость коэффициента прохождения T от ее энергии. Предполагается, что частица движется слева направо. В случае рассматриваемой одномерной задачи отношение плотностей потока сводится к отношению квадратов амплитуд волн, которое запишем в виде

$$T(E) = \frac{j_1(E)}{j_0(E)} = \frac{|\Psi_1(E)|^2}{|\Psi_0(E)|^2}.$$

Здесь $|\Psi_1(E)|^2 = |\Psi(x_1; E)|^2$, а координата $x_1 > d/2$ расположена в области, где $U_d(x) \cong 0$. Отметим, что квадрат амплитуды $|\Psi(x; E)|^2$, вычисленный при $x < -d/2$, соответствует суперпозиции падающей и отраженной волн. Если амплитуда падающей волны неизвестна, то проще всего ее определить, решая вспомогательную задачу, в которой отсутствует вещественный потенциальный барьер $U_b(x) = 0$. Решение $\Psi(x; E)$ в этом случае будет иметь вид волны, амплитуда которой практически постоянна вблизи центра рассматриваемой области и постепенно затухает при приближении к ее границам. Таким образом, можно приближенно положить $|\Psi_0(E)| \cong |\Psi_0(0; E)| = \text{const}$.

2. Результаты численного расчета

В качестве иллюстрации сопоставим коэффициент прохождения через прямоугольный потенциальный барьер, рассчитанный численно вышеизложенным методом, с известным результатом аналитического решения данной задачи [12]:

$$T_a(E) = \frac{4k_0^2 k_1^2}{(k_0^2 - k_1^2) \sin^2(dk_1) + 4k_0^2 k_1^2},$$

где $k_0 = \sqrt{2m_0 E} / \hbar$, $k_1 = \sqrt{2m_0(E - U_{b0})} / \hbar$.

Для реализации численного расчета будем считать, что координата x изменяется дискретно как $x_n = -D/2 + n\Delta x$, где $\Delta x = D/N$ — шаг, N — число точек, $n = 0, 1 \dots, N - 1$. Соответствующие значения волнового вектора также дискретны и определяются как $k_n = -\pi/\Delta x + n\Delta k$ с шагом $\Delta k = 2\pi/D$. В пределе

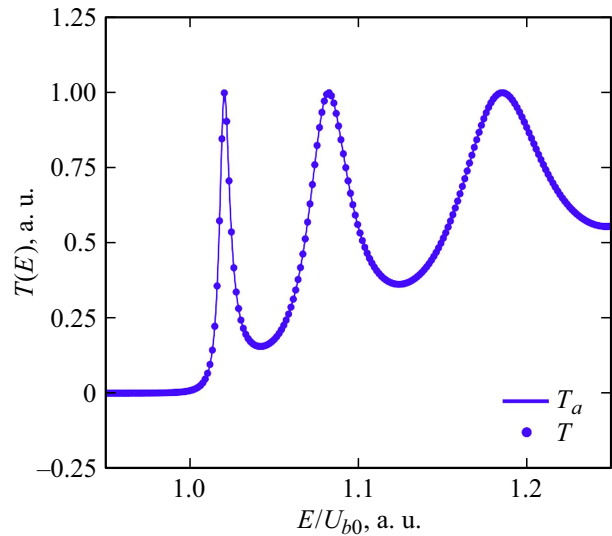


Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения прямоугольно барьера от энергии.

$N \rightarrow \infty$ координата x изменяется непрерывно, а значения k лежат в интервале $-\infty \dots \infty$. В рамках численного расчета N выбирается конечным и определяет точность вычислений. Далее число точек принималось равным $N = 200$, а размерность матриц гамильтониана и оператора Грина составляла $N \times N = 200 \times 200$. Такой подход дискретизации x - и k -пространств возникает естественным образом при расчете энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в полупроводниковых сверхрешетках методом эффективной массы [13,14]. В этом случае роль дискретных переменных x_n играют узлы решетки Браве кристалла, а k_n представляют собой векторы обратной сверхрешетки.

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента прохождения прямоугольного барьера от энергии, рассчитанные аналитически $T_a(E)$ и численно $T(E)$. Как видно из графика, развитый подход обеспечивает высокую точность соответствия.

В качестве второго примера рассмотрим зависимость коэффициента прохождения $T(E)$ от энергии для системы с двумя барьерами. На рис. 3 представлены характеристические функции, определяющие вещественную и мнимую части потенциала. Вещественная часть потенциала выбрана в виде двух перекрывающихся функций Гаусса. Амплитуда барьера U_{b0} в этом случае будет определять значение вещественного потенциала в точках максимумов. На рис. 4 представлен соответствующий график зависимости $T(E)$. Как следует из рисунка, в данном случае в спектре пропускания присутствуют узкие пики при энергиях $E/U_{b0} < 1$, которые соответствуют квазирезонансным состояниям частицы в потенциальной яме, образованной двумя гауссовыми барьерами.

Таким образом, развитый в настоящей работе математический аппарат позволяет получать информацию обо всех квазирезонансных уровнях в системе, в том

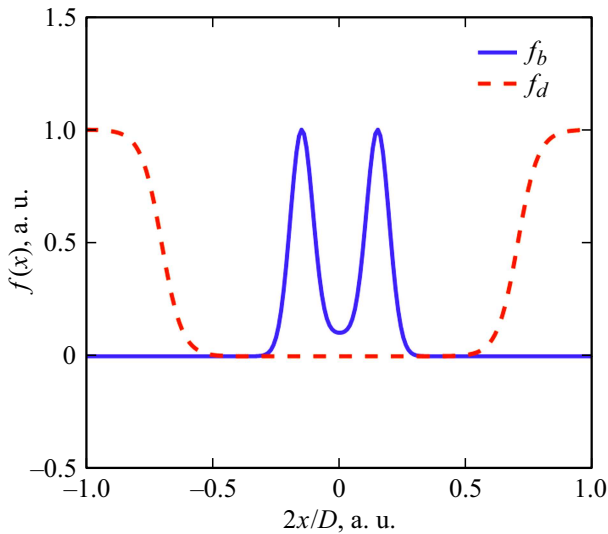


Рис. 3. Характеристические функции, определяющие потенциал в системе с двумя барьерами гауссовой формы.

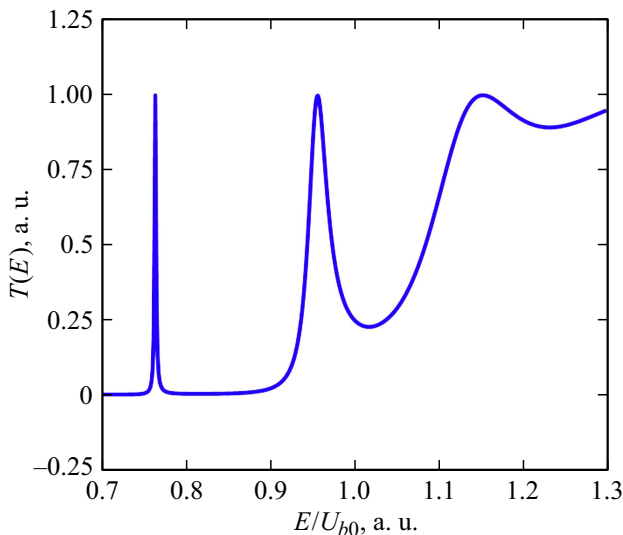


Рис. 4. Зависимость коэффициента прохождения от энергии для системы с двумя барьерами гауссовой формы.

числе и о тех из них, которые характеризуются большим временем жизни, т.е. малым уширением (первый максимум на рис. 4). Данная теория дает возможность исследовать эффекты туннелирования частиц в самом общем случае, независимо от особенностей конкретной системы и ее параметров. Она может быть с успехом использована при расчете резонансных туннельных эффектов в полупроводниковых гетероструктурах в рамках метода эффективной массы.

Заключение

В работе предлагается общий подход к решению задач о резонансном туннелировании и рассеянии частиц ме-

тодом функций Грина. Разработанный теоретический аппарат основывается на биортогональном формализме квантовой теории, в рамках которого описываются системы с неэрмитовыми гамильтонианами. В частности, подобные операторы естественным образом возникают в задачах о туннелировании и рассеянии частиц. Существенный аспект изложенного метода заключается в пространственном ограничении и периодическом продолжении рассматриваемой квантовой системы. Это позволяет осуществить переход от непрерывных переменных к дискретным. В результате стационарное уравнение Шредингера с источником частиц сводится к системе линейных неоднородных алгебраических уравнений. Разработанный подход позволяет численно и с высокой точностью анализировать процессы туннелирования и рассеяния частиц в структурах с любым числом потенциальных барьеров, имеющих произвольную форму.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] М.В. Давидович. ЖТФ, **92** (9), 1387 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.09.52931.257-21 [M.V. Davidovich. Tech. Phys., **67** (9), 1196 (2022). DOI: 10.21883/TP.2022.09.54684.257-21]
- [2] М.В. Давидович. ЖТФ, **93** (4), 495 (2023). DOI: 10.21883/JTF.2023.04.55037.275-22
- [3] I.V. Krive, A. Palevski, R.I. Shekhter, M. Jonson. Low Temp. Phys., **36** (2), 119 (2010). DOI: 10.1063/1.3319350
- [4] J. Wang, M. Nafaty, E. Wasige. Appl. Sci., **12**, 3822 (2022). DOI: 10.3390/app12083822
- [5] M. Asada, S. Suzuki. Sensors, **21**, 1384 (2021). DOI: 10.3390/s21041384
- [6] K. Grishakov, K. Katin, M. Maslov. Appl. Sci., **13**, 3007 (2023). DOI: 10.3390/app13053007
- [7] N. Moiseyev. Phys. Rep., **302**, 211 (1998). DOI: 10.1016/S0370-1573(98)00002-7
- [8] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, GB, 2011). DOI: 10.1017/CBO9780511976186
- [9] T. Myo, Y. Kikuchi, H. Masui, K. Kato. Prog. Part. Nucl. Phys., **79**, 1 (2014). DOI: 10.1016/j.pnpnp.2014.08.001
- [10] A. Mostafazadeh. Int. J. Geom. Methods Mod. Phys., **7** (7), 1191 (2010). DOI: 10.1142/S0219887810004816
- [11] D.C. Brody. J. Phys. A: Math. Theor., **47**, 035305, (2014). DOI: 10.1088/1751-8113/47/3/035305
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (Физматлит, М., 2004, Изд. 6).
- [13] Г.Ф. Глинский. Письма в ЖТФ, **44** (6), 17 (2018). DOI: 10.21883/PJTF.2018.06.45763.17113 [G.F. Glinskii. Tech. Phys., **44**, 232 (2018). DOI: 10.1134/S1063785018030161]
- [14] Г.Ф. Глинский, Д.А. Шапран. Письма в ЖТФ, **46** (6), 20 (2020). DOI: 10.21883/PJTF.2020.06.49159.18104 [G.F. Glinskii, D.A. Shapran. Tech. Phys., **46**, 272 (2020). DOI: 10.1134/S1063785020030219]