8.2. УМОВНО-АНАЛІТИЧНІ МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ КОЕФІЦІЄНТУ ПЕРЕДАЧІ

З часів формування перших уявлень про функціонування напівпровідникових структур з вертикальним транспортом було розроблено та використовуються багато методів для обчислення коефіцієнту проходження електроном квантової структури, які є по суті аналітичними. Однак, складність виразів зазвичай не дозволяє використовувати їх для математичного аналізу без подальших спрощень. Здебільшого вони використовуються для побудови чисельних моделей. З цієї причини ми використали приставку «умовно-» у їх назві.

Загальний підхід усіх методів полягає в тому, що знаходження коефіцієнту проходження квантової системи зводиться до знаходження *матриці передачі* усієї системи, тобто матриці, що пов'язує падаючі та відбиті електронні хвилі з обох боків системи.

Як вводиться ця матриця? Згідно з прийнятими припущеннями, за межами квантової системи падіння прикладеної напруги відсутнє, тому електрон знаходиться виключно у полі кристалічної решітки, і огинаюча його хвильової функції − це суперпозиція падаючих та відбитих плоских хвиль. Тому розв'язок рівняння Шредінгера огинаючої функції для лівого та правого резервуару (на рис. 8.5, *а* це I та V ділянки) запишеться так:

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}, \qquad (8.9)$$

$$\psi_5 = A_5 e^{ik_5 x} + B_5 e^{-ik_5 x}, \qquad (8.10)$$

де A_1, B_1, A_5, B_5 − деякі сталі інтегрування; $k_{1(5)} = \sqrt{2m^*_{1(5)}(E_z - U_{1(5)})}\big/\hbar$, де $m^*_{1(5)}$ − ефективна маса електрона в I(V) області, $U_{1(5)}$ − потенціальна енергія електрона («потенціальний рельєф») в I(V) області. Введемо позначення для членів рівнянь (8.9), (8.10):

$$\psi_1^{\rightarrow} \equiv A_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 z},\ \psi_1^{\leftarrow} \equiv B_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 z},\ \psi_5^{\rightarrow} \equiv A_5 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_5 z},\ \psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_5 z},$$

які традиційно звуться, відповідно, падаючими та відбитими хвилями у першій та п'ятій області. Ці хвилі описують електрон, що налітає чи відбивається від квантової області зліва чи справа.

Матриця передачі усієї квантової системи **M** вводиться так:

$$\begin{bmatrix} A_5 \\ B_5 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}, \tag{8.11}$$

Описані нижче методи дозволяють знайти саму матрицю **M**. Припустиму, ми її вже знайшли, тобто відомі її компоненти m_{11}, m_{12}, m_{21}, m_{22}. Як, знаючи $\mathbf{M}$, відшукати коефіцієнт проходження? Відповідь однакова для усіх розглядуваних методів; її подано нижче.

За визначенням коефіцієнту проходження T [3 с. 419]:

$$T = \frac{\left| j_5^{\rightarrow} \right|}{\left| j_1^{\rightarrow} \right|}, \tag{8.12}$$

де $j_5^{\rightarrow}$ − потік густини ймовірності у електронній хвилі, що пройшла у п'яту область; $j_1^{\rightarrow}$ − потік густини ймовірності у падаючій хвилі в першій області. Згідно з визначенням густини потоку ймовірності:

$$j_{5(1)}^{\rightarrow} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m_{5(1)}^{*}} \left(\{\psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^{*} \frac{d\psi_{5(1)}^{\rightarrow}}{dz} - \psi_{5(1)}^{\rightarrow} \frac{d\{\psi_{5(1)}^{\rightarrow}\}^{*}}{dz} \right).$$

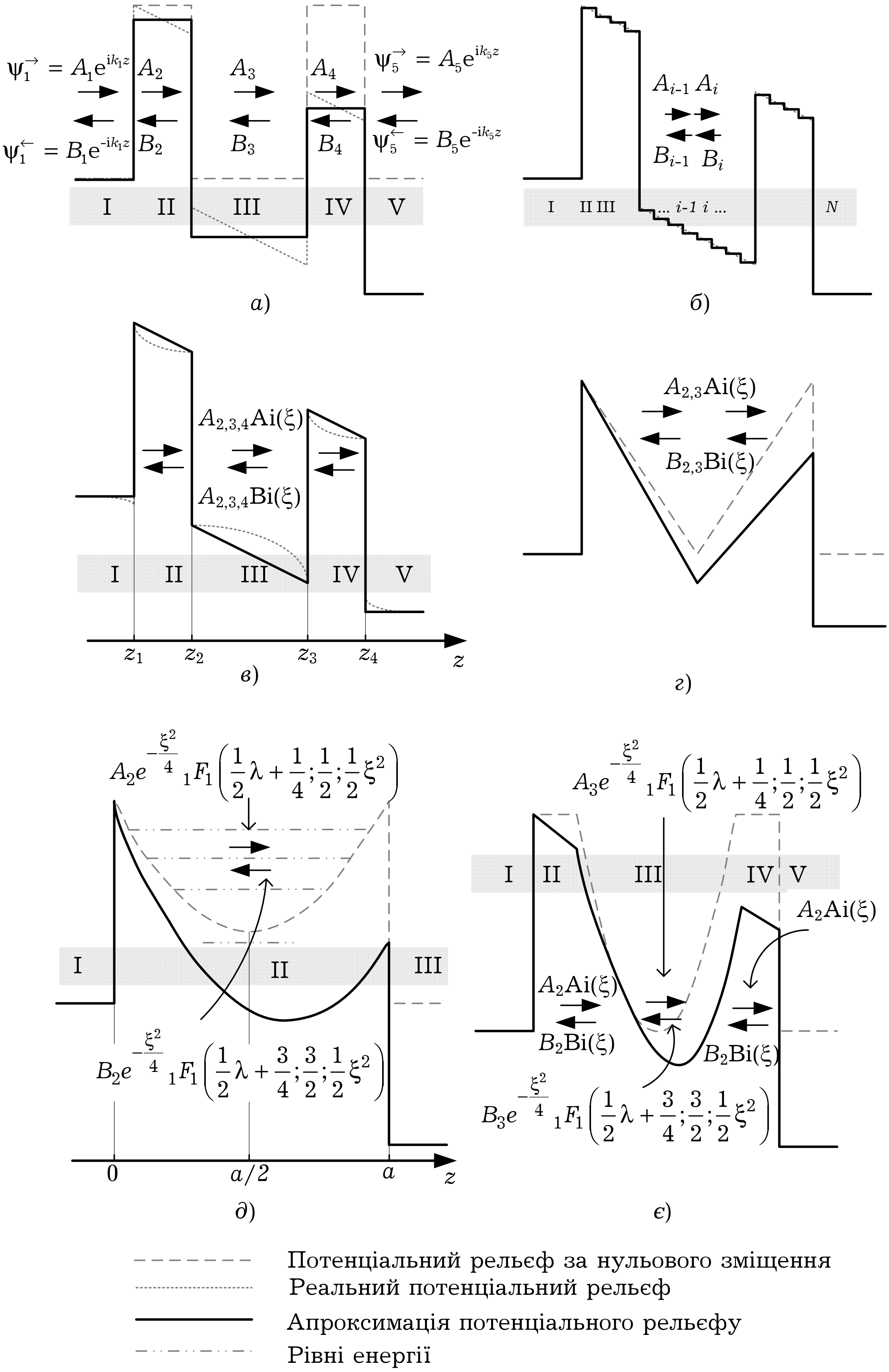

Рис. 8.3. Різні форми потенціальних бар'єрів та їх апроксимації при використанні умовно-аналітичних методів розрахунку коефіцієнту передачі.

Прості обчислення дають:

$$\left|j_5^{\rightarrow}\right| = \left|A_5\right|^2 \frac{\hbar\left|k_5\right|}{m_5^*},\ \left|j_1^{\rightarrow}\right| = \left|A_1\right|^2 \frac{\hbar\left|k_1\right|}{m_1^*}.$$

Підставляючи ці значення у формулу (8.12), отримаємо:

$$T = \frac{\left|A_5\right|^2}{\left|A_1\right|^2}\frac{\left|k_5\right|}{\left|k_1\right|}\frac{m_1^*}{m_5^*}. \qquad (8.13)$$

З формули (8.13) слідує: якщо потенціальна енергія електрона у лівому чи правому резервуарі менша за повну енергію електрона (один із хвильових векторів приймає чисто уявне значення), то такий електрон не вносить вклад в струм, про що згадувалося при виведенні формули Цу-Есакі.

Коефіцієнт відбивання від квантової системи визначається як [3 с. 419]:

$$R = \frac{\left|j_1^{\leftarrow}\right|}{\left|j_1^{\rightarrow}\right|}, \qquad (8.14)$$

де $j_1^{\leftarrow} = \frac{i\hbar}{2m_1^*}\left(\{\psi_1^{\leftarrow}\}^*\frac{d\psi_1^{\leftarrow}}{dz} - \psi_1^{\leftarrow}\frac{d\{\psi_1^{\leftarrow}\}^*}{dz}\right)$ – потік густини ймовірності у відбитій у першу область електронній хвилі.

Прості обчислення дають:

$$\left|j_1^{\leftarrow}\right| = \left|B_1\right|^2\frac{\hbar\left|k_1\right|}{m_1^*}.$$

Підставляючи це значення в (8.14), маємо:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}. \tag{8.15}$$

Фізичний зміст мають задачі, де електрон налітає на квантову систему зліва (з першої області) або справа (з п’ятої області).

Розглянемо задачу про знаходження коефіцієнту проходження для електрона, що налітає на квантову систему з лівого резервуару. За умовою задачі хвиля, що відбита від квантової системи справа $\psi_5^{\leftarrow} \equiv B_5 e^{-\mathrm{i}k_5 z}$ буде відсутня (оскільки резервуари є ідеально-адсорбуючими). Без втрати загальності можна нормувати хвильову функцію у лівому резервуарі так, що $A_1 = 1$. Тоді амплітуди A_5 та B_1 набудуть смислу, подібного до того, що мають, комплексні коефіцієнти проходження та відбивання електромагнітних хвиль. Щоб підкреслити цю аналогію та поліпшити сприйняття їх фізичного смислу введемо позначення $t \equiv A_5$, $r \equiv B_1$. Таким чином, для випадку електрона, що налітає на квантову систему зліва, (8.13) та (8.15) перепишуться так:

$$T = |t|^2 \frac{|k_5|}{|k_1|} \frac{m_1^*}{m_5^*}, \tag{8.16}$$

$$R = |r|^2. \tag{8.17}$$

Повернемося до матриці передачі та перепишемо формулу (8.11) у щойно введених позначеннях:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}. \tag{8.18}$$

Тут невідомими є коефіцієнти t та r, знайшовши які, матимемо змогу обчислити T та R згідно (8.16) та (8.17). Провівши елементарні обчислення, з (8.18) отримаємо:

$$t = m_{11} + m_{12}m_{21}/m_{22}; \tag{8.19}$$

$$r = -m_{21}/m_{22}. \tag{8.20}$$

Отже, якщо матриця передачі квантової системи відома, формули (8.16), (8.17), (8.19), (8.20) дозволяють обчислити коефіцієнти проходження та відбивання.

Наостанок відмітимо, що закон збереження густини потоку ймовірності в огинаючій хвилевої функції, як і для звичайної хвильової функції [3 с. 419] диктує виконання умови:

$$T + R = 1;$$

крім того, в [2 с. 108] показано, що для електронів, що налітають справа чи зліва коефіцієнти відбивання та проходження однакові: $T_{12} = T_{21}$, $R_{12} = R_{21}$. З цих причин у формулі Цу-Есакі (8.8) фігурує один коефіцієнт проходження, $T = T_{12} = T_{21}$. Системи, що задовольняють вказаним умовам, називаються *оборотними системами* без втрат і зустрічаються (як модель) також в електродинаміці. Для компонентів матриці $\mathbf{M}$, що описує вказані системи, справедливі зокрема рівності: $m_{11} = m_{22}^{*}$, $m_{12} = m_{21}^{*}$ [7 p. 250].

У електродинаміці матрицю передачі $\mathbf{M}'$ вводять трохи інакше, ніж було показано нами, а саме [7 p. 246]:

$$\begin{bmatrix} \Psi_1^{\rightarrow} \\ \Psi_1^{\leftarrow} \end{bmatrix} = \mathbf{M}' \begin{bmatrix} \Psi_2^{\rightarrow} \\ \Psi_2^{\leftarrow} \end{bmatrix}.$$

Легко віднайти зв’язок між цими матрицями:

$$\mathbf{M}' = \begin{bmatrix} e^{ik_5 z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_5 z} \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{M} \begin{bmatrix} e^{ik_1 z} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 z} \end{bmatrix},$$

а також переконатися, що значення T та R, знайдені за формулами (8.16), (8.17) з використанням $\mathbf{M}'$ замість $\mathbf{M}$ виявляються однаковими.

Нижче будуть розглянуті деякі методи розрахунку коефіцієнту проходження.

8.2.1. Метод плоских хвиль

Метод матриць передачі застосовується для знаходження коефіцієнту проходження через квантові системи, потенціальна енергія електрона в яких є або може бути апроксимована кусково-сталою функцією (рис. 8.3, *а*, *б*). Апроксимація, що показана на рис. 8.3, *а* є виправданою, коли до системи прикладається невелике зміщення, а впливом просторового заряду можна знехтувати.

У будь-яких двох суміжних ділянках зі сталим потенціальним рельєфом, скажімо, i-й та $(i + 1)$-й області, розв’язком рівняння Шредінгера буде суперпозиція плоских хвиль:

$$\psi_i = A_i e^{ik_i z} + B_i e^{-ik_i z}, \tag{8.21}$$

$$\psi_{i+1} = A_{i+1} e^{ik_{i+1} z} + B_{i+1} e^{-ik_{i+1} z}, \tag{8.22}$$

де $k_i = \sqrt{2m_i^*(U_i - E_z)} / \hbar$, де m_i^* −ефективна маса електрона в i-му шарі, U_i − потенціальна енергія електрона в зоні провідності i-го шару.

На границі між i-ю та i+1-ю областями, в точці $z_{i,\,i+1}$ хвильова функція та потік ймовірності в ній мають бути неперервними, тобто необхідно забезпечити виконання рівнянь (див. також розд. 1.6):

$$\psi_i(z_{i,i+1}) = \psi_{i+1}(z_{i,i+1}), \tag{8.23}$$

$$1/m_i^* \cdot \psi_i'(z_{i,i+1}) = 1/m_{i+1}^* \cdot \psi_{i+1}'(z_{i,i+1}), \tag{8.24}$$

де штрихом позначено диференціювання по z.

З урахуванням (8.21) та (8.22) рівняння (8.23) та (8.24) можна записати у матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{ik_{i+1}z} & \mathrm{e}^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}\mathrm{e}^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}\mathrm{e}^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{ik_i z} & \mathrm{e}^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*}\mathrm{e}^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*}\mathrm{e}^{-ik_i z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}. \tag{8.25}$$

Помноживши обидві частини (8.25) на $\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{ik_{i+1}z} & \mathrm{e}^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}\mathrm{e}^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}\mathrm{e}^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1}$ справа, отримаємо:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \tag{8.26}$$

де $\mathbf{M}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} e^{ik_{i+1}z} & e^{-ik_{i+1}z} \\ \frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}e^{ik_{i+1}z} & -\frac{k_{i+1}}{m_{i+1}^*}e^{-ik_{i+1}z} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{ik_i z} & e^{-ik_i z} \\ \frac{k_i}{m_i^*}e^{ik_i z} & -\frac{k_i}{m_i^*}e^{-ik_i z} \end{bmatrix}$ – матриця передачі електронних хвиль (або просто **M**-матриця), що виражає амплітуди електронних хвиль у (i + 1)-му шарі через амплітуди у i -му шарі.

На відміну від матриці передачі електромагнітних хвиль ця матриця пов'язує *амплітуди* падаючих та відбитих хвиль ($A_{i(i+1)}$, $B_{i(i+1)}$), а не *самі* хвилі ($\psi_{i(i+1)}^{\rightarrow}, \psi_{i(i+1)}^{\leftarrow}$). Однак **M**-матриці можна ввести і у спосіб, властивий для електродинаміки, і це не вплине на кінцевий результат; ми ж користуємося загальноприйнятим способом, який до того ж вводиться природно.

Аналогічно можна отримати рівняння, що пов'язує відповідні амплітуди в $(i-1)$-му та i -му шарі:

$$\begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix} \qquad (8.27).$$

Користуючись (8.26) та (8.27), можна виразити $[A_{i+1}, B_{i+1}]^{\mathrm{T}}$ через $[A_{i-1}, B_{i-1}]^{\mathrm{T}}$:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{i+1,i} \times \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_{i-1} \\ B_{i-1} \end{bmatrix},$$

що є виразом властивості **M**-матриць, що зветься «*мультиплікативність*». Легко переконатися, що вказана властивість **M**-матриць дозволяє виразити амплітуди падаючих та відбитих хвиль у лівому резервуарі через аналогічні величини правого резервуару:

$$\begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{N,N-1} \times \mathbf{M}_{N-1,N-2} \times \ldots \times \mathbf{M}_{2,1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \prod_{i=2}^{N} \mathbf{M}_{i,i-1} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}.$$

Матриця $\mathbf{M} = \prod_{i=2}^{N} \mathbf{M}_{i,i-1}$ є шуканою матрицею передачі усієї квантової системи.