Краткие сообщения по физике № 9-1989 г.

УДК 621. 382. 2

НЕСТАЦИОНАРНОЕ УПРУГОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ КВАЗИЧАСТИЦ С ПЕРЕМЕННОЙ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССОЙ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

Ф.В. Бункин, Р.А. Волков

Вычислены времена одночастотного туннелирования и полный ток в неравновесной трехслойной структуре, имеющей различные эффективные массы квазичастицы в аноде и в катоде.

Если туннельная структура, содержащая два электрода и разделяющий их барьер, характеризуется различными, но постоянными в пределах данного электрода тензорами обратных эффективных масс $\|m_n^{(k)}\|^{-1}$, $k = 1, 2$; $n = 1, 2, 3$, то в приближении сильной связи возможна модификация гамильтониана в уравнении Шредингера, содержащего единую волновую функцию (ВФ) $\Phi(\mathbf{r}, t)$ для всей структуры. Сущность этой модификации заключается во введении комбинированного тензора, включающего обратные тензоры эффективных масс обоих электродов.

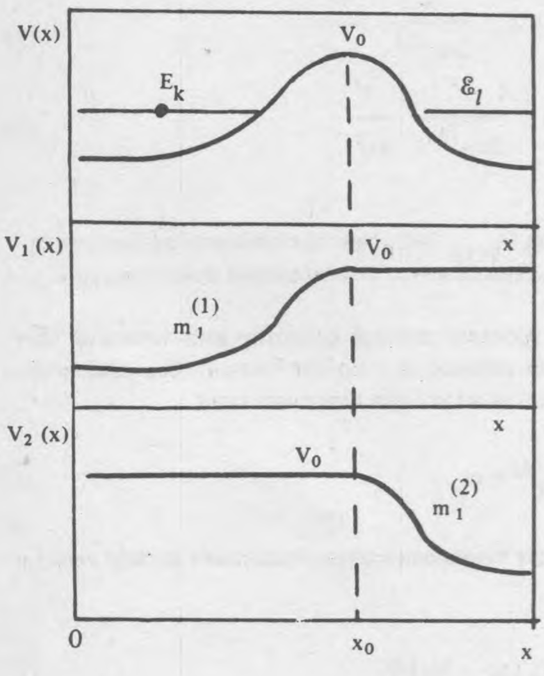

Рис. 1. Профиль двухъямной потенциальной энергии V(x) трехслойной структуры и потенциальные функции $V_1(x)$, $V_2(x)$ квазинезависимых электродов.

Многие трехслойные туннельные структуры описываются двухъямной потенциальной энергией $V(\mathbf{r})$ квазичастицы, причем в приближении сильной связи энергию $V(\mathbf{r})$ можно выразить через потенциальные функции $V_1(x)$ и $V_2(x)$, описывающие отдельные квазинезависимые электроды (рис. 1). Этот метод аналогичен подходу, применяемому при анализе туннельного эффекта в квантовой химии или в полупроводниковых структурах с многими квантовыми ямами (КЯ) /1 – 3/: $V(\mathbf{r}) = V_1(x) + V_2(x) - V_0$, $V_1(x) = [V(x), x < x_0;\ V_0, x \geqslant x_0]$, $V_2(x) = [V(x), x > x_0;\ V_0, x \leqslant x_0]$. Здесь $V_0 = V(x_0)$ – высота барьера.

Потенциальные функции $V_1(x)$ и $V_2(x)$ выделяют начальное и конечное состояния квазичастицы и позволяют естественным образом распространить на туннельный эффект нестационарную теорию возмущений. В случае не взаимодействующих электродов ВФ ψ и φ квазичастицы в левом и правом электродах определяются уравнениями

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = [T_1 + V_1(x)]\psi,\ i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = [T_2 + V_2(x)]\varphi, \tag{1}$$

где $T_{1,2} = \sum_{l=1}^{3}\hat{P}_l^2/2m_l^{(1,2)}$. Уравнения (1) имеют частные решения, удовлетворяющие условию Борна,

$$\psi_k(\mathbf{r},t) = L^{-1}\exp[i(\mathbf{k}_1\vec{\rho} - \omega_k t)]\psi_k^0(x), \tag{2}$$

$$\varphi_l(\mathbf{r},t) = L^{-1}\exp[i(\mathbf{k}_2\vec{\rho} - \sigma_l t)]\varphi_l^0(x). \tag{3}$$

Здесь $\hbar\omega_k = E_k$, $k \in (k)$; $\hbar\sigma_l = \mathcal{E}_l$, $l \in (l)$ – спектры энергий в КЯ с потенциальными энергиями $V_1(x)$ и $V_2(x)$, $\mathbf{k}_{1,2} = (k_{y(1,2)}, k_{z(1,2)})$ – поперечные составляющие волнового вектора квазичастицы, $\vec{\rho} = (y, z)$, L – поперечный размер туннельной структуры. Будем в дальнейшем считать, что различаются только продольные массы квазичастицы: $m_1^{(1)} \neq m_1^{(2)}$, $m_j^{(1)} = m_j^{(2)} = m_j$, $j = 2, 3$. Тогда нормированные ВФ $\psi_k^0(x)$ и $\varphi_l^0(x)$ определяются из уравнений:

$$E_{kx}\psi_k^0 = [T_x^{(1)} + V_1(x)]\psi_k^0,\ T_x^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2m_1^{(1)}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{4}$$

$$\mathcal{E}_{lx}\varphi_l^0 = [T_x^{(2)} + V_2(x)]\varphi_l^0,\ T_x^{(2)} = -\frac{\hbar^2}{2m_1^{(2)}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}. \tag{5}$$

При этом собственные значения продольной E_{kx} и поперечной $E_{\|(1)}$ энергий связаны соотношением $E_k = E_{kx} + E_{\|(1)} = E_{kx} + (\hbar^2/2)(k^2_{y1}/m_2 + k^2_{z1}/m_3)$, $k \in (k)$. Аналогичное соотношение имеет место и для $\mathcal{E}_{lx}$, $\mathcal{E}_{\|(2)}$.

При включении туннельного взаимодействия между электродами полный оператор кинетической энергии T квазичастицы, учитывающий различие в величинах эффективных масс по обе стороны барьера, можно представить в виде $T = a(T_1 + T_2)$, где постоянная a определяется из условия соответствия

$$T \to \sum_{r=1}^{3}\hat{P}_r^2/2m_r,\ m_r^{(1)} \to m_r^{(2)} = m_r. \tag{6}$$

Из (6) следует $a = 1/2$, и уравнение Шредингера, учитывающее туннельное взаимодействие между электродами, приобретает вид:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = [(T_1 + T_2)/2 + V_1(x) + V_2(x) - V_0]\Phi. \tag{7}$$

Будем искать решение (7) в виде

$$\Phi(\mathbf{r},t) = \sum_k\sum_{\mathbf{k}_1} A_k(\mathbf{k}_1,t)\psi_k(\mathbf{r},t) + \sum_l\sum_{\mathbf{k}_2} B_l(\mathbf{k}_2,t)\varphi_l(\mathbf{r},t). \tag{8}$$

Если выполняется условие сильной связи $J_{kl} = |\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^{0*}\varphi_l^0\exp(-i\Delta\omega_{kl}t)\,dx| = |\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_l^{0*}\psi_k^0\exp(i\Delta\omega_{kl}t)\,dx| \ll 1$, $\Delta\omega_{kl} = \sigma_l - \omega_k$, то нормировка ВФ (8) приводит к равенству

$$\sum_k |A_k(t)|^2 + \sum_l |B_l(t)|^2 + O(J_{kl}) = 1. \tag{9}$$

Из (9) следует, что $|A_k(t)|^2$ и $|B_l(t)|^2$ есть вероятности пребывания квазичастицы в момент времени t в первой и во второй КЯ в состояниях $|k>$ и $|l>$.

Подставляя (8) в (7) и усредняя полученный результат при помощи ВФ (2) и (3), получаем с точностью $O(J_{kl})$ следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{A}_k &= \sum_l B_l a_{kl} \exp(-i\Delta\omega_{kl} t),\ k \in (k), \\ i\hbar \dot{B}_l &= \sum_k A_k b_{lk} \exp(i\Delta\omega_{kl} t),\ l \in (l). \end{aligned} \tag{10}$$

Как это следует из метода получения (10), система (10) справедлива только в том случае, если совпадают поперечные составляющие волновых векторов квазичастиц по обе стороны барьера.

В (10) для матричных элементов, описывающих туннельное взаимодействие между электродами, введены обозначения:

$$\begin{aligned} a_{kl} &= <\psi_k^{0*}|V_1 - V_0|\varphi_l^0> - <\psi_k^{0*}|\tilde{T}|\varphi_l^0>, \\ b_{lk} &= <\varphi_l^{0*}|V_2 - V_0|\psi_k^0> + <\varphi_l^{0*}|\tilde{T}|\psi_k^0>, \\ \tilde{T} &= \hat{P}_x^2 (1/m_1^{(2)} - 1/m_1^{(1)})/4. \end{aligned} \tag{11}$$

Первые слагаемые в (11) обусловлены потенциальной энергией квазичастицы в электродах, а вторые — различием в продольных эффективных массах $m_1^{(1)}$ и $m_1^{(2)}$; вторые слагаемые учитываются в теории туннельного эффекта впервые.

В системе уравнений (10) опущены также слагаемые, содержащие в качестве сомножителей малые величины $<\psi_k^{0*}|V_2 - V_0|\psi_m^0>$, $<\varphi_l^{0*}|V_1 - V_0|\varphi_m^0>$, $<\psi_k^{0*}|\tilde{T}|\psi_m^0>$, $<\varphi_l^{0*}|\tilde{T}|\varphi_n^0>$, $k, m \in (k)$; $l, n \in (l)$. Если $|E_{kx} - \mathcal{E}_{lx}| \sim |b_{lk}| \sim |a_{kl}|$, то из (4), (5) следует, что с точностью до $O(J_{kl})$ справедливы равенства $a_{kl} = a_{lk}$, $b_{kl} = b_{lk}$. Доказательство этих формул приведено в /2/.

Если в момент времени t = 0 в левом электроде заселено состояние $|f>$, $f \in (k)$, то $A_f(0) = \delta_{kf}$ и в первом порядке теории возмущений из (10) следует при $\Delta\omega_{fl} \to 0$

$$\begin{aligned} |B_l^{(1)}(t)|^2 &= |B_{fl}^{(1)}(t)|^2 = t^2 \delta_{fl}/\tau_{fl}^2,\ t \ll \tau_{fl}, \\ \delta_{fl} &= \delta(\omega_f, \omega_l). \end{aligned} \tag{12}$$

Здесь $\tau_{fl} = \hbar/|b_{lf}|$ — время туннельного перехода квазичастицы между состояниями $|f>$ и $|l>$ соответственно в левом и в правом электродах. При $\Delta\omega_{fl} \to 0$, $b_{lf} = b_{fl}$ и $\tau_{fl} = \tau_{lf}$, т. е. времена упругого туннелирования квазичастицы через потенциальный барьер в прямом и обратном направлениях равны.

Формулы (12) точны лишь для малых отрезков времени t. Распространяя (12) на времена $t \in [0, \tau_{lf}]$, получим качественную оценку для нормированных вероятностей нахождения квазичастицы в первом и втором электродах на протяжении всего времени туннелирования

$$\begin{aligned} &|A_f(t)|^2 \sim 1 - |B_l(t)|^2,\ |B_l(t)|^2 = |B_{fl}(t)|^2 \sim t^2 \delta_{fl}/\tau_{fl}^2, \\ &t \in [0, \tau_{fl}]. \end{aligned} \tag{13}$$

Согласно (13), среднее значение вероятности туннелирования в единицу времени есть

$$\int_0^{\tau_{fl}} \frac{d}{dt} |B_{fl}(t)|^2 \, dt/\tau_{fl} \cong \delta_{fl}/\tau_{fl}. \tag{14}$$

Формула (14) позволяет записать выражение для среднего значения одночастичного туннельного тока из левого электрода в правый: $\overline{J}_{fl} \sim q\delta_{fl}/\tau_{fl}$, где q – заряд частицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гольданский В. И. и др. Туннельные явления в химической физике. М., Наука, 1986.
2. Бункин Ф. В. и др. Препринт ИОФАН № 70, М., 1988.
3. Бункин Ф. В. и др. Препринт ИОФАН № 71, М., 1988.

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 10 мая 1989 г.