

Нестационарное резонансное туннелирование в диодной двухбарьерной структуре

М. В. Давидович¹⁾

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия

Поступила в редакцию 18 июня 2019 г.

После переработки 17 августа 2019 г.

Принята к публикации 19 августа 2019 г.

Представлена новая модель нестационарного туннелирования без введения граничных условий, описывающая совместное решение нестационарного уравнения Шредингера и уравнения Пуассона. Модель основана на интегральном уравнении, полученном методом нестационарной функции Грина. Эта функция реализует пространственную нелокальность волнового пакета, но решение достаточно искать в конечной области. Рассмотрение выполнено для двухбарьерного резонансно-туннельного диода.

DOI: 10.1134/S0370274X19190068

Нестационарное резонансное туннелирование лежит в основе работы туннельных вакуумных диодных и триодных структур [1–4], туннельных диодов, транзисторов, приборах на эффекте Джозефсона, а также в основе принципов работы ряда других устройств и структур [5–20]. Весьма интересный для них эффект – резонансное туннелирование [5–20], на котором основана работа резонансных туннельных диодов (РТД) [5] и резонансных туннельных транзисторов (РТТ). Как вакуумные РТД и РТТ с многоэлектродной управляющей сеткой [3, 4], так и аналогичные полупроводниковые структуры перспективны для освоения ТГц диапазона [5–21]. Резонансное туннелирование также рассмотрено в углеродных нанотрубках [22], графеновых структурах [23], диодных и транзисторных структурах с квантовыми точками [24–27], включая одноэлектронные транзисторы. Важным является расчет переходных и других временных процессов. Переходные процессы для РТД рассчитаны в ряде работ [16, 17, 20, 21, 25–30]. Для нестационарного туннелирования в литературе используется ряд моделей. В [12–21] использованы модели на основе уравнения Шредингера (УШ) и уравнения Пуассона в конечной области с использованием локальных в пространстве граничных условий. В частности, в [12–16] рассмотрены модели РТД с резонансным туннелированием, когда барьеры представляют собой дельта-функцию, при этом используются решения УШ во внутрибарьерной и внебарьерной областях, которые затем сшиваются из условий непре-

рывности плотности потока и возникновения скачка производной волновой функции (ВФ), пропорциональной множителю перед дельта-функцией. Уравнение Шредингера решается совместно с уравнением Пуассона.

В ряде работ [15–21] применены нестационарные когерентные модели на основе УШ и уравнения Пуассона, использующие приближенные локальные в пространстве граничные условия (см. [31–34]) при более строгой ступенчатой аппроксимации потенциальной функции. Получение согласованных (не дающих отражения поглощающих) граничных условий для УШ и волновых уравнений рассмотрено в ряде работ, например, [31–33]. Следует отметить, что вводимые граничные условия достаточно сложны и не локальны во времени [33], поэтому часто они заменяются на приближенные [20]. Другой подход основан на туннельном гамильтониане, представленном через операторы рождения-уничтожения частиц на двух берегах туннеля и коэффициенты туннелирования [29]. Общим подходом можно считать статистический метод неравновесных функций Грина, позволяющий учесть ряд эффектов, таких как электрон-фононное или электрон-электронное взаимодействие в области барьера, релаксацию импульса, многочастичность, туннельный термоток и ряд других эффектов. Однако общность подхода усложняет окончательные результаты. Используются также кинетические подходы на основе формализма Вигнера, включающего самосогласованные потенциалы и граничные условия [30, 34]. Основная проблема во всех подходах – нелокальность волновой функции, нелокальность матрицы плотности и функции

¹⁾e-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

Вигнера–Вейля, открытость и неравновесность. Это требует введения специальных согласованных граничных условий [31–34] для моделирования в конечной области.

В данной работе на основе нестационарного УШ предложена простая модель, не требующая введения граничных условий и учитывающая пространственную нелокальность волновой функции (ВФ). Модель основана на функции Грина (ФГ) для УШ. Именно, рассмотрены конечные барьеры с их аппроксимацией трапециевидальной и прямоугольной формами, а ВФ считается единой и нелокальной в пространстве и времени, удовлетворяющей УШ, при этом потенциал считается отличным от нуля в конечной области. Наиболее просто модель реализуется для односкоростного падающего со стороны истока потока частиц. Пространственная нелокальность ВФ – основное свойство решений нестационарного УШ [15–21, 33–39]. Эта нелокальность – одна из причин трудности определения времени туннелирования волнового пакета (ВП) через барьер (далее ВФ и ВП для нестационарного УШ считаем синонимами). Имеется несколько различных определений времен туннелирования, но нет единого общепринятого (см. [36–38]). Около 60 лет известен эффект Хартмана, утверждающий возможность туннелирования со сверхсветовой скоростью (см., например, [38]), который на самом деле является парадоксом [39]. Поэтому получение нестационарных моделей туннелирования и изучение переходных процессов – важная практическая и теоретическая задача. В частности, рассчитанные в ряде работ переходные процессы демонстрируют конечные времена установления, сопоставимые с пролетом структуры частицей с набегающей на барьер скоростью [15, 17, 30].

Двухбарьерную структуру профиля потенциальной функции рис. 1 можно изготовить в различных полупроводниковых структурах, например, выполняя внешние электроды из n -GaAs, области барьеров из $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, а область ямы из GaAs. Профиль барьеров зависит от профиля легирования и их ширины. При резком однородном легировании он определяется силами изображений и обычно имеет колоколообразную форму [2, 3], которую для простоты можно считать прямоугольной (рис. 1а) с резкими углами. В случае такого барьера со стороны катода (истока) и анода (стока) на структуру набегают электроны с разными энергиями, отсчитываемыми от дна зоны проводимости с максимальной энергией Ферми E_F (считаем электронный газ в сильно легированных областях электродов вырожденным и холодным). При комнатной температуре

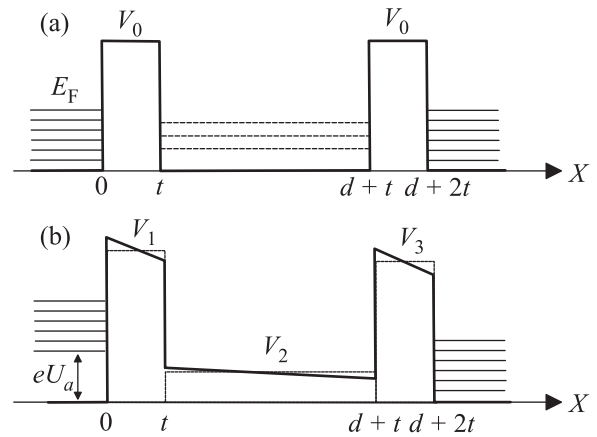


Рис. 1. Профиль потенциальной функции $V(x)$ для симметричной двухбарьерной структуры (а) (отсчет энергии от дна зоны проводимости катода), и его искажение (б) при подаче на анод напряжения U_a (отсчет энергии от дна зоны проводимости анода)

можно взять за максимум $E = E_F + 0.026$ эВ. При этом токи обоих направлений одинаковы, а полный ток равен нулю. В случае подачи на анод постоянного анодного напряжения U_a барьеры искажаются, а уровни электронов на катоде повышаются на величину eU_a (рис. 1б). Далее в упрощенной модели мы отсчитываем энергии от дна зоны проводимости стока при максимально возможном потенциале U_a (рис. 1б). Это позволяет считать потенциал отличным от нуля только в области $0 < z < d+2t$, при этом изменение (уменьшение) потенциала приводит к изменению высоты барьеров относительно максимальной энергии электронов в левой и правой областях. Именно, уровень слева опускается, а справа поднимается. При этом высоты барьеров также меняются. При $U_a = 0$ высоты выравниваются, структура становится симметричной, а ток отсутствует. Принципиально профили $V(x)$ без учета пространственного заряда можно построить методом многократных изображений [3, 4]. Электроны с катода туннелируют легче, чем с анода, и появляется анодный ток как разность токов туннелирования слева и справа. Для вычисления тока следует проводить усреднение коэффициентов прозрачности $|T^\pm|^2$ по энергиям [1–4], т.е. рассматривать многоскоростные потоки и распределение по энергиям. Для симметричной структуры рис. 1 при отсутствии падающего потока в зависимости от конфигурации имеют место метастабильные уровни. Наличие падающего односкоростного потока с энергией частиц, совпадающей с одним из уровней, приводит к резонансному стационарному туннелированию, при котором коэффициент отражения $R = 0$ [9]. Решим указанную задачу,

когда имеется только один падающий слева поток с ВФ $\psi^+(x) = A_0 \exp(ikx)$, $x < 0$. Мы используем УШ в виде

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) = [\hat{p}_x/\mu_e + V(x,t)]\psi(x,t), \quad (1)$$

где $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ – импульс, μ_e – удвоенная масса (для квазичастиц – удвоенная эффективная масса). В стационарном случае имеем зависимость от времени $\exp(-iE\hbar t)$, и для $V(x) = 0$, соответственно $E = p_x^2/\mu_e = (\hbar k)^2/\mu_e$. В области потенциального барьера будем писать $\tilde{k} = \sqrt{\mu_e(E - V)}/\hbar$, если выполнено условие $E > V$, и $\tilde{k} = i\kappa = i\sqrt{\mu_e(V - E)}/\hbar$, если $E < V$, т.е. имеет место туннелирование. Соответственно, волна, идущая слева, приобретает вид $\psi^+(x) = A^+ \exp(i\tilde{k}x) = A^+ \exp(-\kappa x)$. Для решения стационарного УШ удобно использовать импедансный подход [10] и метод матриц передачи [40]. Мы определим импеданс с размерностью длины как $z = \pm i\psi^\pm(x)/\partial_x\psi^\pm(x)$. Он определен там, где потенциальная функция постоянна или отсутствует. В последнем случае $z = k^{-1}$, в области без туннелирования $z = \tilde{k}^{-1}$, а в области с туннелированием $z = -i\kappa^{-1}$. Далее использованы нормированные (безразмерные) импедансы $\tilde{z} = zk$. Строго решить задачу с профилем рис. 1b можно только численно. Для аналитического решения мы будем заменять сложные барьеры прямоугольными. Всего их три. Нормированная классическая матрица передачи однородного участка имеет вид [40]

$$\hat{a}_n = \begin{bmatrix} \cos(\tilde{k}_n d_n) & i\tilde{z}_n \sin(\tilde{k}_n d_n) \\ i\tilde{z}_n^{-1} \sin(\tilde{k}_n d_n) & \cos(\tilde{k}_n d_n) \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Полная матрица передачи есть произведение: $\hat{a} = \hat{a}_1\hat{a}_2\hat{a}_3$. Имеем $d_1 = d_3 = t$, $d_2 = d$. Для симметричной структуры $\tilde{k} = \tilde{k}_3 = i\kappa_0 = i\sqrt{\mu_e(V_0 - E)}/\hbar$, $\tilde{k}_2 = k$, $\tilde{z}_1 = \tilde{z}_3 = -ik/\kappa_0$, $\tilde{z}_2 = 1$. Для несимметричной структуры определим их далее. Слева мы ищем решение УШ в виде $\psi(z) = A_0[\exp(ikx) + R \exp(ikx)]$, а справа в виде $\psi(z) = A_0 T \exp(ik(x - l))$. Здесь $l = d + 2t$ – полная длина структуры. Очевидно, теперь $1 + R = a_{11}T + a_{12}T$, $1 - R = a_{21}T + a_{22}T$, откуда $T = 2/[a_{11} + a_{22} + a_{12} + a_{21}]$. Коэффициент отражения можно найти из формулы, определяющей нормированный входной импеданс структуры $\tilde{z}_{in} = (1 + R)/(1 - R) = (a_{11} + a_{12})/(a_{21} + a_{22})$. Мы нашли коэффициенты при задании потока слева, т.е. фактически определили величину T^+ . Волновая функция $\psi^+(x) = A_0 \exp(ikx)$ при $A_0 = 1$ нормирована на дельта-функцию, при этом $|\psi^+(x)|^2 = |A_0|^2$ имеет смысл нормировки на плотность частиц $|A_0|^2$ в падающем потоке. Бесконечность областей слева

и справа от структуры реально реализуется посредством замыкания через источник напряжения: уходящие направо к аноду заряды проходят через источник и возвращаются на катод. Реально носители заряда имеют импульсы всех направлений, поэтому есть и обратный ток. В силу отсутствия симметрии обычно $|T^-|$ экспоненциально меньше $|T^+|$, хотя при некоторых условиях резонансного туннелирования в обратном направлении (справа налево) возможен резонанс при отсутствии такового в прямом направлении. Для коэффициентов обоих направлений $|R^\pm|^2 + |T^\pm|^2 = 1$.

Рассмотрим условия существования метастабильных уровней для симметричной структуры в отсутствии потоков. Возбуждение квантовой ямы не может существовать бесконечно долго из-за просачивания ВФ через барьеры, поэтому энергия таких состояний должна быть комплексной: $E = E' - iE''$ с зависимостью от времени $\exp(-itE'/\hbar) \exp(-tE''/\hbar)$. Мы применим метод трансформации импеданса от правой области, где $\tilde{z} = 1$ к центру структуры. В силу симметрии импеданс в центре равен либо нулю, либо бесконечности. Это зависит от того, нуль или пучность ВФ имеет место. В случае нуля имеем уравнение

$$\frac{1 + i(k/\kappa_0) \tanh(\kappa_0 t)}{1 - \tanh(\kappa_0 t)} + i \tan(kd/2) = 0, \quad (3)$$

а в случае пучности

$$1 + i \tanh(kd/2) \frac{1 + i(k/\kappa_0) \tan(\kappa_0 t)}{1 - \tanh(\kappa_0 t)} = 0. \quad (4)$$

Это комплексные трансцендентные уравнения относительно E . При приложении потенциала структура барьеров несимметричная, ВФ содержит четную и нечетную части, и оба условия приобретают вид равенства единице входного импеданса $\tilde{z}_{in} = 1$ со стороны набегающих электронов. Это означает отсутствие отражения. Выражение для \tilde{z}_{in} достаточно сложное. Если барьеры сложной непрямоугольной формы, то для определения \tilde{z}_{in} нужно решать интегральное уравнение (ИУ), как и для задачи дифракции с целью определения R и T . Такие стационарные ИУ мы не приводим. Можно также использовать ступенчатую аппроксимацию с методом матриц передачи [4], или интегрирование УШ.

Стационарную ВФ будем искать в виде $\psi_0(x) = A_n^+ \exp(ik_n(x - x_n)) + A_n^- \exp(-ik_n(x - x_n))$, где $x_1 = 0$, $x_2 = t$, $x_3 = d + t$. Ее квадрат модуля определяет плотность частиц $\rho(x) = |\psi(x)|^2$. В плотном неоднородном потоке следует учитывать вклад в потенциальную энергию от вариации плотности, кото-

рый дает решение уравнения Пуассона (считаем частицы отрицательно заряженными):

$$\partial_x^2 \Phi(x) = e\rho(x)/(\varepsilon_0\varepsilon). \quad (5)$$

Для определения плотности следует найти амплитуды A_n^\pm . Имеем $1+R = A_1^+ + A_1^-$, $1-R = (A_1^+ - A_1^-)/\tilde{z}_1$, $1+R = (\hat{a}_1)_{11}A_2^+ + (\hat{a}_1)_{12}A_2^-$, $1-R = (\hat{a}_1)_{21}A_2^+ + (\hat{a}_1)_{22}A_2^-$, $1+R = (\hat{a}_1\hat{a}_2)_{11}A_3^+ + (\hat{a}_1\hat{a}_2)_{12}A_3^-$, $1-R = (\hat{a}_1\hat{a}_2)_{21}A_3^+ + (\hat{a}_1\hat{a}_2)_{22}A_3^-$. Можно написать и другие соотношения. Из приведенных формул определяются все амплитуды. Рассмотрим форму $V(x)$ при малой плотности и напряжении на аноде U_a . Считаем, что в приближении прямоугольных барьеров потенциальная функция спадает линейно. В области первого барьера $V(x) = V_0 + eU_a - \alpha x$. В области ямы имеем $V(x) = eU_a - \alpha t - \beta(x-t)$. В области второго барьера $V(x) = V_0 + eU_a - \alpha t - \beta d - \alpha(x-d-t)$. В конце структуры $V(l) = eU_a - 2\alpha t - \beta d = 0$. Еще раз заметим, что отсчет энергии для удобства идет от дна зоны проводимости на аноде, рис. 1б. Поскольку в области ямы плотность носителей существенно выше, чем в области барьера, а диэлектрические проницаемости также могут различаться, то $\alpha \gg \beta$. Задавая коэффициент $\delta = \beta/\alpha \ll 1$, связанный с уровнями легирования барьеров, определяем $\alpha = eU_a/(2t + \delta d)$. Линейное изменение потенциала удовлетворяет уравнению Лапласа при подаче напряжения на анод. Теперь можно определить высоты барьеров для упрощенной модели:

$$\begin{aligned} V_1 &= V_1 + eU_a - \alpha t/2, \\ V_2 &= eU_a - \alpha t - \delta\alpha d/2, \\ V_3 &= V_0 + eU_a - 3\alpha t/2 - \delta\alpha d. \end{aligned}$$

По ним определяем величины \tilde{k}_n , импедансы \tilde{z}_n и вычисляем ВФ. Влияние плотности на потенциальную энергию определяем из решения уравнения Пуассона (5) в виде

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_n \sin(n\pi x/l), \\ \alpha_n &= \frac{-2e}{\varepsilon_0\varepsilon d} \int_0^l \rho(x) \sin(n\pi x/l) dx. \end{aligned} \quad (6)$$

Решение в форме (6) добавляет потенциальную функцию $-e\Phi(x)$ к $V(x)$. Высоколегированные области электродов можно считать идеальными электрическими стенками, поэтому в (6) взяты нулевые граничные условия. Если решать уравнение Пуассона только в области ямы, то следует использовать функции $\sin(n\pi(x-t)/d)$.

Рассмотрим следующую модель. До момента $t = 0$ имеется стационарное решение с ВФ $\psi_0(x, t) = \psi_0(x) \exp(-iEt/\hbar)$ с профилем $\tilde{V}(x)$, возникающим при постоянном напряжении U_a . Очевидно, его можно уточнить, определив плотность $\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2$:

$$\begin{aligned} \rho_0(x) &= |A_2^+|^2 + |A_2^-|^2 + 2\text{Re}(A_2^+ A_2^{-*}) \cos(2\tilde{k}_2(x-t)) - \\ &- 2\text{Im}(A_2^+ A_2^{-*}) \sin(2\tilde{k}_2(x-t)). \end{aligned} \quad (7)$$

Эта плотность записана для ямы, поскольку на барьерах она сказывается слабо. Уточнение следует делать методом итераций, поскольку амплитуды зависят от ВФ и от $\rho(x)$. Модель на основе итераций с начальным значением (7) может быть только численной, поскольку потенциальная функция приобретает сложный профиль. Мы предположим, что на начальном этапе плотность не влияет на $\tilde{V}(x)$. Пусть в момент $t = 0$ включается переменный анодный потенциал $U(t) = U_a(1 + \gamma \sin(\omega_0 t))$, т.е. включается переменная, составляющая $U_a \gamma \sin(\omega_0 t)$ анодного напряжения. Заметим, что максимальное значение потенциала, которое следует учитывать в расчетах, $U_a(1 + \gamma)$. Также заметим, что не важно, целиком ли включать потенциал $U(t)$ в указанный момент, или только его переменную часть, считая постоянную часть уже действующей. Первая постановка более простая, поскольку начальный барьер симметричный, а начальная ВФ $\psi_0(x, t)$ проще. При этом начальный ток отсутствует. ВФ ищем в виде $\psi(x, t) = \psi_0(x, t) + \delta\psi(x, t)$. Эта ВФ удовлетворяет УШ (1) с $V(x, t) = \tilde{V}_0(x) + \delta\tilde{V}(x, t)$, где $\tilde{V}_0(x)$ определяет начальную форму барьера, а $\delta\tilde{V}(x, t)$ – ее вариацию со временем. Очевидно, $V(x, t)$ получается заменой во всех формулах U_a на $U(t)$, а $\delta\tilde{V}(x, t)$ пропорциональна $U_a \gamma \sin(\omega_0 t)$. Обозначим оператор Шредингера $\hat{S}(x, t) = i\hbar\partial_t + \hbar^2\mu_e^{-1}\partial_x^2$ и введем пропагаторную ФГ $K_0(x, t) = \sqrt{\mu_e/(4i\pi\hbar t)} \exp(ix^2\mu_e/(4\hbar t))$ [41, 42] свободного поля $\psi(z, t)$ (при $V = 0$). Эта ФГ имеет размерность, обратную длине, удовлетворяет граничному условию $K_0(x, t) = 0$ для $t \leq 0$ и отвечает за движение свободного ВП $\varphi(z, t)$, заданного в момент t' :

$$\psi(z, t) = \int_a^b K_0(x-x', t-t')\varphi(x', t')dx'.$$

Интегрировать следует по всей области задания ВП. Если ВП не локальный, то $a = -\infty$, $b = \infty$. Если область значений ВП конечная, т.е. он в момент t' локальный, то в любой момент $t > t'$ ВП становится бесконечно распределенным в пространстве, т.е. нелокальным. Если в момент t_0 частица локализована в точке x_0 , т.е. $\varphi(x, t_0) = \delta(x-x_0)$,

то $\psi(z, t) = K_0(x - x_0, t - t_0)$. Функция Грина K_0 с точностью до множителя $i\hbar$ есть функция источника для оператора Шредингера [41], поскольку $\hat{S}(x, t)K_0(x, t) = i\hbar\delta(t)\delta(z)$. Действительно, этот результат получается из приведенного УШ с дельта-функциями методом Фурье и путем вычисления интегралов методом вычетов. Для непосредственной проверки дифференцированием введенную ФГ следует понимать как умноженную на функцию Хевисайда $\chi(t)$: $K_0(x, t) \rightarrow \chi(t)K_0(x, t)$ [41]. Тогда, учитывая, что $\partial_t\chi(t) = \delta(t)$ и $K_0(x, 0) = \delta(x)$, получаем указанный результат. Поэтому с помощью ФГ K_0 можно записать ИУ, которому удовлетворяет ВП в произвольном потенциальном поле. Пишем

$$\begin{aligned} & \left[\hat{S}(x, t) - V(x, t) \right] \psi(x, t) = \\ & = \left[\hat{S}(x, t) - \tilde{V}_0(x) - \delta\tilde{V}(x, t) \right] (\psi_0(x, t) + \delta\psi(x, t)) = 0. \end{aligned}$$

Поскольку $\left[\hat{S}(x, t) - \tilde{V}_0(x) \right] \psi_0(x, t) = 0$, имеем уравнения

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \tag{8} \\ &= -i\hbar^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x - x', t - t') V(x', t') \psi(x', t') dx' dt', \end{aligned}$$

$$\hat{S}(x, t)\delta\psi(x, t) = \tilde{V}_0(x)\delta\psi(x, t) + \delta\tilde{V}(x, t)\psi(x, t). \tag{9}$$

Уравнение (9) позволяет определить $\delta\psi(x, t)$, следовательно, и ВФ:

$$\begin{aligned} \delta\psi(x, t) &= -i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^l K_0(x - x', t - t') \times \\ &\times \left[\tilde{V}_0(x')\delta\psi(x', t') + \delta\tilde{V}(x', t')\psi(x', t') \right] dx' dt'. \tag{10} \end{aligned}$$

В этом уравнении интеграл взят по конечной области пространства-времени, поскольку именно там отлична от нуля величина $\delta\tilde{V}(x, t)$, а также и $\tilde{V}(x)$ в произведении $\tilde{V}(x)\delta\psi(x, t)$. Сама функция $\delta\psi(x, t)$ определена везде. Теперь ИУ приобретает вид

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \psi_0(x, t) - i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^l K_0(x - x', t - t') \times \\ &\times \left[\tilde{V}_0(x')(\psi(x', t') - \psi_0(x', t')) + \delta\tilde{V}(x', t')\psi(x', t') \right] dx' dt'. \end{aligned}$$

Его можно записать так:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \tilde{\psi}_0(x, t) - \tag{11} \\ &- i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^l K_0(x - x', t - t') V(x - x', t - t') \psi(x', t') dx' dt', \end{aligned}$$

$$\tilde{\psi}_0(x, t) = \psi_0(x, t) + \tag{12}$$

$$+ i\hbar^{-1} \int_0^t \int_0^l K_0(x - x', t - t') \tilde{V}_0(x') \psi_0(x', t') dx' dt'.$$

Входящая в (11) функция (12) вычисляется через известные величины. Для нее выполнено $\tilde{\psi}(x, 0) = \psi_0(x, 0)$. Поскольку $\tilde{V}_0(x)\psi_0(x, t) = \hat{S}(x, t)\psi_0(x, t)$, (12) можно проинтегрировать по частям, но это не целесообразно. Заметим, что ИУ (11) определяет ВФ во всей бесконечной области в любой момент, однако находить его решение достаточно в конечной области. Если вдруг в момент τ потенциал $U(t)$ прекратил действовать, то в верхнем пределе интеграла в (11) следует взять τ . Если же он вовсе не начинал действовать, интегралы исчезают, и тогда $\tilde{\psi}_0(x, t) = \psi_0(x, t)$, $\psi(x, t) = \psi_0(x, t)$, т.е. имеем стационарное решение. Интегральное уравнение (8) не удобно для использования из-за бесконечных границ, в которых надо определять ВФ. Заметим также, что можно ввести ФГ $G(x, t)$ для УШ (1), удовлетворяющую ИУ

$$\begin{aligned} G(x, t; x', t') &= K_0(x - x', t - t') - i\hbar^{-1} \times \\ &\times \iint K_0(x - x'', t - t'') V(x'', t'') G(x'', t''; x', t') dx'' dt'', \end{aligned}$$

представив ее в виде ряда теории возмущений интегральных операторов \hat{K}_0^n , упорядоченных по времени [41]. В этом случае уравнение (8) можно переписать, формально заменив K_0V на G . Возможно применение диаграммной техники Фейнмана. Однако использовать теорию возмущений для поиска ВФ в бесконечной области не очень удобно. Проверить, что ИУ для ФВ (11) удовлетворяет УШ (1) можно, подействовав на нее оператором \hat{S} и учитывая, что $K_0(x, 0) = 0$ [41, 42].

Будем решать ИУ (11) методом дискретного времени, разбивая временной промежуток на моменты $t_m = m\Delta t$, $m = 0, 1, 2, \dots$. Для ФВ (12) имеем квадратурные формулы

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x, t_m) &= \psi_0(x, t_m) + i\hbar^{-1} \Delta t \int_0^t \tilde{V}_0(x') \times \\ &\times \sum_{n=1}^m K_0(x - x', (m - n + 1/2)\Delta t) \psi_0(x', (n - 1/2)\Delta t) dx'. \end{aligned}$$

Точно также для (11) получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, t_m) &= \tilde{\psi}_0(x, t_m) - i\hbar^{-1} \Delta t \times \tag{13} \\ &\times \int_0^l \sum_{n=1}^m K_0(x - x', t_m - t_n + \Delta t/2) V(x', t_n) \psi_0(x', t_n) dx' dt'. \end{aligned}$$

Для определения ВФ из ИУ (13) его следует решать численно. При этом в потенциальную энергию необходимо добавлять электростатическую часть $-e\Phi(x)$, вычисленную на каждом временном шаге. Для решения (13) используем метод Галеркина и разложения

$$\psi(x, t_m) = \sum_{n=0}^N \left[\alpha_n^m \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) + \beta_n^m \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \right]. \quad (14)$$

Функции в (14) ортогональны. Каждая из систем функций полна, а всего в (14) $2N + 1$ ($\beta_0^m = 0$) функций. Две системы функций взяты, поскольку первая из них имеет нулевые граничные условия для произвольных, а вторая – нулевые для самих функций на границах области, поэтому на граничные условия ВФ (14) не наложены жесткие граничные условия. Мы не приводим явный вид получающихся матриц для системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Численное вычисление матриц и решение СЛАУ на каждом временном шаге занимает основное время алгоритма. Найдя коэффициенты, можно вычислить плотность тока (направление взято от анода к катоду):

$$J(x, t_m) = -ie\hbar\mu_e^{-1} [\partial_x \psi(x, t_m) \psi^*(x, t_m) - \psi^*(x, t_m) \partial_x \psi(x, t_m)]. \quad (15)$$

Эта величина имеет размерность A/m^2 , если входной односкоростной поток $|A_0|^2$ определяет число частиц в единице объема. Если же размерность $|A_0|^2$ есть m^{-1} (число частиц на единицу длины), то (15) определяет ток. Строгое вычисление тока требует решать задачу для разных энергий набегающих частиц с усреднением величины (15) по функции распределения электронов по импульсам, а также учитывать и обратный ток. Вычисление плотности падающего потока $\rho(k)dk = |A_0|^2$ возможно на основе знания концентрации носителей и определения числа носителей, набегающих нормально на границу катод-барьер с заданной величиной импульса в интервале импульсов $\hbar k \leq p_x \leq \hbar(k + dk)$. Соответственно, $\rho(k)$ – плотность на единичный интервал в k -пространстве. Нормируя ВФ ψ^+ на $\rho(k)dk$, интегральную величину (15) следует получать интегрированием по всей области значений k . При этом для каждого k следует решать односкоростную задачу по определению ВФ $\psi_k(x, t)$, а затем уже интегрировать по k для определения тока. Можно сформировать падающую ВФ в форме многоскоростного ВП, определенного при $x = 0$:

$$\psi^+(x, t) = \int \tilde{\rho}(k) \exp(ikx - i\hbar k^2 t / \mu_e) dk. \quad (16)$$

Односкоростная ВФ получается из (16), если $\tilde{\rho}(k) = \tilde{\rho}(k)\delta(k - k')$. При этом имеет место соответствие $\rho(k') = |\tilde{\rho}(k')|^2$. Волновой пакет (16) задан на входе, поскольку задание его на $-\infty$ невозможно в силу его расплывания при движении. Зная падающую односкоростную ВФ $\tilde{\rho}(k) \exp(ikx - i\hbar k^2 t / \mu_e)$, можно определить ВФ $\psi_0(x, t, k)$, фигурирующую в (11), (12). Тогда ток вычисляется по формуле

$$J(x, t_m) = 2e\hbar\mu_e^{-1} \int \rho(k) \text{Im}(\partial_x \psi_k(x, t_m) \psi_k^*(x, t_m)) dk, \quad (17)$$

в которой ВФ определены для заданного значения k . Плотность набегающих на барьер электронов определяется величиной $\rho(k) = \mu_e k_B T (2\pi\hbar)^{-2} \ln(1 + \exp((E_F - (k\hbar)^2 / \mu_e) / (k_B T)))$. Здесь T – температура. В полупроводниковых структурах эффективная величина μ_e от слоя к слою может меняться, а также может зависеть от k , что следует учитывать при определении ФВ и ФГ. Мы рассмотрели в качестве носителей заряда только электроны. Переменный потенциал создает переменные, расходящиеся от структуры, потоки. В стационарном случае баланс рассеянных (расходящихся от структуры) потоков дается выражением $|R|^2 + |T|^2 = 1$. Поскольку в модель не заложены процессы ионизации и рекомбинации, баланс в среднем по идее также должен сохраняться. Однако проверка возможна только численно. Отраженный поток следует определять по части ВФ в области $x < 0$, вычленив из нее $A_0 \exp(ikx)$. Поскольку падающий справа поток в решении не рассмотрен, прошедший поток можно определить из (13), сократив на заряд электрона. С учетом (14) имеем односкоростной ток на выходе структуры

$$J_{ot}(t_m) = J(l, t_m) = -2e\hbar\mu_e^{-1} \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^N (-1)^{n+n'} \frac{n\pi}{l} \text{Im}(\beta_n^m \alpha_{n'}^{m*}), \quad (18)$$

и ток на ее входе

$$J_{in}(t_m) = J(0, t_m) = -2e\hbar\mu_e^{-1} \sum_{n=1}^N \sum_{n'=0}^N \frac{n\pi}{l} \text{Im}(\beta_n^m \alpha_{n'}^{m*}). \quad (19)$$

Количество втекающего в секунду в структуру заряда подчиняется уравнению

$$\partial_t Q(t_m) = J_{ot}(t_m) - J_{in}(t_m) = \partial_t U(t_m) C_d,$$

где C_d – ее полная диффузионная емкость. В модели электростатическая емкость явно не учтена. Ее можно оценить, зная структуру барьеров и площадь поперечного сечения. Соответственно в модель следует добавить ток смещения $J_c(t_m) = -\partial_t U(t_m) C$.

Наличие емкости не позволяет мгновенно включить потенциал.

В качестве примера возьмем односкоростной поток со значением плотности $|A_0|^2 = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, двумя барьерами $V_0 = 0.6 \text{ эВ}$ с ширинами 4 нм и расстоянием между ними 6 нм, величиной $U_a = 0.3 \text{ В}$, $\gamma = 0.3$, $\delta = 0.1$, частотой $\omega_0 = 10^{13} \text{ Гц}$, удвоенной эффективной массой $\mu_e = 0.14m_e$, энергией набегающих частиц $E = 0.072 \text{ эВ}$ и их скоростью $v = 0.5 \cdot 10^6 \text{ м/с}$. На рисунке 2 приведены рассчитанные зависимости $U(t)$ и $J(t)$. Уравнение Пуас-

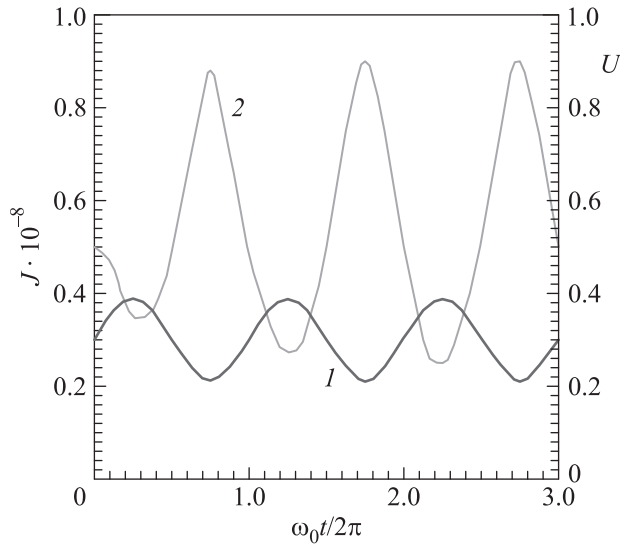


Рис. 2. (Цветной онлайн) Напряжение $U(\tilde{t})$, В (1) и плотность тока (2) $J(\tilde{t}) \cdot 10^{-8}$, А/м² в зависимости от нормированного времени $\tilde{t} = \omega_0 t / (2\pi)$

сона не решалось, бралась упрощенная структура с тремя прямоугольными барьерами и использовалось значение $N = 40$. Из рисунка 2 видно, что имеет место сдвиг по фазе, примерно равный π , что говорит в пользу того, что при данных параметрах реализуется отрицательная дифференциальная проводимость, а структура может функционировать как генератор частот ω_0 и $3\omega_0$. Отклик структуры начинается мгновенно в силу свойств ФГ для УШ и того, что частицы присутствуют во всей рассматриваемой области. Однако установление переходного процесса требует времени. Это время порядка времен пролета структуры $\tau = 3 \cdot 10^{-14} \text{ с}$ и жизни метастабильного уровня, что меньше периода $T_0 = 2\pi/\omega_0$. В работах [17, 21] для структуры, близкой к рассмотренной, получены времена переходных процессов в диапазоне $2 \cdot 10^{-14} - 10^{-12} \text{ с}$. Вычисленные по модели переходные процессы при включении напряжений U_a , равных 0.1 и 0.25 В, устанавливаются от нуля примерно за 200 фс в первом случае монотонно, а во втором

случае со всплеском. Имеющиеся в [17, 21] осцилляции связаны с плазменными колебаниями пространственного заряда, который в рассматриваемой модели не учтен.

Для теоретического определения времени туннелирования удобно рассмотреть одиночный прямоугольный барьер $V(x) = V_0$ при $0 < x < d$ с учетом одностороннего потока. Для него ВФ имеет хорошо известный вид, при этом $J = |A_0|^2 |T|^2 v$. Пусть в момент $t = 0$ барьер пропадает на время Δt , а затем возникает вновь. Начинается переходный процесс, отклик в котором в виде тока возникает мгновенно. Это связано с тем, что частицы противоположных потоков “присутствуют” в области барьера. Вид переходного процесса сильно зависит от ширины барьера и Δt . Можно рассматривать и $\Delta t = \infty$, т.е. “выключение” барьера с переключением тока до максимального значения $J_0 = |A_0|^2 v$. Переключение потенциала изменяет энергию системы и энергию отдельного электрона, которая при малых временах не определена. После завершения переходного процесса УШ снова можно считать стационарным, а энергию отдельной частицы в потоке заданной. Более просто задача решается для свободного потока с ВФ $\psi_0 = A_0 \exp(i(kx - Et/\hbar))$, когда потенциал включается на время Δt . В этом случае ВФ удовлетворяет уравнению

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) - i\hbar^{-1} V_0 \int_0^{\tilde{t}} \int_0^d K_0(x - x', t - t') \psi(x', t') dx' dt'. \quad (20)$$

При $t < 0$ имеем начальное условие $\psi(x, t) = \psi_0(x, t)$. При $t < \Delta t$ верхний предел $\tilde{t} = t$. При $t > \Delta t$ верхний предел $\tilde{t} = \Delta t$. При $t \gg \Delta t$ ФГ стремится к нулю, поэтому $\psi(x, t) \rightarrow \psi_0(x, t)$. Изменение потенциала сильно изменяет ВФ в области барьера, поэтому для ее определения при $t > \Delta t$ удобно вычислить интеграл по теореме о среднем, вынося из-под знака интеграла среднее значение K_0 :

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) - \frac{V_0 \sqrt{i\mu_e} \bar{\psi} d \Delta t}{2\hbar \sqrt{\pi\hbar} |t - \Delta t/2|} \exp(i\Phi(x, t)). \quad (21)$$

Здесь обозначена фаза

$$\Phi(x, t) = \frac{(x - d/2)^2 \mu_e}{4\hbar |t - \Delta t/2|},$$

а $\bar{\psi}$ означает ВФ, усредненную по области барьера и за время Δt . Ее можно найти, усредняя (21). Усреднение ψ_0 по времени дает множитель $\text{sinc}(E\Delta t/(2\hbar))$, где обозначена функция $\text{sinc}(t) = \sin(t)/t$. Усредняя

эту ВФ по координате, имеем $\bar{\psi}_0 = A_0 \exp(ikd/2 - iE\Delta t/(2\hbar)) \text{sinc}(kd/2) \text{sinc}(E\Delta t/(2\hbar))$. Усредняя правую часть в (21), учтем, что при $t \approx \Delta t/2$ экспонента быстро осциллирует, поэтому полагаем $t = \Delta t$ и, используя метод стационарной фазы, имеем

$$\frac{1}{\Delta t d} \int_0^t \int_0^d \frac{\exp(i\Phi(x, t))}{|t - \Delta t/2|^{1/2}} dx dt \approx \sqrt{\frac{8}{\Delta t}} \left(1 + \frac{id^2 \mu_e}{24\hbar \Delta t}\right).$$

Окончательно получаем

$$\bar{\psi} \approx \bar{\psi}_0 / \left[1 + \frac{V_0 d}{\hbar} \sqrt{\frac{2i\mu_e \Delta t}{\pi \hbar}} \left(1 + \frac{id^2 \mu_e}{24\hbar \Delta t}\right)\right].$$

Приближенно $\bar{\psi}$ можно найти другим способом, усреднив стационарную ВФ внутри барьера, что не принципиально, поскольку эта величина определяет только множитель в (21). Отбросим малую экспоненциально нарастающую часть ВФ, взяв ее пространственную часть в виде $\psi(x) = A_0 T \exp(-\kappa(x-d))(1 - ik/\kappa)/2$. Обозначив $\eta = k/\kappa = \sqrt{E(V_0 - E)}$, теперь получаем

$$\bar{\psi} = \frac{A_0 T (1 - i\eta)}{2} \exp\left(-\frac{\kappa d}{2} - i\frac{E\Delta t}{2\hbar}\right) \times \frac{\sinh(\kappa d/2)}{\kappa d/2} \text{sinc}\left(\frac{E\Delta t}{2\hbar}\right).$$

В обоих случаях имеем $\bar{\psi} = A_0 \xi \exp(i\varphi)$, где ξ – положительная величина, а φ – фаза. В нее входит и фаза коэффициента прохождения. Введем убывающую функцию времени

$$\alpha(t) = \frac{V_0 \xi d \Delta t}{2\hbar} \sqrt{\frac{\mu_e}{\pi \hbar |t - \Delta t/2|}}$$

и запишем ВФ (21) в виде $\psi(x, t) = A_0 [\exp(ikx - iEt/\hbar) - \beta(t) \exp(i\Phi(x, t))]$. Здесь $\beta(t) = \alpha(t) \exp(i(\varphi + \pi/4))$. Используем эту ВФ для вычисления тока (15) в точке $x = d$:

$$\frac{J(d, t)}{J_0} = 1 - \frac{\mu_e d \alpha^2(t)}{4k\hbar |t - \Delta t/2|} + \left(1 - \frac{\mu_e d}{4k\hbar |t - \Delta t/2|}\right) \alpha(t) \cos(\Theta(t)). \quad (22)$$

Здесь $J_0 = J(d, t)$. Поскольку коэффициент прохождения имеет вид

$$T = \frac{-4i\eta \exp(-\kappa d)}{(1 - i\eta)^2 - (1 - i\eta)^2 \exp(-2\kappa d)} \approx -\frac{4i\eta \exp(-\kappa d)}{(1 - i\eta)^2},$$

фаза Θ в (22) определена как $\Theta(t) = \Phi(d, t) - kd + \pi/4 - \arctan(\rho^{-1})$. Имеем также

$$\xi = \frac{2\rho}{\sqrt{1 + \rho^2}} \exp\left(-\frac{3\kappa d}{2}\right) \frac{\sinh(\kappa d/2)}{\kappa d/2} \text{sinc}\left(\frac{E\Delta t}{2\hbar}\right) \approx$$

$$\approx \frac{2\rho \exp(-\kappa d)}{\kappa d \sqrt{1 + \rho^2}} \text{sinc}\left(\frac{E\Delta t}{2\hbar}\right).$$

Для применимости расчета должно быть $\Delta t < 2\pi\hbar/E$, что в нашем случае выполняется. На рисунке 3 приведены результаты расчета по формуле (22) и на основе решения ИУ (20). Видно, что основная часть переходного процесса занимает время $\tau = d/v$.

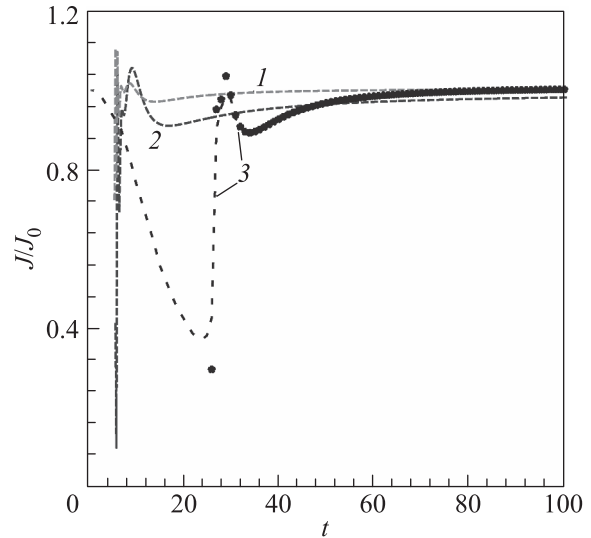


Рис. 3. (Цветной онлайн) Переходный процесс (время в фс) при включении потенциала для $d = 2$ нм, $V_0 = 0.5$ эВ, $E = 0.47$ эВ (1), $E = 0.45$ эВ (2, 3); $\Delta t = 10$ фс (1, 2); $\Delta t = 50$ фс (3). Штриховая линия – вычисление на основе решения ИУ (20)

Описанная процедура изменения тока при изменении потенциала может быть проверена экспериментально. Именно, пусть односкоростной электронный поток создает автоэмиссионная электронная пушка. Пучок проходит отверстие в аноде и попадает на наноразмерную сетку с потенциалом $U = -V_0/e$ относительно анода. Сетка имитирует барьер. Прощедший сетку ток измеряется как ток коллектора. Проблема измерения малых времен может быть решена разными способами, например, модуляцией двух пучков с выделением тока разностной частоты. Среднее время переходного процесса нельзя непосредственно связать со временем туннелирования отдельной частицей, поскольку туннелирование – квантовый волновой (интерференционный и многочастичный) процесс. Однако в стационарном случае средняя скорость частиц потока на выходе барьера равна v (частицы как бы проходят барьер без потери энергии). Поэтому время $\tau = d/v$ можно рассматривать как минимальное время установления переходного процесса.

В работе предложена новая модель нестационарного туннелирования, основанная на ФГ и ИУ нестационарного одночастичного УШ, пригодная для описания нестационарного РТД и других структур с несколькими барьерами, изменяющимися во времени в конечной области. Методом Фурье получено решение уравнения Пуассона, которое можно найти совместно с определением ВФ с использованием модели. По сравнению с известными подходами на основе УШ модель не требует введения граничных условий, представляющих основную сложность при расчете. В частности, она может быть использована для решения открытого до сих пор вопроса о времени туннелирования ВП [38].

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда, проект # 16-19-10033.

1. G. N. Furse, *Field emission in vacuum microelectronics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, N.Y. (2005).
2. J. G. Simmons, *J. Appl. Phys.* **34**(6), 1793 (1963).
3. М. В. Давидович, Р. К. Яфаров, *ЖТФ* **88**(2), 283 (2018).
4. М. В. Давидович, Р. К. Яфаров, *ЖТФ* **89**(8), 1282 (2019).
5. L. Esaki, *Phys. Rev.* **109**, 603 (1958).
6. Ю. Кениг, Х. Шеллер, Г. Шен, *УФН* **168**(2), 170 (1998).
7. А. А. Абрикосов, *УФН* **168**(6), 683 (1998).
8. В. Н. Мурзин, Ю. А. Митягин, *УФН* **169**(4), 464 (1999).
9. Е. С. Солдатов, А. С. Трифонов, В. В. Ханин, С. П. Губин, С. А. Яковенко, Г. Б. Хомутов, *УФН* **166**(8), 903 (1996).
10. Е. А. Нелин, *УФН* **177**(3), 307 (2007).
11. П. И. Арсеев, В. Н. Манцевич, Н. С. Маслова, В. И. Панов, *УФН* **187**(11), 1147 (2017).
12. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **116**(2), 704 (1999).
13. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **119**(4), 816 (2001).
14. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **121**(4), 925 (2002).
15. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **144**(5), 1086 (2013).
16. В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **145**(6), 1078 (2014).
17. O. Pinaud, *J. Appl. Phys.* **92**(4), 1987 (2002).
18. И. И. Абрамов, И. А. Гончаренко, Н. В. Коломейцева, *ФТПП* **39**(9), 1138 (2005).
19. И. И. Абрамов, И. А. Гончаренко, Н. В. Коломейцева, *ФТПП* **41**(11), 1395 (2007).
20. J. F. Mennemann, A. Jünger, and H. Kosina, *J. Comp. Phys.* **239**, 187 (2013).
21. К. С. Гришаков, В. Ф. Елесин, *ФТПП* **50**(8), 1113 (2016).
22. K. Grove-Rasmussen, H. Jorgensen, T. Hayashi, P. E. Lindelof, and T. Fujisawa, *Nano Lett.* **8**, 1055 (2008).
23. S. Moriyama, D. Tsuya, E. Watanabe, S. Uji, M. Shimizu, T. Mori, T. Yamaguchi, and K. Ishibashi, *Nano Lett.* **9**, 2891 (2009).
24. S. J. Angus, A. J. Ferguson, A. S. Dzurak, and R. G. Clark, *Nano Lett.* **7**, 2051 (2007).
25. L. D. Contreras-Pulido, J. Spletstoesser, M. Governale, J. König, and M. Büttiker, *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **85**, 075301 (2012).
26. V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, and P. I. Arseyev, *Solid State Commun.* **152**(16), 1545 (2012).
27. V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, and P. I. Arseyev, *Solid State Commun.* **168**, 36 (2013).
28. N. S. Maslova, P. I. Arseyev, and V. N. Mantsevich, *Solid State Commun.* **248**, 21 (2016).
29. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, *ЖЭТФ* **149**(3), 467 (2016).
30. N. C. Kluksdahl, A. M. Krizan, and D. K. Ferry, *Phys. Rev. B* **39**(11), 7720 (1989).
31. B. Engquist and A. Majda, *Math. Comp.* **31**, 629 (1977).
32. V. A. Baskakov and A. V. Popov, *Wave Motion* **14**(2), 123 (1991).
33. A. Arnold, *VLSI Design* **6**(1–4), 313 (1998).
34. W. R. Erensley, *Rev. Modern Phys.* **62**(3), 745 (1990).
35. Л. А. Халфин, *УФН* **166**(6), 688 (1996).
36. N. Yamada, *Phys. Rev. Lett.* **93**(17), 170401 (2004).
37. Y. Van, E. Ya. Sherman, J. G. Muga, and M. Buttiker, *Phys. Rev. A* **82**(6), 062121 (2010).
38. А. Б. Шварцбург, *УФН* **177**(1), 43 (2007).
39. М. В. Давидович, *УФН* **179**(4), 443 (2009).
40. М. В. Давидович, *Квантовая электроника* **47**(6), 567 (2017).
41. В. Н. Грибов, *Квантовая электродинамика*, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Москва-Ижевск (2001).
42. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, *Уравнения математической физики*, Наука, М. (1977).