03,16

Микроскопическая теория резонансного туннелирования носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах

© Е.В. Доморацкий[1], М.В. Захарченко[2], Г.Ф. Глинский[2]

[1] Университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: evdomoratskii@gmail.com

Поступила в Редакцию 13 декабря 2025 г.
В окончательной редакции 30 января 2026 г.
Принята к публикации 30 января 2026 г.

Развит общий подход к исследованию резонансного туннелирования носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах. Задача о туннелировании решается посредством введения оператора Грина для соответствующего уравнения Шрёдингера в рамках биортогонального формализма квантовой теории. В качестве примера рассмотрены модельные гетероструктуры на основе одномерных кристаллов, для которых возможно построение точной микроскопической теории туннелирования. Точные результаты, следующие из предлагаемой теории, сравниваются с приближенными данными, полученными методом плавных огибающих функций, а также методом эффективной массы. Показано, что основной вклад в различие микроскопической теории и существующих приближенных методов обусловлен непараболичностью закона дисперсии носителей заряда, тогда как короткодействующие интерфейсные поля играют в процессе туннелирования второстепенную роль.

Ключевые слова: метод эффективной массы, функция Грина, биортогональная квантовая механика, эффекты резонансного туннелирования.

DOI: 10.61011/FTT.2026.02.62714.8886

1. Введение

С развитием наноэлектроники становится актуальной задача создания различных устройств, основанных на эффектах резонансного туннелирования носителей заряда, т.е. переносе их через чередующуюся последовательность квантовых барьеров и квантовых ям с энергией, соответствующей резонансу в рассматриваемой системе. Это явление, а также отрицательная дифференциальная проводимость, возникающая в результате возможности туннелирования, могут быть использованы, например, для реализации инфракрасных излучателей среднего [1] и терагерцового диапазона [2] на внутризонных переходах в полупроводниковых сверхрешетках — „лестницах“ Ванье–Штарка [3]. Существуют и другие варианты реализации устройств наноэлектроники, принцип действия которых основан на резонансном туннелировании, например, резонансно-туннельные транзисторы [4] и сформированные с их помощью логические элементы [5]. Практический интерес здесь представляют вольт-амперные характеристики (ВАХ) туннельно-резонансных устройств, которые могут быть получены посредством расчета зависимости коэффициента туннелирования от энергии носителей заряда.

Для определения энергетической зависимости коэффициента туннелирования в литературе обычно используют различные аналитические приближения, в частности, такие как формулы Брейта–Вигнера [6,7]. Следует отметить численные подходы, использующие аналогичные формулы для анализа рассеяния частиц на барьерах [8], а также метод матриц переноса [9,10]. Кроме того, существуют различные способы расчета ВАХ туннельно-резонансных структур с использованием эквивалентных электрических схем, которые не требуют расчета коэффициента туннелирования [11]. Однако они не отличаются высокой точностью и не могут быть использованы для широкого класса гетероструктур.

Все перечисленные выше подходы имеют свои ограничения и не могут быть применены для описания туннелирования в системах с потенциальными барьерами произвольной формы или позволяют исследовать энергетический спектр коэффициента туннелирования только вблизи резонансных энергий системы. Однако, как показано в работах [12,13], проведение анализа в широком диапазоне энергий возможно в рамках методов теории функций Грина. Такой подход дает возможность исследования туннельных свойств структуры для произвольных значений энергии вдали от резонансов структуры.

Как правило, анализ резонансного туннелирования проводится в рамках приближения эффективной массы с помощью аппроксимации решений дифференциальных уравнений методом конечных элементов в базисе с определенным значением координаты $|\mathbf{x}\rangle$ или путем решения системы линейных алгебраических уравнений в рамках однозонной модели в базисе с определенным значением волнового вектора $|\mathbf{k}\rangle$. Однако в этом случае не учитываются все особенности зонной структуры материала,

т.к. закон дисперсии носителей заряда аппроксимируется параболической зависимостью.

В настоящей работе развивается общий подход к анализу резонансного туннелирования в многобарьерных структурах, учитывающий микроскопическое строение потенциальных барьеров и все особенности зонной структуры рассматриваемых материалов. Анализируются зависимости коэффициента туннелирования от энергии носителей заряда. Задача формулируется в импульсном представлении, что позволяет свести решение дифференциального уравнения Шрёдингера к решению системы линейных алгебраических уравнений. Развиваемый подход позволяет автоматически учесть граничные условия на гетероинтерфейсах исследуемых структур, что обуславливает его универсальность и предоставляет возможность исследовать системы с любым количеством барьеров произвольной формы.

2. Метод функций Грина в рамках биортогонального формализма

В общем случае уравнение Шрёдингера для собственных стационарных состояний частицы в операторной форме имеет вид

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \tag{1}$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан рассматриваемой задачи, E и $|\psi\rangle$ — собственная энергия и соответствующий ей собственный вектор. Для анализа прохождения частицы через систему вводится источник частиц, характеризуемый вектором $|\rho\rangle$. Тогда вместо уравнения (1) необходимо рассматривать неоднородное уравнение Шрёдингера

$$(\hat{H} - E)|\psi(E)\rangle = |\rho\rangle. \tag{2}$$

Решение неоднородного уравнения Шрёдингера (2) в общем виде выражается через оператор Грина, параметрически зависящий от энергии частицы:

$$|\psi(E)\rangle = \hat{G}(E)|\rho\rangle, \tag{3}$$

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

Рассмотрим задачу о прохождении частицы через некоторую структуру, образованную потенциальными барьерами произвольной формы. Подобная система является открытой, что подразумевает уход частицы на бесконечность в результате процесса рассеяния. В таких задачах волновая функция в координатном представлении оказывается отличной от нуля на бесконечности, а гамильтониан системы — неэрмитовым [14]. В этой связи формализм квантовой механики, соответствующий закрытым системам, описываемым эрмитовыми операторами, не может быть использован для корректного представления состояния частицы.

В развиваемом подходе для последующего численного анализа будем рассматривать систему в ограниченной области пространства, вблизи границ которой вводится фиктивный диссипативный потенциал наряду с потенциалом структуры. Волновая функция носителя заряда в этом случае плавно затухает в указанных областях. Вблизи исследуемой низкоразмерной системы решение уравнения Шрёдингера практически не отличается от решения аналогичной задачи для неограниченного пространства, что позволяет заменить случай ухода частицы на бесконечность [15,16].

Общий подход к анализу квантово-механических систем с неэрмитовыми гамильтонианами сформулирован в рамках биортогонального формализма квантовой теории в работах [17,18]. В этом случае принято рассматривать две задачи на собственные значения:

$$\hat{H}|\psi_n^{\mathrm{r}}\rangle = E_n|\psi_n^{\mathrm{r}}\rangle,$$

$$\hat{H}^{\dagger}|\psi_n^{\mathrm{l}}\rangle = E_n^*|\psi_n^{\mathrm{l}}\rangle,$$

где $|\psi_n^{\mathrm{r}}\rangle$ и $|\psi_n^{\mathrm{l}}\rangle$ — так называемые „правый“ и „левый“ собственные векторы, соответствующие комплексным собственным числам E_n и E_n^*, связанные условиями биортонормированности и полноты:

$$\left.\begin{aligned} \langle\psi_n^{\mathrm{l}}|\psi_{n'}^{\mathrm{r}}\rangle &= \delta_{nn'} \\ \sum_n |\psi_n^{\mathrm{r}}\rangle\langle\psi_n^{\mathrm{l}}| &= 1 \end{aligned}\right\}.$$

Два биортонормированных набора собственных векторов неэрмитового гамильтониана позволяют определить оператор Грина в виде следующего разложения:

$$\hat{G}(E) = \sum_n \frac{|\psi_n^{\mathrm{r}}\rangle\langle\psi_n^{\mathrm{l}}|}{E_n - E}. \tag{4}$$

3. Микроскопическая теория резонансного туннелирования носителей заряда

С физической точки зрения система потенциальных барьеров формируется за счет изменения кристаллического потенциала в полупроводниковых гетероструктурах. В общем случае их можно рассматривать как системы, в которых атомы одного материала A заменены атомами другого материала B. При этом будем считать, что кристаллы, образующие гетеропару, имеют одинаковую симметрию, а различием параметров кристаллической решетки можно пренебречь. Выбрав один из материалов гетероперехода, например, материал B, в качестве опорного, можно составить микроскопический гамильтониан такой системы с учетом диссипативного потенциала [19]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U^{\mathrm{B}}(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_{\mathbf{a}} f_{\mathrm{b}}(\mathbf{a})\Delta V(\hat{\mathbf{x}} - a) + iU_{0\mathrm{d}} f_{\mathrm{d}}(\hat{\mathbf{x}}), \tag{5}$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса, m_0 — масса электрона, $U^{\mathrm{B}}(\mathbf{x})$ — периодический потенциал, создаваемый атомами материала B, $f_{\mathrm{b}}(\mathbf{a})$ — характеристическая функция, определяющая положение атомов кристалла A в ре-

шетке кристалла B, $\Delta V(\mathbf{x}-\mathbf{a})$ — разность локальных потенциалов, создаваемых атомами материалов в ячейке с номером $\mathbf{a}$, $iU_{0\mathrm{d}}f_{\mathrm{d}}(\mathbf{x})$ — диссипативный потенциал вблизи границ системы с амплитудой $U_{0\mathrm{d}}$.

Удобно при решении уравнения Шрёдингера (2) с гамильтонианом (5) выбрать базис состояний с определенным значением волнового вектора $|\mathbf{q}\rangle$, который в твердом теле можно представить как состояния $|\mathbf{b}+\mathbf{k}\rangle$ с определенными значениями вектора обратной решетки $\mathbf{b}$ и волнового вектора $\mathbf{k}$. При таком подходе используемые переменные являются дискретными, а решение задачи автоматически удовлетворяет периодическим условиям Борна–Кармана. В этом случае не возникает необходимости в использовании разностных схем для решения уравнения Шрёдингера, как это делается обычно при использовании координатного базиса. Выбранное представление $|\mathbf{b}+\mathbf{k}\rangle$ связано с координатным $|\mathbf{x}\rangle$ посредством преобразования Фурье

$$\langle\mathbf{x}|\mathbf{b}+\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp[i(\mathbf{b}+\mathbf{k})\mathbf{x}],$$

где V — объем рассматриваемой области.

В выбранном базисе абстрактное уравнение (2) принимает вид системы линейных алгебраических уравнений. Элементы матрицы гамильтониана микроскопической теории (5) в нем имеют следующий вид:

$$H_{\mathbf{bk},\mathbf{b}'\mathbf{k}'} = \hat{H}^{\mathrm{B}}_{\mathbf{bb}'}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{kk}'} + f_{\mathrm{b}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\Delta V\big[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\big] + iU_{0\mathrm{d}}f_{\mathrm{d}}\big[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\big], \tag{6}$$

где $H^{\mathrm{B}}_{\mathbf{bb}'}(\mathbf{k}) = \hbar^2(\mathbf{b}+\mathbf{k})^2\delta_{\mathbf{bb}'}/(2m_0) + U^{\mathrm{B}}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')$ — гамильтониан опорного материала, $U^{\mathrm{B}}(\mathbf{b}-\mathbf{b}')$ — Фурье-образ периодического потенциала опорного кристалла, $f_{\mathrm{b}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ — Фурье-образ характеристической функции $f_{\mathrm{b}}(\mathbf{a})$, вычисляемый по формуле

$$f_{\mathrm{b}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_{\mathrm{b}}(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}},$$

где N — число элементарных ячеек, объем которых Ω ($V_{\mathrm{r}} = N\,\Omega$), а двухточечное „преобразование Фурье“ разности потенциалов $\Delta V(\mathbf{x})$ определяется выражением

$$\Delta V[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] = \frac{1}{\Omega}\int\limits_V d\mathbf{x}\Delta V(\mathbf{x})e^{-i[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]\mathbf{x}}.$$

Соответствующий Фурье-образ характеристических функций фиктивного мнимого потенциала запишем как

$$f_{\mathrm{d}}[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] = \frac{1}{V}\int\limits_V d\mathbf{x}f_{\mathrm{d}}(\mathbf{x})e^{-i[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')]\mathbf{x}}. \tag{7}$$

Окончательно получим следующее неоднородное уравнение Шрёдингера с микроскопическим гамильтонианом (6) в матричной форме, а также его решение $\psi_{\mathbf{bk}}(E)$:

$$\sum_{\mathbf{b}'\mathbf{k}'}(H_{\mathbf{bk},\mathbf{b}'\mathbf{k}'} - \delta_{\mathbf{bb}'}\delta_{\mathbf{kk}'}E)\psi_{\mathbf{b}'\mathbf{k}'}(E) = \rho_{\mathbf{bk}},$$

$$\psi_{\mathbf{bk}}(E) = \sum_{\mathbf{b}'\mathbf{k}'} G_{\mathbf{bk},\mathbf{b}'\mathbf{k}'}(E)\rho_{\mathbf{b}'\mathbf{k}'},$$

где функция Грина $G_{\mathbf{bk},\mathbf{b}'\mathbf{k}'}(E)$ в базисе $|\mathbf{b}+\mathbf{k}\rangle$ определяется формулой

$$G_{\mathbf{bk},\mathbf{b}'\mathbf{k}'}(E) = \langle\mathbf{b}+\mathbf{k}|\hat{G}(E)|\mathbf{b}'+\mathbf{k}'\rangle = \langle\mathbf{b}+\mathbf{k}|(\hat{H}-\hat{I}E)^{-1}|\mathbf{b}'+\mathbf{k}'\rangle,$$

а Фурье-образ источника $\rho_{\mathbf{bk}}$ — формулой

$$\rho_{\mathbf{bk}} = \langle\mathbf{b}+\mathbf{k}|\rho\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\int\limits_V d\mathbf{x}\rho(\mathbf{x})e^{-i(\mathbf{b}+\mathbf{k})\mathbf{x}}.$$

Волновая функция в координатном представлении при заданной энергии $\psi(\mathbf{x},E)$ вычисляется с помощью обратного преобразования Фурье

$$\psi(\mathbf{x},E) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{b},\mathbf{k}}\exp[i(\mathbf{b}+\mathbf{k})\mathbf{x}]\psi_{\mathbf{bk}}(E).$$

4. Приближения плавных огибающих волновых функций

Анализ в рамках метода плавных огибающих функций проводится посредством перехода от микроскопического гамильтониана (6) к эффективному однозонному гамильтониану. В этом случае для рассматриваемой зоны учитывается точный закон дисперсии носителей заряда. Определение оператора (5) в базисе собственных блоховских состояний гамильтониана опорного кристалла в рамках однозонной модели позволяет получить приближенное выражение для элементов эффективного гамильтониана:

$$\langle n\mathbf{k}|\hat{H}|n\mathbf{k}'\rangle = E^{\mathrm{B}}_n(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{kk}'} + f_{\mathrm{b}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\Delta E_n + iU_{0\mathrm{d}}f_{\mathrm{d}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'), \tag{8}$$

где $E^{\mathrm{B}}_n(\mathbf{k})$ — полная дисперсионная ветвь зонной структуры опорного материала, а матричный элемент $\Delta V[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}+\mathbf{k}')]$ в блоховском базисе в первом приближении определяет разрыв зон на интерфейсе $\Delta E_n = E^{\mathrm{A}}_n(\mathbf{k}=0) - E^{\mathrm{B}}_n(\mathbf{k}=0)$ [19]. При этом, если принять во внимание плавность изменения диссипативного потенциала, получим следующее упрощение для Фурье-образа (7):

$$f_{\mathrm{d}}[(\mathbf{b}-\mathbf{b}')+(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] \cong \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_{\mathrm{d}}(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}} \times \frac{1}{\Omega}\int\limits_\Omega d\mathbf{y}e^{-i(\mathbf{b}-\mathbf{b}')\mathbf{y}} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_{\mathrm{d}}(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}}\delta_{\mathbf{bb}'} = f_{\mathrm{d}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\delta_{\mathbf{bb}'},$$

где вводится Фурье-образ характеристической функции плавного диссипативного потенциала в приближении огибающих функций

$$f_{\mathrm{d}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{a}} f_{\mathrm{d}}(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}}.$$

В рамках метода эффективной массы однозонный гамильтониан (8) далее упрощается за счет аппроксимации дисперсии носителей заряда параболической зависимостью вблизи экстремума $E_n^{\mathrm{B}}(\mathbf{k}=0)$ [19]:

$$\langle n\mathbf{k}|\hat{H}|n\mathbf{k}'\rangle = \left[E_n^{\mathrm{B}}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\mathrm{B}}^*}\right]\delta_{\mathbf{kk}'} + \Delta E_n f_{\mathrm{b}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') + iU_{0\mathrm{d}} f_{\mathrm{d}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \quad (9)$$

Решение следующего неоднородного уравнения Шрёдингера с гамильтонианами (7)–(8) позволяет рассчитать огибающую волновую функцию $F_{\mathbf{k}}^{(n)}(E)$ носителя заряда при заданной энергии E:

$$\sum_{\mathbf{k}'}(H_{\mathbf{kk}'}^{(n)} - \delta_{\mathbf{kk}'}E)F_{\mathbf{k}'}^{(n)}(E) = \rho_{\mathbf{k}}^{(n)},$$

$$F_{\mathbf{k}}^{(n)}(E) = \sum_{\mathbf{k}'} G_{\mathbf{kk}'}^{(n)}(E)\rho_{\mathbf{k}'}^{(n)},$$

где функция Грина $G_{\mathbf{kk}'}^{(n)}(E)$ и компоненты $\rho_{\mathbf{k}}^{(n)}$ в базисе $|n\mathbf{k}\rangle$ определяются формулами

$$G_{\mathbf{kk}'}^{(n)}(E) = \langle n\mathbf{k}|\hat{G}(E)|n\mathbf{k}'\rangle = \langle n\mathbf{k}|(\hat{H} - \hat{I}E)^{-1}|n\mathbf{k}'\rangle,$$

$$\rho_{\mathbf{k}}^{(n)} = \sum_{\mathbf{b}}\langle n\mathbf{k}|\mathbf{b}+\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{b}+\mathbf{k}|\rho\rangle.$$

При этом плавная огибающая волновая функция в **a**-представлении вычисляется с помощью обратного преобразования Фурье

$$F_{\mathbf{a}}^{(n)}(E) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}}\exp(i\mathbf{ka})F_{\mathbf{k}}^{(n)}(E).$$

Отметим, что использованные нами в качестве базиса блоховские волновые функции опорного объемного кристалла, в координатном представлении удовлетворяющие периодическим условиям Борна–Кармана, образуют полный ортонормированный набор функций. Это позволяет даже при наличии диссипативных областей использовать их для представления искомых функций с нулевыми граничными условиями.

5. Результаты численного расчета

В качестве примера рассмотрим одномерные модельные гетероструктуры с двумя и тремя потенциальными барьерами для электронов нижней зоны. Ось x, вдоль которой происходит туннелирование носителей заряда, ориентирована перпендикулярно слоям материалов. Все геометрические параметры измеряются в единицах постоянной кристаллической решетки a_0. При этом энергия рассчитывается в единицах $E_0 = \hbar^2/(2m_0a_0^2)$. Толщина барьерных слоев d_{b} выбрана равной $3a_0$ и равна расстоянию между слоями d_w.

Для проведения численного расчета в рамках одномерной задачи будем рассматривать ограниченную область пространства, линейный размер которой обозначим как D. При этом значения волнового вектора K в зоне Бриллюэна кристаллов изменяются дискретным образом как $k_n = 2\pi/D[n-(N-1)/2]$, где $n = 0, 1, \ldots, N-1, N$ — общее число значений вектора $\mathbf{k}$. Далее принималось $N = 33$.

Характеристическая функция диссипативной составляющей потенциала для обеих задач выбрана в виде [15]

$$f_{\mathrm{d}}(x) = 1 - \left[\exp\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) + \exp\left(-\frac{x+\mu}{\sigma}\right) + 1\right]^{-1},$$

где μ — параметр, определяющий положение областей диссипации в пространстве, σ — параметр, описывающий плавность изменения мнимого потенциала.

Зонные структуры материалов рассчитываются с использованием модельного „Фурье-образа“ локального атомного потенциала

$$V_{\mathrm{A,B}}(q) = V_0^{\mathrm{A,B}}\exp\left(-\frac{q^2}{d_{\mathrm{A,B}}^2}\right),$$

где $V_0^{\mathrm{A,B}}$, $d_{\mathrm{A,B}}$ — параметры, для которых выбраны следующие значения: $V_0^{\mathrm{A}}/E_0 = V_0^{\mathrm{B}}/E_0 = -10$ arb. units, $d_{\mathrm{A}}a_0 = 12$ arb. units, $d_{\mathrm{B}}a_0 = 14.71$ arb. units. Порядок значений энергий и расстояний, с учетом нормировки, соответствует реальным значениям этих параметров в реальных гетероструктурах. При этом „Фурье-образы“ $V_{\mathrm{A,B}}(b)$ в точках $q = b$, т.е. форм-факторы, совпадают с Фурье-образами периодического кристаллического потенциала материалов $U_{\mathrm{A,B}}(b)$.

Для расчета зонных структур в рамках микроскопического подхода необходимо выбрать некоторое конечное количество точек S Фурье-образов кристаллического потенциала. Их число определяет количество векторов обратной решетки b. Для дальнейшего численного расчета выбрано $S = 9$ — данные точки и значения Фурье-образов в них отмечены на рис. 1. При $N = 33$ и $S = 9$ общая размерность гамильтониана — 297×297.

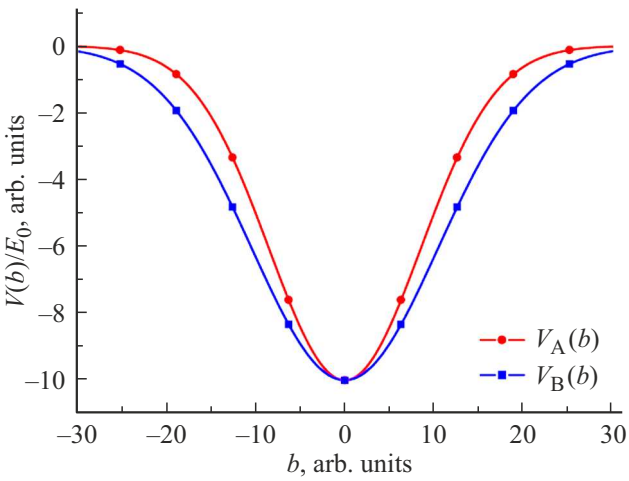

Рис. 1. Модельные Фурье-образы кристаллических потенциалов в материале A (красная линия) и материале B (синяя линия).

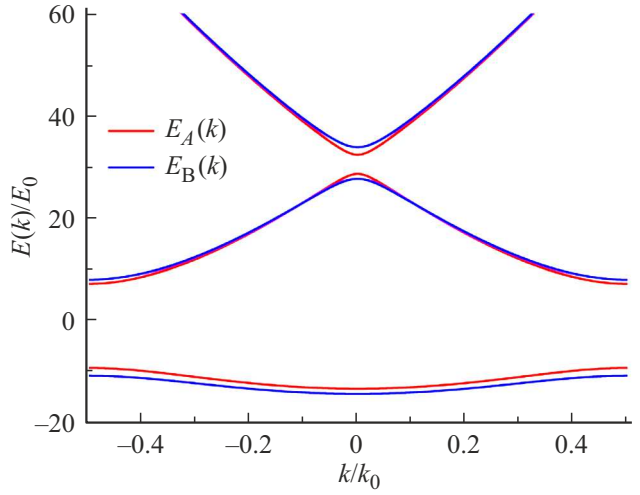

Рис. 2. Зонные структуры материалов A (красная линия) и B (синяя линия), $k_0 = 2\pi/a_0$.

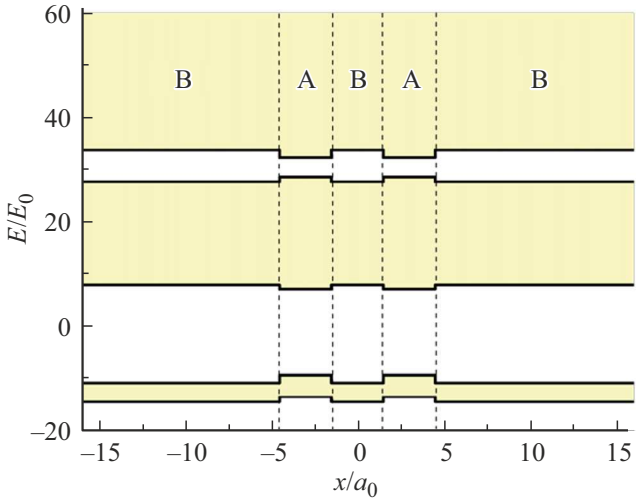

Рис. 3. Зонная диаграмма материалов для структуры с двумя потенциальными барьерами для носителей заряда нижней энергетической зоны.

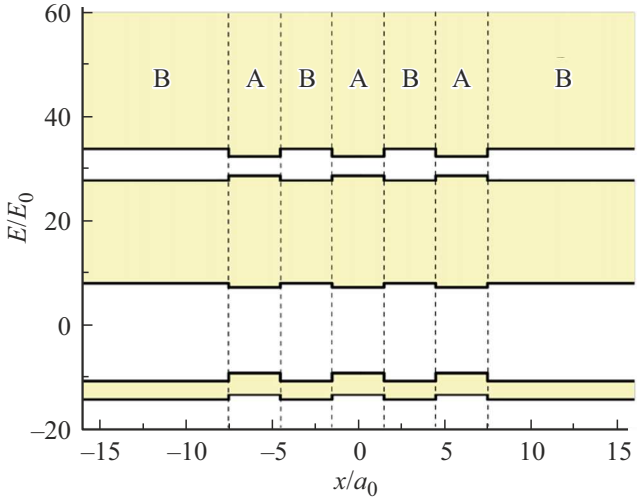

Рис. 4. Зонная диаграмма материалов для структуры с тремя потенциальными барьерами для носителей заряда нижней энергетической зоны.

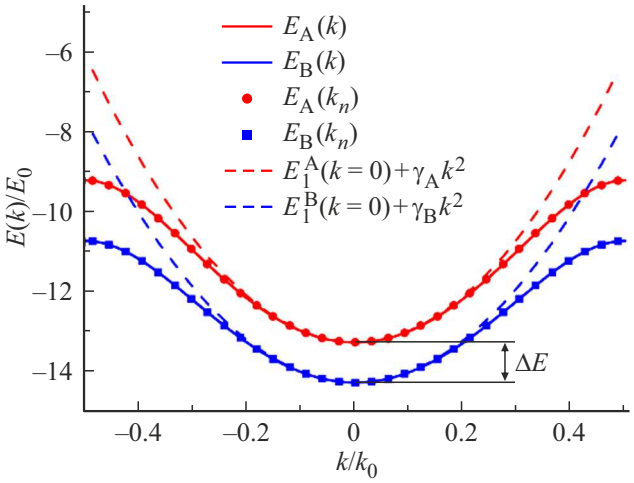

Рис. 5. Нижние дисперсионные ветви зонных структур материалов A (красная линия) и B (синяя линия).

По рассчитанным из микроскопической теории зонным структурам (рис. 2) определена картина разрывов зон (рис. 3 — двухбарьерная структура и рис. 4 — трехбарьерная структура), где закрашенные области соответствуют разрешенным зонам энергии.

Полученные диаграммы (рис. 3 и 4) определяются разностью энергий в центре и на границе зоны Бриллюэна. Для электронов нижней энергетической зоны вблизи ее дна выбранные материалы образуют систему потенциальных барьеров. При этом вблизи потолка той же зоны система барьеров переходит в систему туннельно-связанных квантовых ям для дырок.

Для последующего расчета в рамках метода эффективной массы полученные нижние дисперсионные ветви аппроксимированы параболическими зависимостями (рис. 5) вида $E_{\mathrm{A,B}}(k) = E^{(1)}_{\mathrm{A,B}}(0) + \gamma_{\mathrm{A,B}}k^2$, где $\gamma_{\mathrm{A,B}} = 1/m^*_{\mathrm{A,B}}$. Полученные значения эффективной массы при вычислении второй производной в точке $k = 0$: $m^*_{\mathrm{A}}/m_0 = 0.73$ и $m^*_{\mathrm{B}}/m_0 = 0.67$.

Рассчитаем зависимости коэффициента туннелирования от энергии носителей заряда для обеих структур, пользуясь гамильтонианом микроскопической теории (6), а также гамильтонианами методов плавных огибающих функций (8) и эффективной массы (9) — рис. 6 и 7. Энергия частицы здесь и далее отсчитывается от минимума нижней дисперсионной ветви опорного кристалла B. Здесь для удобства показаны потенциальные барьеры, определяемые разрывами зон на интерфейсах ΔE (рис. 3 и 4).

Как следует из представленных данных, резонансы в области малых энергий (рис. 6 и 7), соответствуют туннелированию носителей заряда с энергиями, соответствующими первым квазирезонансным уровням в квантовых ямах, образованных потенциальными барьерами. Количество резонансных пиков в каждой серии соответствует числу квантовых ям, образуемых барьерами структуры. Кроме того, в спектрах коэффициента туннелирования наблюдаются особенности в области энергий

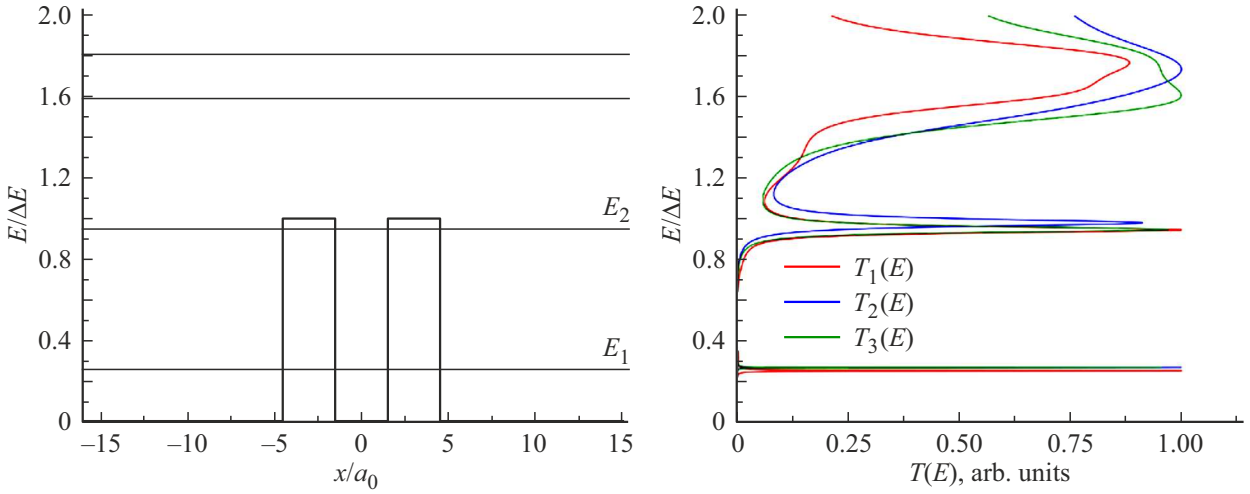

Рис. 6. Зависимости коэффициента туннелирования от энергии электрона для двухбарьерной структуры: $T_1(E)$ — микроскопическая теория, $T_2(E)$ — метод плавных огибающих функций, $T_3(E)$ — приближение эффективной массы.

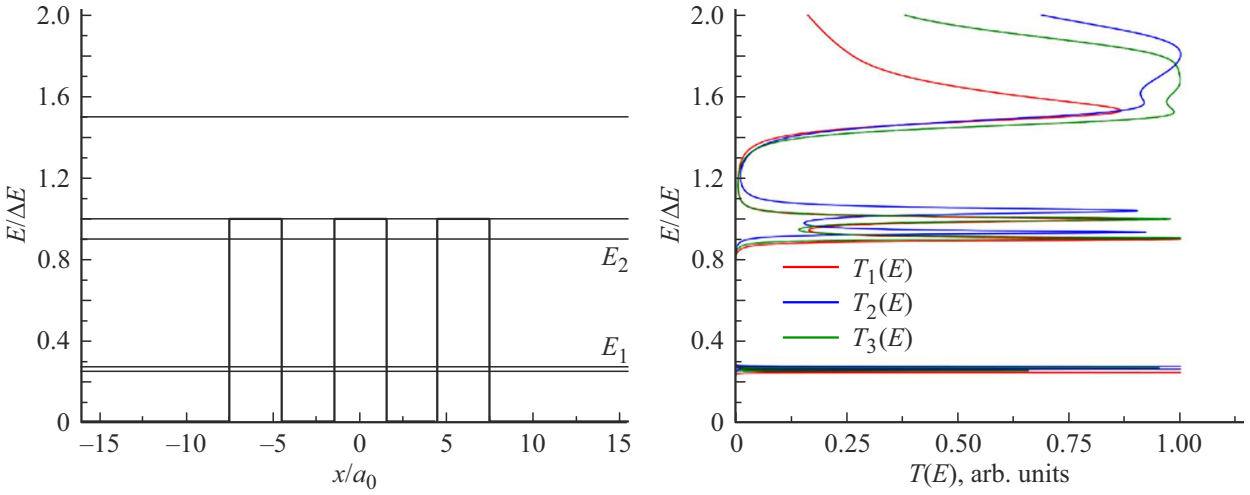

Рис. 7. Зависимости коэффициента туннелирования от энергии электрона для трехбарьерной структуры: $T_1(E)$ — микроскопическая теория, $T_2(E)$ — метод плавных огибающих функций, $T_3(E)$ — приближение эффективной массы.

выше барьера (надбарьерное отражение). Несмотря на качественное совпадение этих зависимостей для трех используемых подходов, имеется некоторое различие в положении резонансных пиков, особенно в области надбарьерного отражения. Зависимости коэффициента туннелирования от энергии, полученные в рамках метода плавных огибающих функций, существенно лучше согласуются с решением, следующим из микроскопической теории, поскольку в данном приближении учитывается полная дисперсия носителей заряда во всей зоне Бриллюэна. Однако в отличие от точного микроскопического расчета, в этом подходе не учитывается вклад короткодействующих интерфейсных поправок. Таким образом, их влияние следует считать малым по сравнению с эффектами непараболичности в законе дисперсии. Различие энергетической зависимости, рассчитанной в рамках микроскопической теории, при энергиях выше высоты потенциального барьера обусловлено влиянием непараболичности в законе дисперсии электронов, вплоть до изменения знака эффективной массы, а также вкладом короткодействующей составляющей потенциала гетероструктуры. По этой причине коэффициент туннелирования может не обращаться в единицу в области квазирезонансов (рис. 6 и 7).

На рис. 8 и 9 приведены точные $\psi(x)$ и огибающие $F(x)$ волновые функции носителей заряда для двух квазирезонансных уровней в системе. При этом верхнему уровню энергии E_2 в отличие от E_1 соответствует менее локализованная в пространстве волновая функция, что обусловлено эффектом туннелирования. Это соответствует более широкому резонансу в спектре пропускания в этой области энергий и меньшему времени жизни электрона в этом квазирезонансном состоянии.

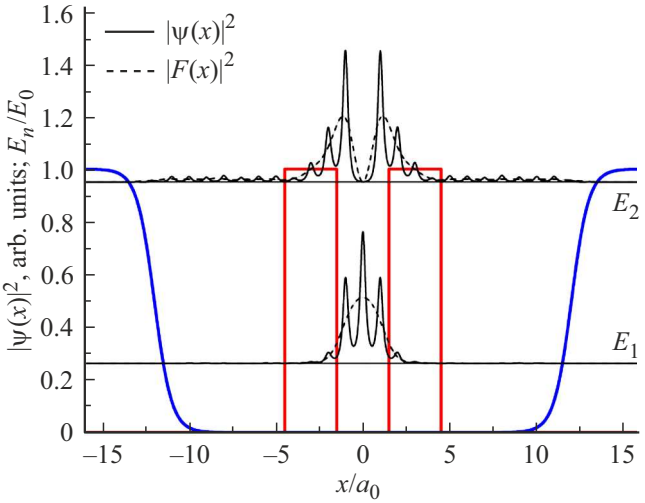

Рис. 8. Квадраты модулей точных $|\psi(x)|^2$ и огибающих волновых функций $|F(x)|^2$ носителей заряда в двухбарьерной структуре (красным и синим цветом показано распределение вещественного и мнимого потенциалов соответственно в рассматриваемой системе).

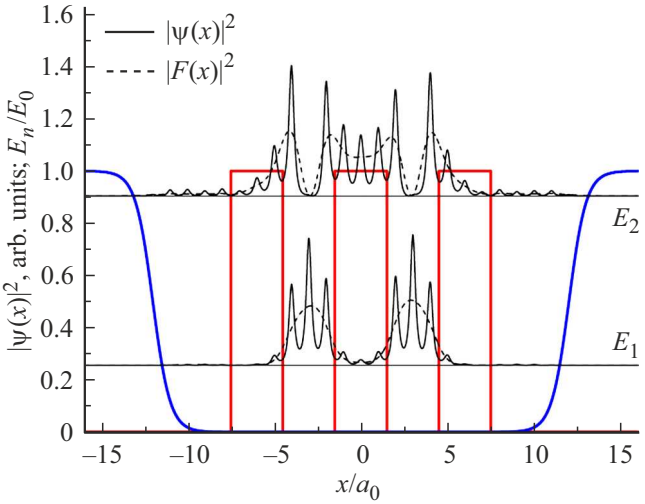

Рис. 9. Квадраты модулей точных $|\psi(x)|^2$ и огибающих волновых функций $|F(x)|^2$ носителей заряда в трехбарьерной структуре (красным и синим цветом показано распределение вещественного и мнимого потенциалов соответственно в рассматриваемой системе).

Таким образом, ширина резонансных линий, как и следовало ожидать, напрямую связана с временем жизни носителя заряда на этих уровнях. В нашем подходе оно определяется мнимой частью полюса функции Грина в нижней полуплоскости — $\tau \propto 1/\mathrm{Im}\{E\}$. Следовательно, время жизни носителя заряда, рассчитанное в рамках точной микроскопической теории, оказывается большим по сравнению с временами жизни, рассчитанными методами плавных огибающих функций и эффективной массы.

6. Заключение

Построена микроскопическая теория резонансного туннелирования в полупроводниковых гетероструктурах. На примере двухбарьерной и трехбарьерной структур исследовано резонансное туннелирование в системах с множественными потенциальными барьерами. Результат точного численного решения задачи сопоставлен с расчетами в рамках метода плавных огибающих волновых функций и метода эффективной массы. Показано, что данные, полученные с помощью метода плавных огибающих волновых функций, учитывающего точный закон дисперсии электронов во всей зоне Бриллюэна, оказываются в хорошем согласии с результатами микроскопического расчета. Таким образом, можно предположить, что интерфейсные эффекты, обусловленные короткодействующей частью интерфейсного потенциала гетероструктуры, играют несущественную роль по сравнению с эффектами непараболичности в законе дисперсии. Развитый подход позволяет анализировать явление резонансного туннелирования в полупроводниковых гетероструктурах с учетом всех особенностей зонной структуры рассматриваемых материалов.

Финансирование работы

Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2025-0007 (государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00003-25-00 от 25.12.2024).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram, H.E. Beere, E.H. Linfield, A.G. Davies, D.A. Ritchie, R.C. Iotti, F. Rossi. Nature **417**, *6885*, 156 (2002).
[2] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtorti, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho. Sci. **264**, *5158*, 553 (1994).
[3] А.А. Андронов, Е.П. Додин, Д.И. Зинченко, Ю.Н. Ноздрин, А.А. Мармалюк, А.А. Падалица. Квантовая электроника **40**, *5*, 400 (2010). [A.A. Andronov, E.P. Dodin, D.I. Zinchenko, Yu.N. Nozdrin, A.A. Marmalyuk, A.A. Padalitsa. Quantum Electron. **40**, *5*, 400 (2010).]
[4] S.M. Sharroush. Ain Shams Engg J. **9**, *4*, 1001 (2016).
[5] M.J. Avedillo, J.M. Quintana, H. Pettenghi, P. Kelly, C.J. Tompson. Electron. Lett. **39**, *21*, 1502 (2003).
[6] V.S. Olkhovsky, E. Recami, A.K. Zaichenko. Europhys. Lett. **70**, *6*, 712 (2005).
[7] J. Encomendero, F.A. Faria, S.M. Islam, V. Protasenko, S. Rouvimov, B. Sensale-Rodriguez, P. Fray, D. Jena, H.G. Xing. Phys. Rev. X **7**, *4*, 041017 (2017).
[8] J.P. Sun, G.I. Haddad, P. Mazumder, J.N. Schulman. Proceed. IEEE **86**, *4*, 641 (1998).
[9] A. Belkadi, A. Weerakkody, G. Moddel. Nature Commun. **12**, *1*, 2925 (2021).

[10] B. Ricco, M.Ya. Azbel. Phys. Rev. B **29**, *4*, 1970 (1984).
[11] S. Alomari, Q. Al-Taai, M. Elksne, A. Al-Khalidi, E. Wasige, J. Figueiredo. Opt. Express **31**, *11*, 18300 (2023).
[12] A.P. Jauho, N.S. Wingreen, Y. Meir. Phys. Rev. B **50**, *8*, 5528 (1994).
[13] Z. Dong, X. Cao, T. Wu, J. Guo. J. Appl. Phys. **123**, *9*, 094501 (2018).
[14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989). 768 с.
[15] М.В. Захарченко, Г.Ф. Глинский. ЖТФ **93**, *10*, 1396 (2023).
[16] Е.В. Доморацкий, М.В. Захарченко, Г.Ф. Глинский. Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физ.-мат. науки **17**, *1.1*, 55 (2024). [E.V. Domoratsky, M.V. Zakharchenko, G.F. Glinskii. St.Petersburg State Polytechnical University J. Phys. Math. **17**, *1.1*, 55 (2024).]
[17] D.C. Brody. J. Phys. A: Math. Theor. **47**, *3*, 035305 (2014).
[18] A. Mostafazadeh. Int. J. Geom. Methods Mod. Phys. **7**, *7*, 1191 (2010).
[19] Г.Ф. Глинский, М.С. Миронова. ФТП **48**, *10*, 1359 (2014). [G.F. Glinskii, M.S. Mironova. Semiconductors **48**, *10*, 1324 (2014).]

Редактор Е.В. Толстякова