Письма в ЖТФ, том 19, вып. 17 12 сентября 1993 г.

01;06

РЕШЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ПРОХОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ЧЕРЕЗ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ В СЛАБЫХ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ПОЛЯХ

А.Б.Пашковский

В последние годы с развитием современной наноэлектронной технологии возник широкий класс задач (например таких, как прохождение электронов через квантоворазмерные структуры в высокочастотных (ВЧ) полях), требующих нахождения установившихся решений нестационарного уравнения Шредингера. До настоящего времени не существует общих подходов к решению этой проблемы. Применение стандартной теории возмущений сталкивается, по всей видимости, со значительными трудностями, а различные подходы, используемые, например, при анализе динамики резонансного туннелирования электронов и основанные на использовании приближения времени жизни [1], численного расчета прохождения гауссовых пакетов [2], функции Вигнера [3] неравновесных функций Грина [4], аналитических свойств коэффициента прохождения [5], или вообще не учитывают специфику взаимодействия электронов с ВЧ полем или очень сложны, дают во многом противоречивые результаты даже для двухбарьерных структур с одной квантовой ямой, а кроме того, не позволяют получать решения в аналитичсеком виде. Поэтому в данной работе предлагается вариант нестационарной теории возмущений, удобный для применения в непрерывном спектре и позволяющий решать широкий класс упомянутых выше задач.

Пусть $\hat{H}_0$ — независящий от времени гамильтониан невозмущенной системы, а нестационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}_0\psi + \hat{V}\psi, \tag{1}$$

где $\hat{V} = V_-(x)e^{i\omega t} + V_+(x)e^{-i\omega t}$ — зависящее от времени периодическое возмущение. Требуется найти установившееся решение уравнения (1), независящее от начальных условий и отвечающее заданным граничным условиям (например, при $x = -\infty$ задана плотность потока частиц, движущихся слева направо). Предполагается, что решение невозмущенной задачи известно. Так как $V_\pm(x)$ малы, то решение можно искать в виде $\psi = \psi_0(x,t) + \psi_1(x,t)$, где $\psi_0 = \psi_0(x) \cdot e^{-i\omega_0 t}$ — решение невозмущенной задачи, $\psi_1 \ll \psi_0$, $\omega_0 = E_0/\hbar$, E_0 — энергия электронов в стационарном состоянии. Функция ψ_1 удовлетворяет уравнению:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \hat{H}_0\psi_1 + \left(V_-(x)e^{i\omega t} + V_+(x)e^{-i\omega t}\right)\psi_0. \tag{2}$$

Ищем ψ_1 в виде $\psi_1(x,t) = \psi_+(x)e^{-i(\omega_0+\omega)t} + \psi(x)e^{-i(\omega_0-\omega)t}$. Функции $\psi_\pm$ удовлетворяют уравнению:

$$\hbar(\omega_0 \pm \omega)\psi_\pm(x) = \hat{H}_0\psi_\pm + V_\pm(x)\psi_0(x). \tag{3}$$

Так как решение невозмущенной задачи известно, то известны и общие решения уравнения (3). Частное решение уравнения (3) можно найти методом "вариации постоянных" [6], а во многих случаях (например, при прохождении электронов через системы прямоугольных или треугольных барьеров в однородном ВЧ поле), такие решения могут быть найдены аналитически или в виде степенных рядов. Условия непрерывности волновой функции и ее производной в каждый момент времени приводят к тому, что функции ψ_+ и ψ_- — независимы, а это с соответствующими граничными условиями позволяет найти их, а значит найти и волновую функцию всей системы.

Рассмотрим важный для практики случай, когда потенциальная энергия $U(x)$ в невозмущенном гамильтониане и возмущение $V_\pm(x)$ существенно изменяются в области $0 < x < a$, а при $x < 0$, $U(x) = V_\pm(x) = 0$. Волновая функция стационарного состояния (для определенности считаем, что электроны движутся слева направо) имеет вид:

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \exp[ikx] + D_0 \exp[-ikx], & x < 0 \\ A_0 f(x,\omega_0) + B_0 g(x,\omega_0), & 0 < x < a \\ C_0 \exp[i\tilde{k}(x-a)], & x > a. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь $f(x,\omega)$, $g(x,\omega)$ — линейно независимые решения уравнения $\hat{H}_0\psi = E\psi$, $k = (2m^* E_0/\hbar^2)^{1/2}$, $\tilde{k} = (2m^*(E_0 - U(a))/\hbar^2)^{1/2}$, m^* эффективная масса электрона. Тогда функции $\psi_\pm$ имеют вид:

$$\psi_\pm(x) = \begin{cases} D_\pm \exp[-ik_\pm x], & x < 0 \\ A_\pm f(x,\omega_0 \pm \omega) + B_\pm g(x,\omega_0 \pm \omega) + \varphi_\pm(x), & 0 < x < a \\ C_\pm \exp[i\tilde{k}_\pm(x-a)] + P_\pm \exp[i\tilde{k}(x-a)], & x > a \end{cases} \quad (5)$$

где $k_\pm = (2m^*)(\omega_0 \pm \omega/\hbar)^{1/2}$, $\tilde{k}_\pm = (2m^*(E_0 - U(a) \pm \hbar\omega)/\hbar^2)^{1/2}$, $\varphi_\pm(x)$ — частные решения уравнения (3) при $0 < x < a$, $P_\pm \exp[i\tilde{k}(x-a)]$ — частные решения (3) при $x > a$, ($P_\pm = \pm C_0 V(a)/\hbar\omega$), а коэффициенты $A_\pm$, $B_\pm$, $C_\pm$, $D_\pm$ находятся из условий сшивания волновой функции и ее производных на границах области в каждый момент времени:

$$\begin{cases} D_\pm = A_\pm f(0,\omega_0 \pm \omega) + B_\pm g(0,\omega_0 \pm \omega) + \varphi_\pm(0) \\ -ik_\pm D_\pm = A_\pm f'(0,\omega_0 \pm \omega) + B_\pm g'(0,\omega_0 \pm \omega) + \varphi'_\pm(0) \\ A_\pm f(a,\omega_0 \pm \omega) + B_\pm g(a,\omega_0 \pm \omega) + \varphi_\pm(a) = C_\pm + P_\pm \\ A_\pm f'(a,\omega_0 \pm \omega) + B_\pm g'(a,\omega_0 \pm \omega) + \varphi'_\pm(0) = i\tilde{k}_\pm C_\pm + i\tilde{k} P_\pm. \end{cases} \quad (6)$$

Аналогичным образом могут быть получены выражения и для более высоких порядков теории возмущений. Кроме того, теория может быть естественным образом обобщена как на случай многочастотных полей, так и на случай, когда потенциальная энергия в невозмущенном гамильтониане имеет сложный вид и общие решения уравнения (3) могут быть найдены аналитически только при разбиении области от 0 до а на несколько характерных областей.

Пренебрегая членами второго порядка малости, с учетом вида ВФ стационарного состояния для плотности тока за областью взаимодействия ($j = j_0 + j_\omega = j_0 + j_{+\omega} + j_{-\omega}$) можно получить:

$$j = \frac{q\hbar}{2m^*}\left\{2\tilde{k}|C_0|^2 + \left[\left(\tilde{k} + \tilde{k}_+\right) C_0 C_+^* \exp\left[i\left(\tilde{k} - \tilde{k}_+\right)(x-a)\right] + \right.\right.$$

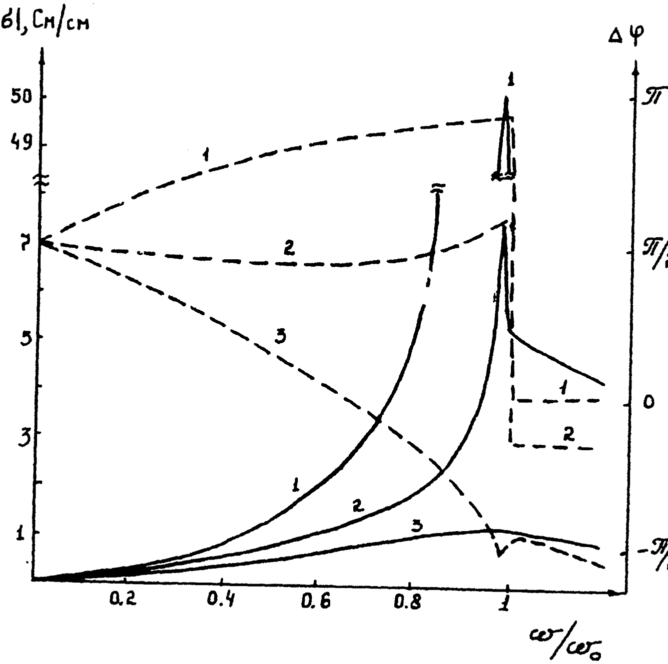

Рис. 1. Зависимость модуля проводимости (сплошная линия) сдвига фаз между током на выходе и полем (пунктир) от нормированной частоты ω/ω_0 ($\omega_0 = E/\hbar$) при пролете электронами безбарьерного участка с высокочастотным полем толщиной 100 Å. Энергия электронов: *1* — $E = 1$ мэВ, *2* — $E = 30$ мэВ, *3* — $E = 300$ мэВ.

$$+\left(\tilde{k}+\tilde{k}_-\right) C_0^* C_- \exp\left[i\left(\tilde{k}-\tilde{k}\right)(x-a)\right]\Bigg] e^{i\omega t} + \text{K.C.}\Bigg\} \qquad (7)$$

а энергию, получаемую электронами от ВЧ поля (или отдаваемую электронами полю) за период колебаний $T = \omega/2\pi$ рассчитать по формуле:

$$W = \frac{\hbar^2 \omega T}{2m^*}\left[\tilde{k}_+|C_+|^2 + k_+|D_+|^2 - \tilde{k}_-|C_-|^2 - k_-|D_-|^2\right]. \qquad (8)$$

Приведенные формулы верны только при $\hbar\omega < E_0$ и $\hbar\omega < E_0 - U(a)$, когда общими решениями (3) для ψ_-при $x < 0$ и $x > a$ являются плоские волны. При $\hbar\omega > E_0$ и $\hbar\omega > E_0 - U(a)$ ψ — принимают вид: $\psi_-(x) = C\exp[-\tilde{\varkappa}(x-a)] + P_-\exp[i\tilde{k}(x-a)]$, при $x > a$ и $\psi_-(x) = D\exp(\varkappa x)$ при $x < 0$ (здесь $\tilde{\varkappa} = (2m^*(\hbar\omega - E_0 + U(a))/\hbar^2)^{1/2}$ $\varkappa = (2m^*(\hbar\omega - E_0)/\hbar^2)^{1/2}$), что приводит к появлени тока $j_{-\omega}$,

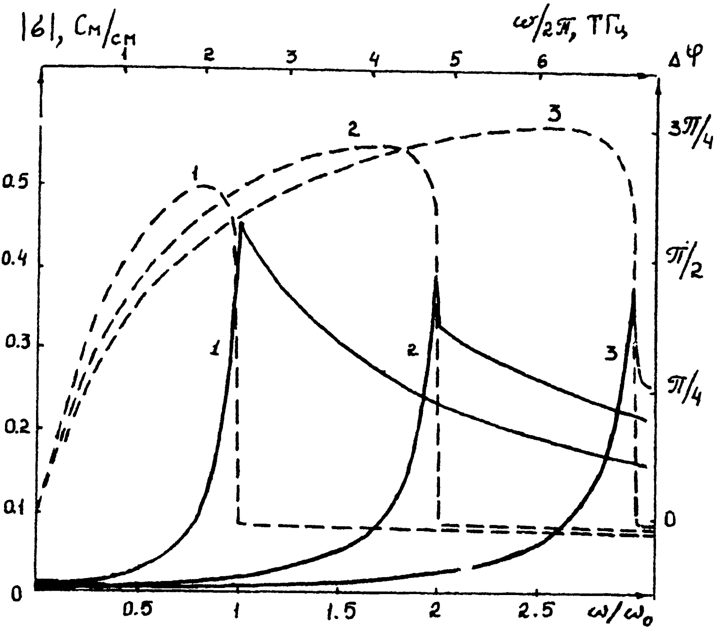

Рис. 2. Зависимость модуля проводимости (сплошная линия) сдвига фаз между током на выходе и полем (пунктир) от нормированной частоты ω/ω_0 ($\omega_0 = E/\hbar$) при прохождении электронов через $Al_xGa_{1-x}As$ барьер высотой $U = 60$ мэВ, толщиной 5 Å. Энергия электронов: *1* — $E_0 = 10$ мэВ, *2* — $E = 3E_0$, *3* — $E = 3E_0$.

экспоненциально затухающего с расстоянием. При этом решение ψ_- можно интерпретировать как появление в области с ВЧ полем особого состояния, назовем его квазисвязанным, на котором локализуются электроны.

Как пример применения теории рассмотрим прохождение электронов с концентрацией $n = 10^{17}$ см$^{-3}$ через прямоугольные барьеры и безбарьерные участки с локализованным однородным электрическим полем. Результаты расчетов частотных зависимостей сдвига фазы $\Delta\varphi$ между током и полем и модуля комплексной проводимости $|\sigma|$ по формулам (6–7) приведены на рис. 1, 2. Видно, что при пролете безбарьерных участков на низкой частоте сдвиг фазы между током и полем равен $\pi/2$. Это принципиально отличает пролет безбарьерных участков от прохождения частиц через барьер: там при $\omega \to 0$ $\Delta\varphi \to 0$.

Интересно отметить, что при пролете достаточно коротких безбарьерных участков с локализованным ВЧ полем (или при достаточно низкой энергии электронов), как и при прохождении электронов через тонкие барьеры величина $\Delta\varphi$ может быть больше, чем $\pi/2$, то есть такие структуры должны обладать отрицательной динамической проводимостью — в них электроны отдают энергию высокочастотному полю. Этот вывод подтверждается также расчетами по формуле (8).

Список литературы

[1] *Brown E.R., Parker C.D., Solner T.C.L.G.* // Appl. Phys. Lett. 1989. V. 54. N 10. P. 934–936.
[2] *Волкова Е.А., Попов Ф.М., Поповичева О.Б.* // ФТП. 1991. Т. 25. № 9. С. 1618–1623.
[3] *Frensley W.R.* // Superlattices and Microstructures. 1988. V. 4. N 4/5. P. 497–501.
[4] *Chen L.Y., Ting C.S.* // Physical Review B. 1991–11. V. 43. N 3. P. 2097–2105.
[5] *Kislov V., Kamenev A.* // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59. N 12. P. 1500–1502.
[6] *Камке Э.*Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: "Наука", 1965. С. 148.

Поступило в Редакцию
15 июня 1993 г.