PACS 03.65.Xp; 03.75.Lm; 11.55.–m

Время задержки волновых пакетов при их туннелировании через квантовый диод

Н.А.Иванов, В.В.Скалозуб

С помощью модифицированного метода седловой точки исследован процесс прохождения волнового пакета через квантовый диод. Для исследуемой структуры построена S-матрица рассеяния. Детально рассмотрен случай туннелирования через диод пакета с гауссовой огибающей. Рассчитаны время задержки и форма прошедшего волнового пакета. Исследована зависимость времени задержки от характеристик входного пакета и внутренних характеристик квантового диода. Обсуждаются возможные приложения полученных результатов.

Ключевые слова: *квантовый диод, туннелирование, время задержки волнового пакета.*

1. Введение

Проблема туннелирования волновых пакетов через открытые квантовые системы с резонансными уровнями является одной из долго не поддававшихся решению задач нанофизики (см., напр., [1–5]). Основная трудность здесь – необходимость учета влияния внутренних характеристик квантовых систем и параметров входного импульса на процесс прохождения сигнала. Поэтому большинство развитых подходов не были универсальными и могли применяться для исследования туннелирования пакета с определенной формой огибающей и узкого класса систем со схожей геометрией. Так, отдельно рассматривалось прохождение через системы с «узкими» и «широкими» резонансными уровнями, т.е. отсутствовал единый подход к описанию задачи.

Вопрос о туннелировании волновых пакетов через квантовые системы с резонансными уровнями является нетривиальной задачей. Это объясняется наличием квантовых и граничных эффектов, связанных с суперпозицией падающих и отраженных волновых функций. Данные эффекты наблюдаются при прохождении сигналов через такие структуры, как двухбарьерные диоды, транзисторы квантового туннелирования и открытые гетероструктуры. Эти системы широко используются в современной микро- и наноэлектронике. В настоящее время большое количество современных научных исследований посвящено данной тематике. В ряде работ [6–8] нами был развит модифицированный квазиклассический метод, позволяющий в общем виде исследовать аналитически процесс туннелирования волнового пакета через квантовую систему с резонансными уровнями. Подход основан на двух основных идеях: описании параметров системы в терминах входного пакета (тем самым устраняется необходимость отдельного рассмотрения случаев «узких» и «широких» резонансных уровней) и использовании модифицированного метода перевала. Описание квантовой системы проводится с помощью построения соответствующей матрицы рассеяния S. Это позволяет ввести безразмерные переменные, отвечающие произвольным квантовым системам и волновым пакетам.

Формализм S-матрицы широко используется для связи между конечными состояниями системы, возникающими после взаимодействия, и состояниями, предшествующими ему. Матрица рассеяния задается набором уровней (каналов), через которые происходит туннелирование. Она содержит всю информацию о поведении системы, если известны не только численные значения, но и аналитические свойства ее элементов; в частности, ее полюсы, определяют связанные состояния системы (т.е., дискретные уровни энергии). Для расчета матрицы используются методы анализа матричных элементов или теории возмущений.

Полюсы S-матрицы играют важную роль в процессе туннелирования. Они определяют существование резонансных уровней в рассеивающих структурах. Следовательно, для детального изучения процесса рассеяния необходимо построить соответствующую матрицу рассеяния и задать характеристики входного пакета. Для расчета элементов S-матрицы может быть использован метод, основанный на решении уравнений Липпмана–Швингера для заданного рассеивающего потенциала [9, 10].

Исходный рассеивающий потенциал представляется в виде суперпозиции невозмущенной и возмущенной частей. После нахождения функции Грина для первой части решение обобщается на случай полного потенциала. Следующим этапом является расчет R-матрицы и определение элементов матрицы рассеяния с использованием известной формулы для связи между этими матрицами. Данный подход является универсальным и полностью формализует расчет матрицы рассеяния на случай произвольного потенциала.

Существование потенциальных ям с дискретными уровнями энергии – общая черта таких объектов, как квантовые точки, двухбарьерные диоды и транзисторы квантового туннелирования. Предполагается, что подобные структуры имеют резонансную проводимость. Вот

Н.А.Иванов, В.В.Скалозуб. Днепропетровский национальный университет им. Олеся Гончара, Украина, 49010 Днепропетровск, просп. Гагарина, 72; e-mail1: rokosovskij@mail.ru, skalozubv@daad-alumni.de

Поступила в редакцию 20 сентября 2013 г., после доработки – 3 марта 2014 г.

почему аналитическое определение времени задержки при прохождении волновых пакетов в системах такого типа является очень важной задачей [5, 11, 12]. В частности, ее решение помогает подобрать такие параметры систем или пакетов, при которых скорость передачи сигнала максимальна. Это указывает пути дальнейшей миниатюризации и увеличения быстродействия микросхем с квантовыми элементами.

В настоящей работе мы применим описанный выше метод для расчета матрицы рассеяния квантового диода, используемого в электронных устройствах, и рассчитаем время задержки при подаче на вход пакета с гауссовой огибающей. Времена задержки для других пакетов могут быть рассчитаны аналогично на основе полученных результатов (например, для случая прямоугольного импульса [7]).

2. *S*-матрица для возмущенных потенциалов

В этом разделе мы приводим всю информацию, необходимую для расчета матрицы рассеяния (полные выкладки см. в работе [10]). Здесь и далее ширина уровней выражается в ширинах пакета, время – в длительностях пакета, координаты – в характерных размерах сигнала.

Согласно применяемому подходу, мы разбиваем потенциал системы $V(z)$ на возмущенную ($\Delta V(z)$) и невозмущенную ($V_0(z)$) части, как показано на рис.1:

$$V(z) = \Delta V(z) + V_0(z). \tag{1}$$

Процесс рассеяния может быть описан стационарным уравнением Шредингера

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - V_0(z) + v\right]\Psi(z,v) = \Delta V(z)\,\Psi(z,v). \tag{2}$$

Такое неоднородное уравнение может быть решено с использованием функции Грина для невозмущенной части, являющейся решением следующего уравнения:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - V_0(z) + v\right]\Gamma(z,z',v) = \delta(z - z'). \tag{3}$$

Его решение для волны, движущейся слева ($z' < 0$), имеет вид

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{m^*}{\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}\hbar^2}\Big\{\exp[-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}(z - z')]$$

$$+ \frac{k_{\mathrm{L}} - k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp[-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}(z + z')]\Big\},\ z < z',$$

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{m^*}{\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}\hbar^2}\Big\{\exp[\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}(z - z')] \tag{4}$$

$$+ \frac{k_{\mathrm{L}} - k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp[-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}(z + z')]\Big\},\ z' < z < 0,$$

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{2m^*}{(\mathrm{i}k_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}k_{\mathrm{R}})\hbar^2}\exp[\mathrm{i}(k_{\mathrm{R}}z - k_{\mathrm{L}}z')],\ z > 0,$$

а для волны, движущейся справа ($z' > 0$), имеет вид

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{2m^*}{(\mathrm{i}k_{\mathrm{L}} + \mathrm{i}k_{\mathrm{R}})\hbar^2}\exp[\mathrm{i}(k_{\mathrm{R}}z' - k_{\mathrm{L}}z)],\ z < 0,$$

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{m^*}{\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}\hbar^2}\Big\{\exp[\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}(z - z')]$$

$$+ \frac{k_{\mathrm{R}} - k_{\mathrm{L}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp[-\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}(z + z')]\Big\},\ 0 < z < z', \tag{5}$$

$$\Gamma(z,z',v) = \frac{m^*}{\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}\hbar^2}\Big\{\exp[\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}(z - z')]$$

$$+ \frac{k_{\mathrm{R}} - k_{\mathrm{L}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp[\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}(z + z')]\Big\},\ z' < z.$$

Для уравнения Шредингера в отсутствие возмущения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + V_0(z) - v\right]\Psi_0^{\mathrm{L(R)}}(z,v) = 0 \tag{6}$$

получим следующие решения: для волны, распространяющейся справа,

$$\Psi_0^{\mathrm{L}}(z,v) = \exp(\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z) + \frac{k_{\mathrm{L}} - k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp(-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z),\ z < 0,$$

$$\Psi_0^{\mathrm{L}}(z,v) = \frac{2k_{\mathrm{L}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp(\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}z),\ z > 0, \tag{7}$$

а для волны, распространяющейся слева,

$$\Psi_0^{\mathrm{R}}(z,v) = \frac{2k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp(-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z),\ z < 0,$$

$$\Psi_0^{\mathrm{R}}(z,v) = \exp(-\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}z) - \frac{k_{\mathrm{L}} - k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}}\exp(\mathrm{i}k_{\mathrm{R}}z),\ z > 0. \tag{8}$$

Исходное уравнение может быть сведено к эквивалентному интегральному уравнению с использованием функции Грина $\Gamma(z,z',v)$:

$$\Psi(z,v) = \Psi_0(z,v) + \int_{-b_{\mathrm{L}}}^{b_{\mathrm{R}}}\mathrm{d}z'\,\Gamma(z,z',v)\,\Delta V(z')\,\Psi(z',v), \tag{9}$$

где $\Psi_0(z,v)$ – решение уравнения Шредингера в отсутствие возмущения. Для $z < -b_{\mathrm{L}}$ получим

$$\Psi^{\mathrm{L}}(z,v) = A^{\mathrm{L}}(v)\exp(\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z) + B^{\mathrm{L}}(v)\exp(-\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z), \tag{10}$$

где $A^{\mathrm{L}}(v) = 1$;

$$B^{\mathrm{L}}(v) = \frac{k_{\mathrm{L}} - k_{\mathrm{R}}}{k_{\mathrm{L}} + k_{\mathrm{R}}} + \frac{m^*}{\mathrm{i}\hbar^2 k_{\mathrm{L}}}\int_{b_{\mathrm{L}}}^{0}\mathrm{d}z'\Big[\exp(\mathrm{i}k_{\mathrm{L}}z') +$$

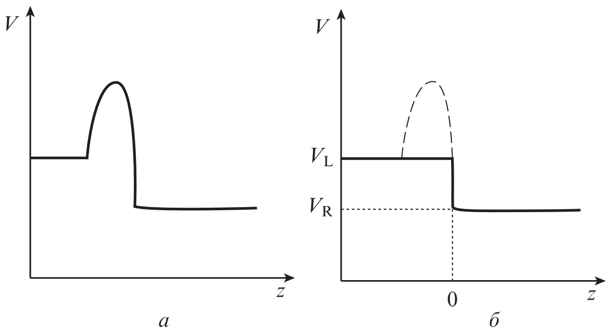

Рис.1. Полный потенциал системы (*а*) и его представление в виде суммы невозмущенной (сплошная кривая) и возмущенной (штриховая кривая) частей (*б*).

$$+\frac{k_L-k_R}{k_L+k_R}\exp(-ik_Lz')\Big]\Delta V(z')\,\Psi^L(z',v)$$

$$+\frac{2m^*}{i\hbar^2(k_L+k_R)}\int_0^{b_R}dz'\exp(ik_Rz')\Delta V(z')\,\Psi^L(z',v). \quad (11)$$

Для $z > b_R$ имеем

$$\Psi^L(z,v) = C^L(v)\exp(ik_Rz) + D^L(v)\exp(-ik_Rz), \quad (12)$$

где $D^L = 0$;

$$C^L(v) = \frac{2k_L}{k_L+k_R} + \frac{m^*}{i\hbar^2k_R}\int_{b_L}^{0}dz'\Big[\exp(-ik_Rz')$$

$$+\frac{k_R-k_L}{k_L+k_R}\exp(ik_Rz')\Big]\Delta V(z')\,\Psi^L(z',v)$$

$$+\frac{2m^*}{i\hbar^2(k_L+k_R)}\int_0^{b_R}dz'\exp(ik_Rz')\Delta V(z')\,\Psi^L(z',v). \quad (13)$$

Соответствующий результат для Ψ^R будет следующим: для $z > b_R$

$$\Psi^R(z,v) = C^R(v)\exp(ik_Rz) + D^R(v)\exp(-ik_Rz), \quad (14)$$

где $D^R = 1$;

$$C^R(v) = \frac{k_R-k_L}{k_L+k_R} + \frac{m^*}{i\hbar^2k_R}\int_0^{b_R}dz'\Big[\exp(-ik_Rz')$$

$$+\frac{k_R-k_L}{k_L+k_R}\exp(ik_Rz')\Big]\Delta V(z')\,\Psi^R(z',v)$$

$$+\frac{2m^*}{i\hbar^2(k_L+k_R)}\int_{b_L}^{0}dz'\exp(-ik_Lz')\Delta V(z')\,\Psi^R(z',v), \quad (15)$$

а для $z < -b_L$

$$\Psi^R(z,v) = A^R(v)\exp(ik_Lz) + B^R(v)\exp(-ik_Lz), \quad (16)$$

где $A^R = 0$;

$$B^R(v) = \frac{2k_R}{k_L+k_R} + \frac{m^*}{i\hbar^2k_L}\int_{b_L}^{0}dz'\Big[\exp(ik_Lz')$$

$$+\frac{k_R-k_L}{k_L+k_R}\exp(-ik_Lz')\Big]\Delta V(z')\,\Psi^R(z',v)$$

$$+\frac{2m^*}{i\hbar^2(k_L+k_R)}\int_0^{b_R}dz'\exp(ik_Rz')\Delta V(z')\,\Psi^R(z',v). \quad (17)$$

Мы получили волновые функции Ψ^R и Ψ^L, которые описывают состояния, находящиеся справа и слева от исследуемой структуры, с входным сигналом и отраженной его частью, описанными уравнениями (2) и (4), и прошедшими частями сигнала, описанными выражениями (3) и (5), соответственно. Таким способом можно определить коэффициенты прохождения (C^L, B^R) и отражения (B^L, C^R) волновых функций Ψ^R и Ψ^L. Эти величины могут рассматриваться как элементы матрицы рассеяния-отражения TR:

$$\mathrm{TR} = \begin{vmatrix} B^L & B^R \\ C^L & C^R \end{vmatrix}. \quad (18)$$

С использованием матрицы собственных состояний можно получить R-матрицу рассматриваемой (см., напр., [5]) системы:

$$R = \Psi'(z,v)\,\Psi^{-1}(z,v). \quad (19)$$

После чего с помощью соотношений между R- и S-матрицами мы можем рассчитать последнюю:

$$S = [R\Psi^+ - (\Psi^+)']^{-1}[R\Psi^- - (\Psi^-)'], \quad (20)$$

где Ψ^+ и Ψ^- – расходящаяся и сходящаяся части соответствующих волновых пакетов [10, 12].

3. Исследование квантового диода

Применим развитый выше подход к расчету матрицы рассеяния структуры, потенциал которой изображен на рис.2, – реального квантового диода, находящего широкое применение в современной электронике. На рис.3 изображено одно из возможных представлений невозму-

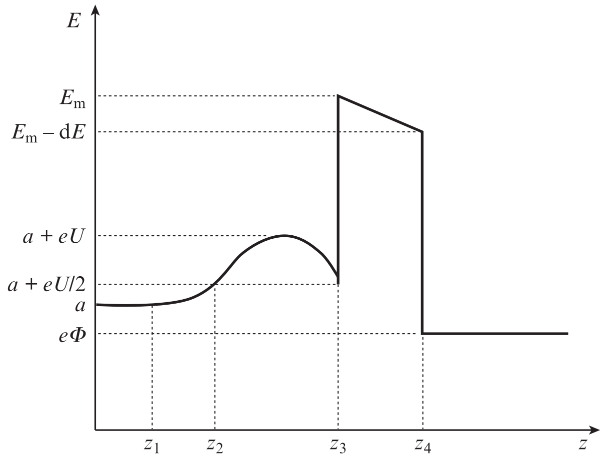

Рис.2. Потенциальная энергия в исследуемом диоде.

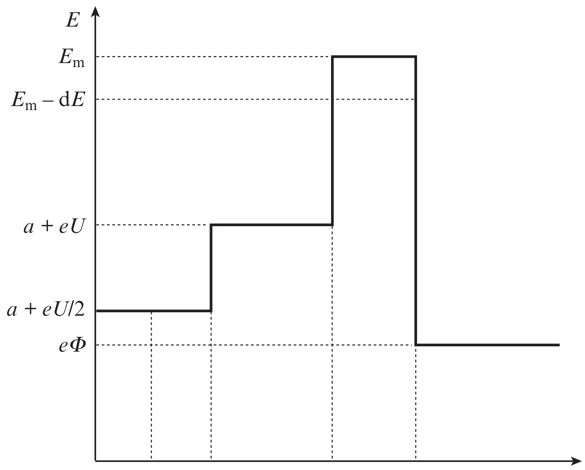

Рис.3. Представление потенциала в отсутствие возмущения.

щенной части данного потенциала. Согласно развиваемому подходу, решим уравнение Шредингера для невозмущенной части и получим волновые функции для каждой рассмотренной области. Далее, используя условия сшивки, найдем амплитуды волновых функций и соответствующие функции Грина. Мы не сочли нужным приводить полученные выражения в тексте данной работы, поскольку они довольно громоздки и могут быть легко рассчитаны в любых математических пакетах. Подставив эти выражения в (2), находим коэффициенты отражения и прохождения для случая возмущенного потенциала, которые, в свою очередь, являются решениями уравнения Липпмана–Швингера в следующей интерпретации. Различие волновых функций начального состояния и волновых функций, полученных после процесса рассеяния, заключается в присутствии дополнительной компоненты, существование которой связано с возмущением $\Delta V_1(z)$ на интервале $(z_1; z_2)$, возмущением $\Delta V_2(z)$ на интервале $(z_2; z_3)$ и т.д. После того как найдены волновые функции для каждого интервала, можно построить матрицу $\hat{\Psi}$ собственных значений волновой функции и матрицу

$$R = \hat{\Psi}'\hat{\Psi}^{-1}. \tag{21}$$

Теперь согласно (20) находим соответствующую матрицу рассеяния. Полученный результат можно применить для описания процесса прохождения волнового пакета с гауссовой огибающей через рассматриваемый диод.

Входной волновой пакет опишем следующим уравнением:

$$\Psi(k) = \exp\Big[-\frac{1}{2}a^2(k-k_0)^2\Big], \tag{22}$$

где a – ширина пакета. Расчет выполняется с использованием безразмерных переменных, введенных в работе [6]. Из граничных условий найдем седловые точки интегрального выражения, приведенного в работе [7], считая, что пакет будет наблюдаться через достаточно большой промежуток времени. Прошедший через систему волновой пакет будет представлен в виде суперпозиции пакетов для всех удовлетворяющих граничным условиям седловых точек. После того как этот пакет рассчитан, можно найти аргумент его волновой функции. Этот аргумент связан с аргументом волновой функции входного пакета и отличается от него только некоторым фазовым фактором, зависящим от кинетической энергии входного пакета, потенциальной энергии барьера и времени задержки. Отсюда вычисляется время задержки как производная от аргумента волновой функции по энергии (см., напр., [5]):

$$\Delta t = \frac{\mathrm{d}\arg\Psi}{\mathrm{d}E}. \tag{23}$$

Аргумент волновой функции прошедшего пакета представлен на рис.4. Зависимости времени задержки от параметров системы и импульса представлены на рис.5 и 6. Видно, что для некоторых значений импульса входного волнового пакета наблюдается минимальное время задержки, что соответствует максимальной скорости туннелирования данного пакета через рассматриваемый диод. Дальнейшее изменение импульса не приводит к уменьшению времени задержки. При достижении некоторого значения увеличение импульса не отражается существенным образом на времени задержки пакета.

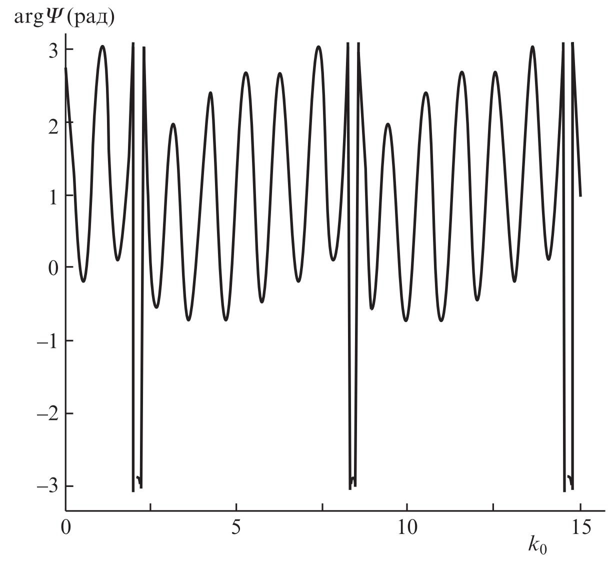

Рис.4. Аргумент волновой функции пакета при $\Gamma = 1$ и волновых числах $k_1 = 1$, $k_2 = 1$, $k_3 = 2$, $k_4 = 5$ и $k_5 = 1$, соответствующих интервалам на оси z на рис.2, 3.

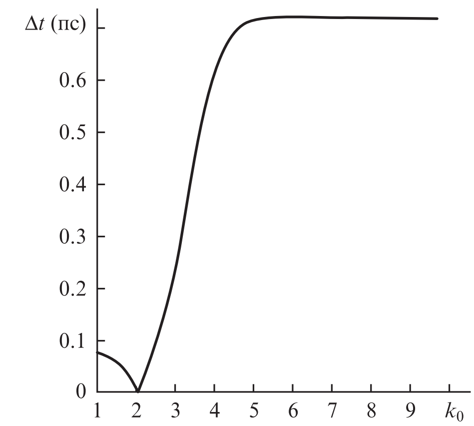

Рис.5. Время задержки пакета Δt для системы при $\Gamma = 1$ и волновых числах $k_1 = 1$, $k_2 = 1$, $k_3 = 2$, $k_4 = 5$ и $k_5 = 1$.

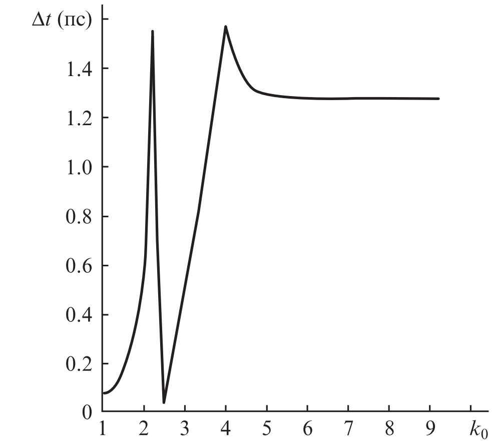

Рис.6. Время задержки пакета Δt для системы при $\Gamma = 1$ и волновых числах $k_1 = 1$, $k_2 = 3$, $k_3 = 4$, $k_4 = 4$ и $k_5 = 1$.

4. Заключение

В настоящей работе исследовано время задержки пакетов в квантовом диоде. Детально изучено движение волнового пакета с гауссовой огибающей не через гипотетическую, а через реально существующую и используемую на практике квантовую структуру с резонансными уровнями. Расчеты показывают, что при некоторых значениях параметров системы и пакета наблюдается полное внутреннее рассеяние. Это означает, что прошедший пакет отсутствует и время задержки бесконечно. Специфическое поведение наблюдаемой зависимости времени туннелирования от параметров системы и пакета может найти применение на практике. Как было указано во Введении, проблема резонансного туннелирования через открытую квантовую систему не была решена в общем виде. Поэтому полученные результаты могут быть использованы в микроэлектронике для подбора оптимальных параметров пакета для рассматриваемых систем. Развитый метод универсален и позволяет изучать процесс туннелирования волновых пакетов с различной формой огибающей через произвольные квантовые системы с резонансными уровнями. Одним из дальнейших приложений разработанного метода является обобщение его на электромагнитные импульсы и классические резонансные системы. Эта проблема будет рассмотрена в наших последующих работах.

1. Van der Wiel W.G., De Franceschi S., Elzerman J.M., Fujisawa T., Tarucha S., Kouwenhoven L.P. *Rev. Mod. Phys.*, **75**, 17 (2002).
2. Stone A.D., Lee P.A. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 1196 (1985).
3. Jiang Z.T., Sun Q.F. *J. Phys. Condens. Matter*, **19**, 156 (2007).
4. Condon E.U., Morse P.M. *Rev. Mod. Phys.*, **3**, 43 (1931).
5. Razavy M. *Quantum Theory of Tunneling* (Singapore: World Scientific, 2003, pp 351 – 375).
6. Wulf U., Skalozub V.V., Zaharov A. *Phys. Rev. B*, **77**, 045318 (2004).
7. Ivanov N.A., Skalozub V.V. *Theor. Math. Phys.*, **168**, 1096 (2011).
8. Ivanov N.A., Skalozub V.V. *Probl. Atom. Sci. Technol.*, **1**, 292 (2012).
9. De Alfaro V., Regge T. *Potential Scattering* (University of Turin, 1965).
10. Racec P.N. *Ph.D. Thesis* (Cottbus, University of Technology, 2002).
11. Brillouin L. *Wave Propagation and Group Velocity* (New York: Academic Press, 1960).
12. Barut A.O. *The Theory of the Scattering Matrix* (New York: Macmillan, 1967).