

03,16

Микроскопическая теория резонансного туннелирования носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах

© Е.В. Доморацкий¹, М.В. Захарченко², Г.Ф. Глинский²

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 ана-

логичные 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 базе с определенным значением координаты $|x\rangle$ или путем решения системы линейных алгебраических уравнений в рамках однозонной модели в базе с определенным значением волнового вектора $|k\rangle$. 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

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1)$$

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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 А заменены атомами другого материала В. 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 В, в качестве опорного, можно составить микроскопический гамильтониан такой системы с учетом диссипативного потенциала [19]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U^B(\hat{\mathbf{x}}) + \sum_a f_b(\mathbf{a})\Delta V(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{a}) + iU_{0d}f_d(\hat{\mathbf{x}}), \quad (5)$$

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

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

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:

$$H_{\mathbf{b}\mathbf{k}, \mathbf{b}'\mathbf{k}'} = \hat{H}_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}^{\mathbf{B}}(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + f_{\mathbf{b}}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\Delta V[(\mathbf{b} - \mathbf{b}') + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')] + iU_{0d}f_d[(\mathbf{b} - \mathbf{b}') + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')], \quad (6)$$

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

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

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

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

Соответствующий Фурье-образ характеристических функций фиктивного мнимого потенциала запишем как

$$f_d[(\mathbf{b} - \mathbf{b}') + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')] = \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} f_d(\mathbf{x})e^{-i[(\mathbf{b} - \mathbf{b}') + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')]\mathbf{x}}. \quad (7)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

где $E_n^{\mathbf{B}}(\mathbf{k})$ — 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 $\Delta E_n = E_n^{\mathbf{A}}(\mathbf{k} = 0) - E_n^{\mathbf{B}}(\mathbf{k} = 0)$ [19]. При этом, если принять во внимание плавность изменения диссипативного потенциала, получим следующее упрощение для Фурье-образа (7):

$$\begin{aligned} f_d[(\mathbf{b} - \mathbf{b}') + (\mathbf{k} - \mathbf{k}')] &\cong \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} f_d(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{a}} \\ &\times \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{b} - \mathbf{b}')\mathbf{y}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} f_d(\mathbf{a})e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{a}} \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} \\ &= f_d(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}, \end{aligned}$$

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

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

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

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

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 :

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

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

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

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

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

При этом плавная огибающая волновая функция в \mathbf{a} -представлении вычисляется с помощью обратного преобразования Фурье

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

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 $n = 0, 1, \dots, N - 1, N$ — общее число значений вектора \mathbf{k} . Далее принималось $N = 33$.

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

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

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

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

где $V_0^{A,B}$, $d_{A,B}$ — параметры, для которых выбраны следующие значения: $V_0^A/E_0 = V_0^B/E_0 = -10$ arb. units, $d_{Aa_0} = 12$ arb. units, $d_{Ba_0} = 14.71$ arb. units. Порядок значений энергий и расстояний, с учетом нормировки, соответствует реальным значениям этих параметров в реальных гетероструктурах. При этом „Фурье-образы“ $V_{A,B}(b)$ в точках $q = b$, т.е. форм-факторы, совпадают с Фурье-образами периодического кристаллического потенциала материалов $U_{A,B}(b)$.

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 .

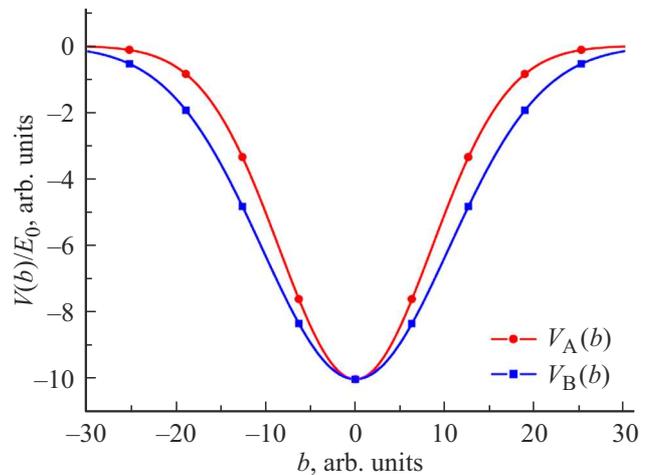


Рис. 1. Модельные Фурье-образы кристаллических потенциалов в материале А (красная линия) и материале В (синяя линия).

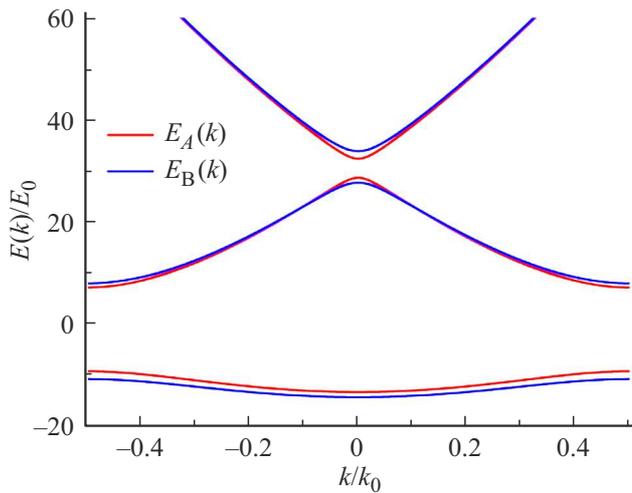


Рис. 2. Зонные структуры материалов А (красная линия) и В (синяя линия), $k_0 = 2\pi/a_0$.

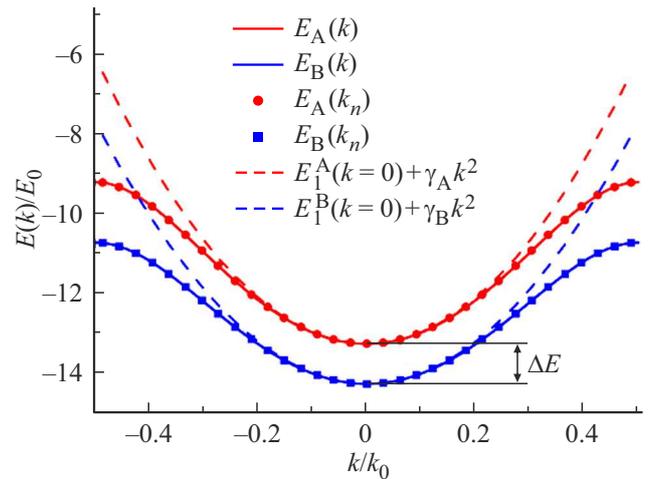


Рис. 5. Нижние дисперсионные ветви зонных структур материалов А (красная линия) и В (синяя линия).

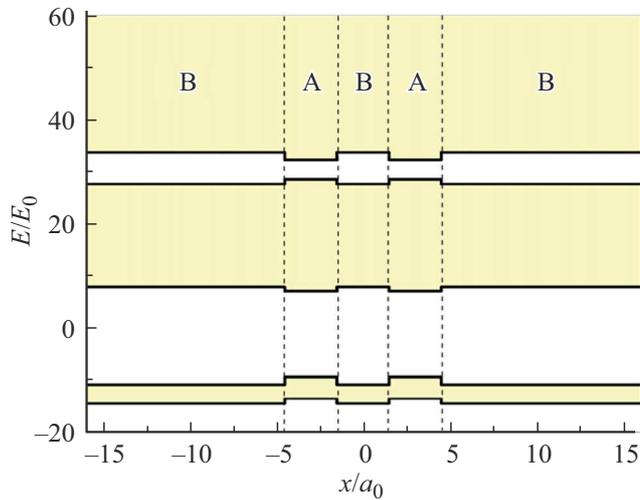


Рис. 3. Зонная диаграмма материалов для структуры с двумя потенциальными барьерами для носителей заряда нижней энергетической зоны.

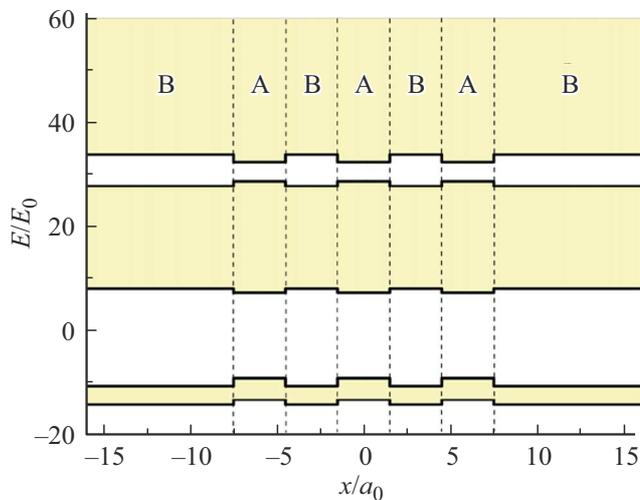


Рис. 4. Зонная диаграмма материалов для структуры с тремя потенциальными барьерами для носителей заряда нижней энергетической зоны.

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 $E_{A,B}(k) = E_{A,B}^{(1)}(0) + \gamma_{A,B}k^2$, где $\gamma_{A,B} = 1/m_{A,B}^*$. Полученные значения эффективной массы при вычислении второй производной в точке $k = 0$: $m_A^*/m_0 = 0.73$ и $m_B^*/m_0 = 0.67$.

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 В. 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

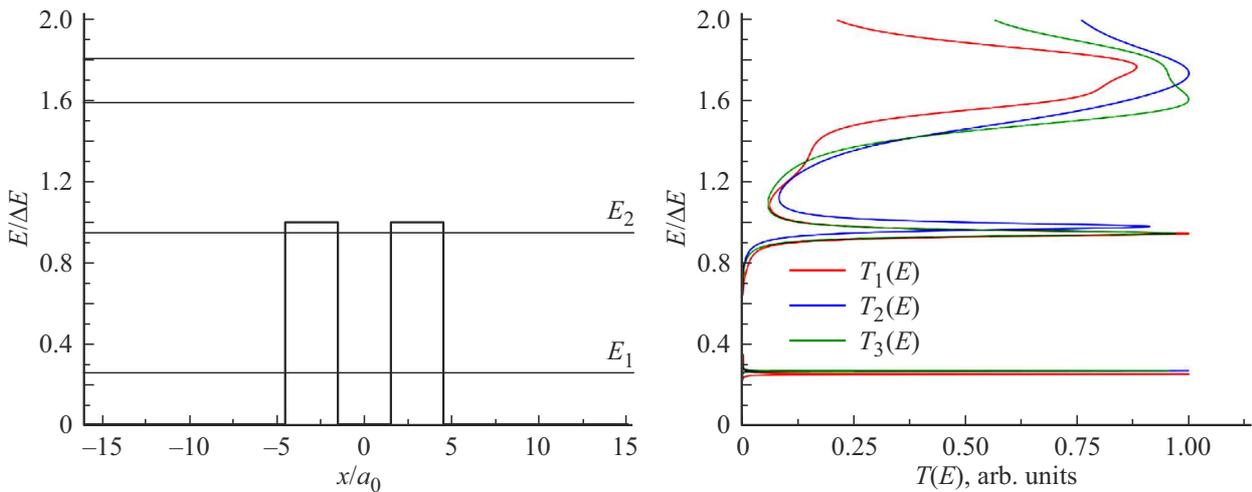


Рис. 6. Зависимости коэффициента туннелирования от энергии электрона для двухбарьерной структуры: $T_1(E)$ — микроскопическая теория, $T_2(E)$ — метод плавных огибающих функций, $T_3(E)$ — приближение эффективной массы.

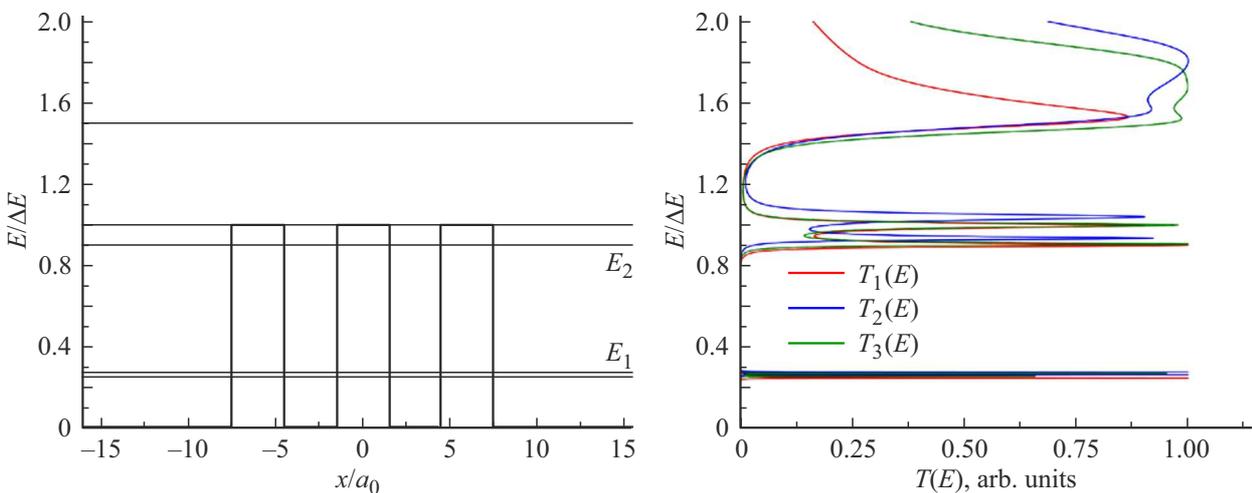


Рис. 7. Зависимости коэффициента туннелирования от энергии электрона для трехбарьерной структуры: $T_1(E)$ — микроскопическая теория, $T_2(E)$ — метод плавных огибающих функций, $T_3(E)$ — приближение эффективной массы.

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. Различия энергетической зависимости, рассчитанной в рамках микроскопической теории, при энер-

гиях 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.

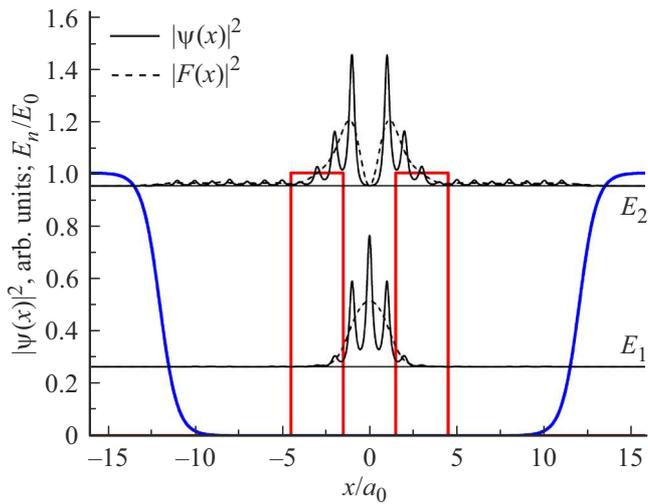


Рис. 8. Квадраты модулей точных $|\psi(x)|^2$ и огибающих волновых функций $|F(x)|^2$ носителей заряда в двухбарьерной структуре (красным и синим цветом показано распределение вещественного и мнимого потенциалов соответственно в рассматриваемой системе).

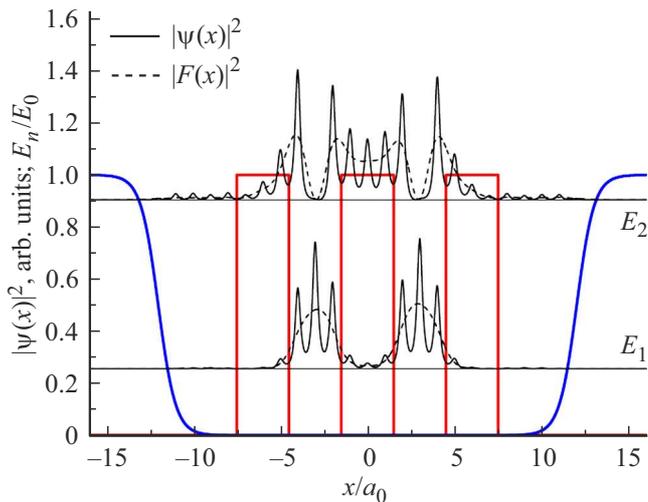


Рис. 9. Квадраты модулей точных $|\psi(x)|^2$ и огибающих волновых функций $|F(x)|^2$ носителей заряда в трехбарьерной структуре (красным и синим цветом показано распределение вещественного и мнимого потенциалов соответственно в рассматриваемой системе).

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 — $\tau \propto 1/\text{Im}\{E\}$. 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. Разработанный 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