

НЕРАВНОВЕСНАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ДЛЯ ТУННЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ В ПОДХОДЕ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ

П. И. Арсеев^{a,b*}, Н. С. Маслова^c

^a Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b НИУ Высшая школа экономики
101000, Москва, Россия

^c Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 сентября 2015 г.

Показано, как общие формулы неравновесной диаграммной техники могут быть применены к задачам о туннельных планарных структурах, описываемых в подходе эффективной массы. Установлена связь такого «континуального» подхода с методом туннельного гамильтониана, определены условия применимости последнего. Обсуждено, какие эффекты, остающиеся за границей применимости метода туннельного гамильтониана, позволяет описать «континуальный» подход.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 85-летию Л. В. Келдыша

DOI: 10.7868/S0044451016030020

1. ВВЕДЕНИЕ

Описание широкого круга туннельных систем строится на основе метода туннельного гамильтониана. В рамках этого метода не интересуются деталями решения одночастичной задачи о туннелировании электрона через барьер, а формулируют проблему сразу на языке вторичного квантования. В самом простом случае считается, что есть две системы (берега контакта), состояния в которых описываются операторами c_k и c_p . Эти две системы связаны туннельным гамильтонианом вида

$$H_t = \sum_{k,p} T_{k,p} c_k^\dagger c_p + \text{H.c.}, \quad (1)$$

описывающим переходы из состояний k слева от барьера в состояния p справа от барьера (и наоборот). Для более сложной системы, в которой несколько подсистем разделено потенциальными барьерами, также вводится ряд туннельных матричных элементов, обеспечивающих переходы электронов из одной подсистемы в другую. Применение неравновес-

ной техники для описания туннелирования на таком языке в подходе сильно связанных электронов было описано, видимо, впервые в работе [1]. После работы [2] неравновесная диаграммная техника стала широко применяться для описания туннелирования методом туннельного гамильтониана в различных системах. Несмотря на успех такого подхода, во-первых, в этом методе пропадает информация о том, что происходит в барьере, во-вторых, для ряда систем, например, полупроводниковых планарных гетероструктур, сверхрешеток и т. д., удобно использовать приближение эффективной массы, связывающее такие задачи с одномерными задачами квантовой механики о прохождении электрона через потенциальный барьер. Если для метода туннельного гамильтониана применение неравновесной диаграммной техники (НДТ) является общеупотребительным, то формализм НДТ в «континуальном» виде, опирающемся на приближение эффективной массы, используется гораздо реже (пример — вычисление тока термоэмиссии в работе [3]), хотя связь подхода сильно связанных электронов с подходом эффективной массы в НДТ обсуждалась еще в работе [4]. Даже для регулярных сверхрешеток, как правило, сразу переходят на язык туннельного гамильтониана [5, 6]. Между тем, такая «континуаль-

* E-mail: ars@lpi.ru

ная» формулировка НДТ позволяет, с одной стороны, проследить связь с языком коэффициентов прохождения и отражения электрона (свободного) на барьере, с другой стороны, установить связь с методом туннельного гамильтониана и определить границы применимости последнего. Кроме того, в отличие от метода туннельного гамильтониана, здесь появляется возможность учесть электрон-электронное и электрон-фононное взаимодействия в барьере (электрон-фононное взаимодействие было включено в теорию в подходе сильной связи в работе [7]).

Чтобы выяснить, как в таком «континуальном» представлении описать туннелирование на языке неравновесной диаграммной техники, напомним ряд соотношений для функций Грина однородной системы. Для однородного полупроводника или металла функции Грина имеют простой вид в импульсном представлении:

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon(k) + i\gamma}, \quad (2)$$

$$G^<(k, \omega) = 2in(\omega)\delta(\omega - \varepsilon(k))$$

(γ — здесь бесконечно малая добавка). Для решения задач о туннельном прохождении электрона через планарные структуры удобно пользоваться функциями Грина в смешанном представлении, когда в плоскости, параллельной границам раздела, проведен переход к импульсному представлению, но оставлена явная зависимость всех функций от координаты вдоль оси, перпендикулярной к границам. Эту ось будем считать осью z . Уравнение, в символическом общем виде записываемое как

$$G_R^{-1}G^R = 1,$$

для случая квадратичного спектра $\varepsilon(k) = k^2/2m$ выглядит в разных представлениях следующим образом (здесь и далее $\hbar = 1$):

$$(\omega - \varepsilon(k))G^R(k, \omega) = 1, \quad (3)$$

$$\left(\frac{1}{2m}\Delta + \omega\right)G^R(r, r', \omega) = \delta(r - r'), \quad (4)$$

$$\left[\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega - \frac{p^2}{2m} + i\gamma\right]G^R(z, z', p, \omega) = \delta(z - z'). \quad (5)$$

В последнем уравнении бесконечно малая мнимая часть выписана в явном виде, так как она обеспечивает однозначный выбор решения этого уравнения. Введем обозначение

$$\kappa = \sqrt{2m(\omega + i\gamma) - p^2} \quad (6)$$

и выберем ветвь корня с $\text{Im } \kappa > 0$. (Такое соглашение будет действовать для всех корней такого вида.) Тогда существует единственное решение уравнения (5), конечное при $|z - z'| \rightarrow \infty$:

$$G^R(z, z', p, \omega) = \frac{e^{i\kappa|z-z'|}}{i\kappa}m. \quad (7)$$

Опережающая функция всегда связана с запаздывающей соотношением типа

$$G^A(z, z', p, \omega) = [G^R(z', z, p, \omega)]^*.$$

Поэтому

$$G^A(z, z', p, \omega) = \frac{e^{-i\kappa^*|z-z'|}}{-i\kappa^*}m. \quad (8)$$

Для функции $G^<$ имеем соотношение

$$G^<(z, z', p, \omega) = n(\omega) [G^A(z, z', p, \omega) - G^R(z, z', p, \omega)] = in(\omega) \left[\frac{e^{i\kappa|z-z'|}}{\kappa} + \frac{e^{-i\kappa^*|z-z'|}}{\kappa^*} \right] m, \quad (9)$$

при этом функция $G^<$ при совпадающих аргументах, определяющая концентрацию электронов, равна (см. (6))

$$G^<(0, 0, p, \omega) = in(\omega) \frac{\kappa^* + \kappa}{|\kappa|^2} m = \begin{cases} \frac{in(\omega)}{\kappa} 2m & \text{при } p^2/2m < \omega, \\ 0 & \text{при } p^2/2m > \omega. \end{cases} \quad (10)$$

Такая форма для $G^<$ для свободного электронного газа сразу следует из соотношения

$$G^<(k, \omega) = n(\omega)(G^A(k, \omega) - G^R(k, \omega)).$$

Однако это же выражение можно получить из более общих выражений келдышевской техники следующим образом. Введем небольшое рассеяние электронов на случайных примесях. Неприводимая часть, соответствующая такому взаимодействию, в приближении широкой зоны вычисляется обычным образом:

$$\Sigma^R(\omega) = \sum_k u^2 G^R(k, \omega) = -i\gamma, \quad (11)$$

$$\Sigma^R(z, z', \omega) = -i\gamma\delta(z - z'), \quad (12)$$

$$\Sigma^<(\omega) = \sum_k u^2 G^<(k, \omega) = 2i\gamma n(\omega), \quad (13)$$

$$\Sigma^<(z, z', \omega) = 2i\gamma n(\omega)\delta(z - z'), \quad (14)$$

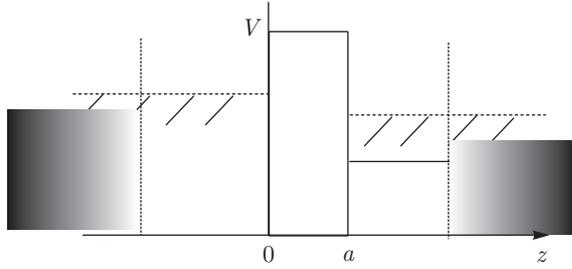


Рис. 1. Схема туннельной системы с областями вне контакта, которые являются термостатами

где u — матричный элемент потенциала рассеяния на примеси, $\gamma = \pi V^2 \nu_F$.

Такие выражения можно рассматривать двояким образом: можно считать появления таких Σ следствием рассеяния на примесях, и в качестве $n(\omega)$ могут выступать числа заполнения для нашей электронной системы, которые постулируются равновесными фермиевскими функциями для заданного потенциала.

Однако такие же собственно-энергетические части позволяют описать тот факт, что любая туннельная система расположена между термостатами с различными химическими потенциалами и температурами. Именно возможность прихода и ухода электронов из термостатов обеспечивает протекание тока в системе. Если ввести случайную по пространству амплитуду перехода электрона в термостат и обратно, u , то на языке функций Грина это означает появление точно таких же неприводимых частей, как и для рассеяния на примесях (11):

$$\begin{aligned} \Sigma^R(z, z', \omega) &= -i\gamma(z)\delta(z - z'), \\ \Sigma^<(z, z', \omega) &= 2i\gamma(z)n(\omega)\delta(z - z'), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\gamma = \pi \langle u^2 \rangle \nu_F$ — скорость перехода электронов в термостат с равновесной функцией распределения электронов $n(\omega)$.

Такой прием позволяет ввести разные потенциалы и разные температуры для левого и правого берега, «заложённые» в числа заполнения $n(\omega)$ соответствующих $\Sigma^<$. Если отодвинуть область взаимодействия с термостатом (т. е. область, в которой считаются заданными неприводимые части (11)–(14)) на некоторое расстояние от туннельной структуры (рис. 1), то такая схема позволяет моделировать контакты самых разных типов: термостатные области, в которых считается всегда заданным равновесное распределение Гиббса — это массивные части контакта, в которых считаются заданными температура и потенциал, а в промежуточной области решение

уравнений НДТ (иногда приближенное) позволяет найти все неравновесные характеристики в переходной области контакта.

Функция $G^<$ может быть найдена по общей формуле неравновесной техники $G^< = G^R \Sigma^< G^A$:

$$\begin{aligned} G^<(z, z', p, \omega) &= \int dz_1 dz_2 G^R(z, z_1, p, \omega) \times \\ &\times \Sigma^<(z_1, z_2, p, \omega) G^A(z_2, z', p, \omega) = \\ &= \int dz_1 G^R(z, z_1, p, \omega) 2i\gamma(z_1) n(\omega, z_1) \times \\ &\times G^A(z_1, z', p, \omega), \end{aligned} \quad (16)$$

или из эквивалентного дифференциального уравнения $(G_0^{-1} - \Sigma^R)G^< = \Sigma^<G^A$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega - \frac{p^2}{2m} + i\gamma \right] G^<(z, z', p, \omega) &= \\ &= 2i\gamma n(\omega) G^A(z, z', p, \omega), \end{aligned} \quad (17)$$

где γ и $n(\omega)$ имеют различные значения в каждой «термостатной» области. Для однородной системы, подставив в эти выражения (7) и (8), можно убедиться, что воспроизводится формула (9) для $G^<$, и γ теперь может быть не только бесконечно малой (как для идеального газа), но и конечной величиной, появившейся из-за рассеяния на примесях или взаимодействия с внешним термостатом.

С помощью подобного приема в работе [3] была исследована роль неидеальности переходного слоя на границе металла на ток термоэмиссии.

2. ТУННЕЛИРОВАНИЕ ЧЕРЕЗ ОДИН БАРЬЕР

Рассмотрим кратко, как связано точное решение задачи о туннелировании через один барьер, найденное с помощью функций Грина первого раздела, с решением методом туннельного гамильтониана. Пусть у нас есть туннельная структура, изображенная на рис. 2.

Отсчет энергии ведется от дна зоны проводимости левого берега. Приложенное напряжение U входит в сдвиг химического потенциала в электронных функциях заполнения для областей слева и справа от барьера. Все величины, относящиеся к области слева от барьера будем обозначать индексом «0», а все величины справа — индексом «1». Числа заполнения слева: $n_0(\omega) = n_F(\omega - \mu)$, справа: $n_1(\omega) = n_F(\omega - \mu - eU)$. Ось z направлена перпендикулярно слоям структуры, барьер расположен в области $0 < z < a$, a — толщина барьера.

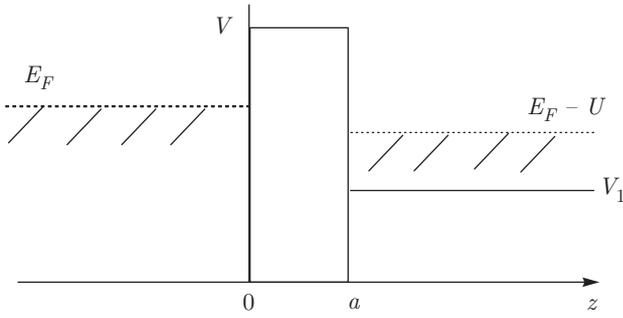


Рис. 2. Форма потенциала, задающего одномерную туннельную структуру

Для такой формы потенциала точное решение дифференциальных уравнений для $G^R(z, z')$ типа уравнения (5) в каждой из областей с последующим сшиванием решений (должна быть непрерывна сама функция Грина по аргументам z, z' и ее первая производная) дает следующий ответ для $z > a$ и $z' < 0$:

$$G^R(z, z', p, \omega) = 2m \frac{-2q}{D} \times \exp(-i\kappa_0 z' + i\kappa_1(z - a)), \quad (18)$$

$$D = (q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)e^{qa} - (q + i\kappa_1)(q + i\kappa_0)e^{-qa}. \quad (19)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= \sqrt{2m(\omega + i\gamma) - p^2}, \\ \kappa_1 &= \sqrt{2m(\omega - V_1 + i\gamma) - p^2}, \\ q &= \sqrt{p^2 + 2m(V - \omega + i\delta)} \end{aligned} \quad (20)$$

и для простоты считается, что взаимодействие с термостатом (величина γ) одинаково слева и справа от барьера, а δ — бесконечно малая величина. Нам важна область энергий, в которой электроны туннельным образом проходят через барьер: $\omega < p^2/2m + V$, поэтому в подбарьерной области величина $q > 0$ действительна.

Соответствие с методом туннельного гамильтониана можно установить, если считать, что для туннельной задачи $e^{2qa} \gg 1$ (для всех ω между химическими потенциалами левого и правого берега), т. е. при малой прозрачности барьера, когда на состоянии на каждом берегу слабо влияют процессы «двойного» туннелирования — туда и обратно. Тогда G^R (18) имеет вид

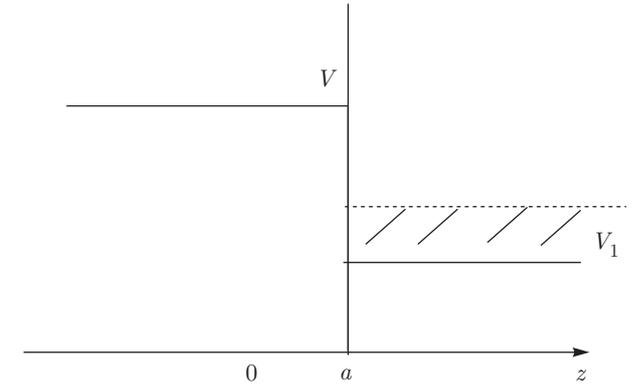
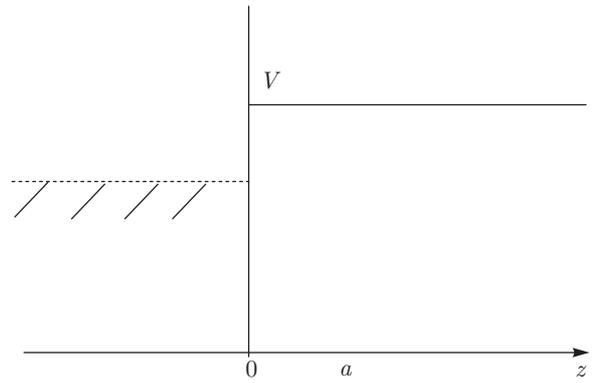


Рис. 3. Области для вычисления функций Грина отдельно левого и правого берегов контакта

$$G^R(z, z', p, \omega) = 2m \frac{-2qe^{-qa}}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)} \times \exp(-i\kappa_0 z' + i\kappa_1(z - a)) = \quad (21)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{-(4q/m)e^{-qa} i\kappa_1 i\kappa_0}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)} m \frac{e^{i\kappa_1(z-a)}}{i\kappa_1} m \frac{e^{-i\kappa_0 z'}}{i\kappa_0} = \\ &= T(p, \omega) G_1^R(z, a, p, \omega) G_0^R(0, z', p, \omega), \end{aligned} \quad (22)$$

где функции G_1^R, G_0^R — исходные функции Грина (7) для однородных областей соответственно справа и слева от барьера, а появившийся туннельный матричный элемент равен

$$T(p, \omega) \equiv \frac{-(4q/m)e^{-qa} i\kappa_1 i\kappa_0}{(q - i\kappa_1)(q - i\kappa_0)}. \quad (23)$$

Здесь в качестве функций Грина левого и правого берегов были взяты функции бесконечной однородной системы. Однако более логично взять в качестве невозмущенных функций Грина решения для полубесконечной системы, ограниченной потенциальной стенкой той же высоты, что и высота барьера, т. е. функции Грина «отдельно» для левой и правой частей контакта (рис. 3).

Эти функции имеют вид

$$\begin{aligned} G_0^R(0, z', p, \omega) &= \frac{e^{-i\kappa_0 z'}}{i\kappa_0 - q} 2m, \quad z' < 0, \\ G_1^R(z, a, p, \omega) &= \frac{e^{i\kappa_1(z-a)}}{i\kappa_1 - q} 2m, \quad z > a. \end{aligned} \quad (24)$$

Тогда функция G^R всей системы (21) для $z > a$ и $z' < 0$ может быть записана и таким образом:

$$\begin{aligned} G^R(z, z', p, \omega) &= \frac{e^{i\kappa_1(z-a)}}{i\kappa_1 - q} 2m \frac{-2qe^{-qa}}{2m} \frac{e^{-i\kappa_0 z'}}{i\kappa_0 - q} 2m = \\ &= G_1^R(z, a, p, \omega) T(p, \omega) G_0^R(0, z', p, \omega). \end{aligned} \quad (25)$$

Это полный аналог выражения, характерного для метода туннельного гамильтониана: $G_{12}^R = G_1^R T_{12} G_2^R$, а туннельный матричный элемент приобретает очень простой вид:

$$T(p, \omega) \equiv \frac{-qe^{-qa}}{m}. \quad (26)$$

Функцию $G^<(z, z')$, необходимую для вычисления тока, проще всего находить по формулам типа (16), после того, как найдены решения для $G^{R(A)}(z, z')$ в разных областях по z . В формулу, аналогичную (16), теперь будут входить $\Sigma^<$ и от левой, и от правой областей контакта, поэтому в функции $G^<(z, z')$ будут содержаться и числа заполнения $n_0(\omega)$, и числа $n_1(\omega)$, т. е. будет содержаться информация о приложенной к контакту разности потенциалов.

Ток через барьер определяется обычной формулой:

$$j = -\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z'} \right) G^<(z, z') \Big|_{z=z'}. \quad (27)$$

В тех областях структуры, где полный ток сохраняется (где нет ухода электронов во внешний термостат), можно для вычислений по этой формуле выбирать любую плоскость z . Удобно брать плоскость $z = 0$ или $z = a$. Результат точного вычисления функции $G^<(z, z')$ приводит к следующему значению спектральной плотности тока (в том же приближении $e^{2qa} \gg 1$):

$$\begin{aligned} j(p, \omega) &= \frac{-4q^2 e^{-2qa} (\kappa_1 + \kappa_1^*)(\kappa_0 + \kappa_0^*)}{|q - i\kappa_1|^2 |q - i\kappa_0|^2} \times \\ &\quad \times (n_0(\omega) - n_1(\omega)). \end{aligned} \quad (28)$$

Это плотность тока для частиц с импульсом p вдоль слоев и энергией ω . Полный ток

$$J = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \frac{d\omega}{2\pi} j(p, \omega).$$

Оказывается, что это выражение можно переписать через тот же туннельный матричный элемент $T(p, \omega)$, который был введен в формулах (26), (25), в форме, полностью эквивалентной методу туннельного гамильтониана:

$$\begin{aligned} j(p, \omega) &= T(p, \omega) \times \\ &\quad \times [\text{Im} G_1^R(a, a, p, \omega) T^*(p, \omega) G_0^<(0, 0, p, \omega) - \\ &\quad - G_1^<(a, a, p, \omega) T^*(p, \omega) \text{Im} G_0^R(0, 0, p, \omega)], \end{aligned} \quad (29)$$

так как для функций Грина отдельно левого берега имеем выражения (см. (9), (24)):

$$\begin{aligned} G_0^<(0, 0, p, \omega) &= in_0(\omega) \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2} 2m, \\ \text{Im} G_0^R(0, 0, p, \omega) &= -\frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2} m, \end{aligned} \quad (30)$$

и для правого — аналогичные выражения.

Таким образом, мы видим следующее соответствие.

В методе туннельного гамильтониана исходно известны две функции Грина G_k и G_p , описывающие электроны в изолированных левом и правом берегах контакта (или в квантовой яме), а возмущение имеет вид туннельного гамильтониана

$$H_t = \sum_{k,p} T_{k,p} c_k^\dagger c_p + \text{H.c.}, \quad (31)$$

описывающего переходы из состояний k слева от барьера в состояния p справа от барьера (и наоборот). Здесь эта схема выглядит так: исходные «нулевые» функции Грина — это тоже функции Грина отдельно для областей слева и справа от барьера, а туннельный матричный элемент зависит от частоты продольного импульса и символически может быть записан как $\delta(z_1)T(p, \omega)\delta(z_2 - a)$. Это означает, что пространственные аргументы функций Грина, связанных туннельным матричным элементом, должны быть взяты на краю барьера (каждая — на своем). Если для туннельного гамильтониана недиагональная функция G_{kp} имеет вид

$$G_{kp} = G_k T_{k,p} G_p,$$

то теперь такой недиагональной функции Грина соответствует функция $G(z, z')$ с аргументами z и z' , взятыми по разные стороны барьера, например, $z < 0, z' > a$. Тогда

$$G_{kp} \rightarrow G(z, z'), \quad z < 0, \quad z' > a, \quad (32)$$

$$G_k T_{k,p} G_p \rightarrow G_0(z, 0, p, \omega) T(p, \omega) G_1(a, z', p, \omega). \quad (33)$$

Ток через контакт в подходе эффективной массы дается формулой (29), также соответствующей выражению для подхода туннельного гамильтониана:

$$J = \sum_{k,p} (T_{kp} G_{kp}^< - T_{kp}^* G_{pk}^<) \rightarrow (T(p, \omega) G^<(0, a, p, \omega) - T^*(p, \omega) G^<(a, 0, p, \omega)). \quad (34)$$

Получается, что в случае слабой прозрачности барьера в подходе эффективной массы все физические величины выражаются через эффективный туннельный матричный элемент $T(p, \omega)$ и функции Грина изолированных берегов, взятые для аргументов z на краю барьера, так же, как и в методе туннельного гамильтониана.

Однако, переходя к описанию на языке туннельного гамильтониана, мы теряем информацию о том, что происходит в барьере. Например, если в барьере надо учитывать взаимодействие с фононами, то необходимо использовать вначале «континуальную» формулировку задачи. При этом в области барьера появляется собственно-энергетическая часть $\Sigma_{ph}(z, z')$, при вычислении которой надо знать электронные функции Грина при $0 < z, z' < a$:

$$\Sigma(z, z', \omega) = ig^2 \int D(\Omega) G(z, z, p, \omega - \Omega) \times \frac{dp}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{2\pi} \delta(z - z'). \quad (35)$$

Эта собственно-энергетическая часть локальна в пространстве, так как для оптических фононов со слабой дисперсией функция Грина $D(r, r', \omega)$ в координатном представлении практически пропорциональна $\delta(r - r')$:

$$D(r, r', \Omega) = \sum_k D(k, \Omega) e^{ik(r-r')} \approx D(\Omega) \sum_k e^{ik(r-r')} = D(\Omega) \delta(r - r'). \quad (36)$$

При этом поправка первого порядка по g^2 к запаздывающей функции G^R будет даваться выражением

$$G^{(1)R}(z, z', p, \omega) = \int_0^a G^R(z, z_1, p, \omega) \times \Sigma^R(z_1, z_1, p, \omega) G^R(z_1, z', p, \omega) dz_1. \quad (37)$$

Здесь неприводимая часть определяется общими выражениями неравновесной техники,

$$\Sigma^R(z, z, \omega) = ig^2 \int [D^R(\Omega) G^<(z, z, p, \omega - \Omega) + D^<(\Omega) G^A(z, z, p, \omega - \Omega)] \frac{dp}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{2\pi}, \quad (38)$$

где

$$D^R(\Omega) = \frac{2\omega_0}{(\Omega + i\delta)^2 - \omega_0^2} D^<(\Omega) = N_B(\Omega) [D^R(\Omega) - D^A(\Omega)] = -2\pi N_B(\Omega) [\delta(\Omega - \omega_0) - \delta(\Omega + \omega_0)] \quad (39)$$

— фоновые функции Грина–Келдыша. Поправку вида (37) при z и z' , расположенных по разные стороны барьера, можно, в принципе, записать с помощью эффективного туннельного матричного элемента, аналогично формуле (40):

$$G(z, z') = G_0(z, 0, p, \omega) T_{eff}(p, \omega) G_1(a, z', p, \omega). \quad (40)$$

Однако величина T_{eff} уже сама содержит фоновые функции Грина, поэтому это выражение нельзя перевести на язык туннельного гамильтониана, содержащего дополнительный член, описывающий переходы из одного берега контакта в другой с одновременным испусканием или поглощением фононов (phonon assisted tunneling), вида

$$H_{el-phon} = \sum_{k,p} g T c_p^\dagger c_k (b + b^\dagger), \quad (41)$$

где операторы c_p, c_k соответствуют электронным состояниям по разные стороны барьера.

При вычислении дополнительных вкладов в туннельный ток, связанных с электрон-фононным взаимодействием, необходимо в этом случае найти поправку к функции $G^<(z, z')$ по формуле (16):

$$G^<(z, z', p, \omega) = G^{(1)R}[\Sigma_0^< + \Sigma_1^<] G^{0A} + G^{(0)R}[\Sigma_0^< + \Sigma_1^<] G^{(1)A} + G^{(0)R} \Sigma_{phon}^< G^{0A}, \quad (42)$$

где $\Sigma_0^<$ и $\Sigma_1^<$ отвечают переходам в термостат (15) соответственно в левом и правом берегах контакта, $G^{(1)R,A}$ — поправки к запаздывающей и опережающей функциям Грина из-за электрон-фононного взаимодействия (37), а $\Sigma_{phon}^<$ появляется из-за взаимодействия с фононами в области барьера:

$$\Sigma_{phon}^<(z, z, \omega) = ig^2 \int \frac{dp}{(2\pi)^2} \frac{d\Omega}{2\pi} D^<(\Omega) \times \int_0^a dz G^<(z, z, p, \omega - \Omega). \quad (43)$$

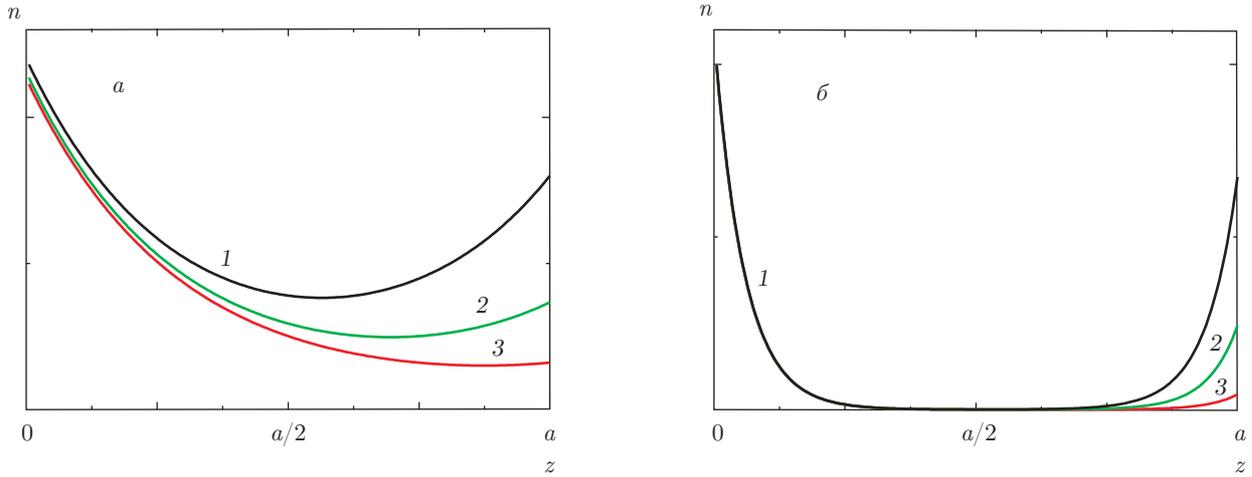


Рис. 4. Зависимости распределения концентрации электронов в барьере для разных напряжений U на контакте. Высота барьера $V = 2E_F$, $V_1 = E_F/4$. $U = 0$ (1), $E_F/4$ (2), $E_F/2$ (3). a — малая толщина барьера $a = 2a_0$, b — большая толщина барьера $a = 10a_0$ ($a_0 = 1/\sqrt{2mV}$)

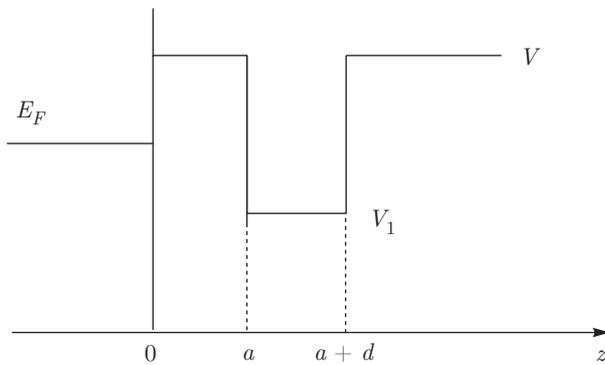


Рис. 5. Квантовая яма, отделенная барьером от объемных состояний

Как показано в работах [7] для туннелирования через атомные цепочки в модели сильной связи и [8] для туннелирования через одиночные молекулы в подходе туннельного гамильтониана, для получения симметричного относительно обоих берегов контакта выражения, описывающего неупругий вклад в ток, необходимо суммировать соответствующие вклады от всех слагаемых в выражении (42) (часть тока с испусканием фононов есть не только в члене (43)).

Необходимая для вычисления вкладов от электрон-фононного взаимодействия функция Грина $G^<(z, z)$ в области барьера представляет некоторый интерес и сама по себе, так как описывает распределение неравновесной электронной плотности в барьере. Этой информации в принципе нет в методе туннельного гамильтониана. Точное выражение для

функции Грина $G^<(z, z)$, определяемое по общей формуле (16), имеет вид

$$G^<(z, z, p, \omega) = i \frac{2m}{|D|^2} \left[|e^{q(z-a)}(q + i\kappa_1) + e^{-q(z-a)}(q - i\kappa_1)|^2 (\kappa_0 + \kappa_0^*) n_0(\omega) + |e^{qz}(q - i\kappa_0) + e^{-qz}(q + i\kappa_0)|^2 (\kappa_1 + \kappa_1^*) n_1(\omega) \right], \quad (44)$$

где D определяется выражением (19), n_0 и n_1 — фермиевские функции распределения соответственно для левой и правой частей контакта.

В случае достаточной прозрачности неравновесное распределение концентрации электронов в барьере существенно определяется обеими функциями распределения. На рис. 4а показано, как меняется распределение концентрации в барьере при изменении напряжения (приложенное напряжение опускает уровень Ферми правого берега) в случае, когда высота барьера $V = 2E_F$ и толщина барьера $a = 2a_0$, где $a_0 = 1/\sqrt{2mV}$.

В случае слабого туннелирования, когда $e^{-qa} \ll 1$ для всех энергий между E_F и $E_F - eU$, выражение для неравновесной концентрации электронов в барьере становится тривиальным, если сравнить это выражение с функциями Грина отдельно левого и правого берегов (30):

$$G^<(z, z, p, \omega) = 2im \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2} e^{-2qz} n_0(\omega) + 2im \frac{\kappa_1 + \kappa_1^*}{|q - i\kappa_1|^2} e^{-2q(a-z)} n_1(\omega) = G^<(0, 0, p, \omega) e^{-2qz} + G^<(a, a, p, \omega) e^{-2q(a-z)}. \quad (45)$$

Видно, что в случае слабой туннельной прозрачности концентрация электронов в барьере всегда соответствует у каждого края равновесной концентрации берега, экспоненциально убывающей вглубь барьера (рис. 4б).

3. ТУННЕЛИРОВАНИЕ В КВАНТОВУЮ ЯМУ

Методом туннельного гамильтониана рассматривается большое число задач, связанных с туннелированием через промежуточную систему, имеющую дискретные электронные уровни. В качестве такой системы могут выступать квантовые ямы и квантовые точки с сильным размерным квантованием в них. В методе туннельного гамильтониана используются такие величины, как туннельные матричные элементы перехода на дискретные уровни. Как для таких систем устанавливается соответствие между двумя подходами, можно показать на простейшей

системе, состоящей из квантовой ямы, отделенной барьером от объемных состояний. Такая структура показана на рис. 5.

Для каждой из областей с разными потенциалами введем обозначения, аналогичные (6):

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= \sqrt{\omega - p^2/2m + i\gamma} \\ &\text{— слева от барьера, } z < 0, \\ q &= \sqrt{p^2/2m + V - \omega + i\delta} \\ &\text{— внутри барьера, } 0 < z < a, \\ \kappa_1 &= \sqrt{\omega - p^2/2m - V_1 + i\delta} \\ &\text{— в квантовой яме, } a < z < a + d. \end{aligned} \tag{46}$$

Поскольку нас интересует область энергий, соответствующая подбарьерному прохождению электрона ($\varepsilon_k < V$), в области барьера опять введено обозначение q , отвечающее экспоненциально затухающим или растущим решениям. Точная функция Грина $G^R(z, z', p, \omega)$ для такой структуры при $z' < 0$, $a < z < a + d$ имеет вид

$$\begin{aligned} G^R(z, z', p, \omega) &= \frac{-2qm}{D} \frac{e^{-i\kappa_0 z'}}{i\kappa_1} \times \\ &\times \frac{(q + i\kappa_1)e^{-i\kappa_1(z-a-d)} - (q - i\kappa_1)e^{i\kappa_1(z-a-d)}}{\frac{1}{2i\kappa_1} ((q + i\kappa_1)e^{i\kappa_1 d} - (q - i\kappa_1)e^{-i\kappa_1 d}) + (q + i\kappa_1)e^{i\kappa_1 d} \frac{(q + i\kappa_0)e^{-qa} + (q - i\kappa_0)e^{qa}}{D}} \end{aligned} \tag{47}$$

(выражение для D см. (19)).

Опять пренебрегая членами, пропорциональными e^{-qa} , по сравнению с членами, пропорциональными e^{qa} , можем записать эту функцию в виде

$$G^R(z, z', p, \omega) = G_Q^R(z, a, p, \omega) T^R(p, \omega) \times G_0^R(0, z', p, \omega), \tag{48}$$

где G_0^R — «нулевая» функция Грина левого берега, G_Q^R — «нулевая» функция Грина изолированной квантовой ямы:

$$\begin{aligned} G_0^R(0, z', p, \omega) &= 2m \frac{e^{-i\kappa_0 z'}}{i\kappa_0 - q}, \quad G_Q^R(z, a, p, \omega) = \\ &= 2m \frac{(q + i\kappa_1)e^{-i\kappa_1(z-a-d)} - (q - i\kappa_1)e^{i\kappa_1(z-a-d)}}{(q - i\kappa_1)^2 e^{-i\kappa_1 d} - (q + i\kappa_1)^2 e^{i\kappa_1 d}}, \end{aligned} \tag{49}$$

матричный элемент туннелирования тот же, что и для одного барьера (получается, что это характеристика барьера, а не всей системы в целом, как и должно быть):

$$T^R(p, \omega) = \frac{-qe^{-qa}}{m}.$$

Описание на языке туннельных матричных элементов $T^R(p, \omega)$ в этом приближении дает правильный ответ и для точной функции $G^<$. Так, правильную функцию $G^<$, когда оба аргумента z, z' лежат в квантовой яме, можно получить из стандартной формулы $G^< = G^R \Sigma^< G^A$, которая имеет для этого случая вид

$$G_Q^<(z, z', p, \omega) = G_Q^R(z, a, p, \omega) \Sigma^<(p, \omega) \times G_Q^A(a, z', p, \omega), \tag{50}$$

а неприводимая часть Σ появляется из-за туннельной связи между квантовой ямой и левым берегом:

$$\Sigma^<(p, \omega) = T^R(p, \omega) G_0^<(0, 0, p, \omega) T^A(p, \omega), \tag{51}$$

$G_0^<(0, 0, p, \omega)$ — значение функции левого берега (30), взятой при аргументах на границах барьера: $z = 0, z' = 0$. Явный вид функции (50) следующий:

$$\begin{aligned}
 G_Q^<(z, z', p, \omega) &= G_Q^R(z, a, p, \omega) G_Q^A(a, z', p, \omega) \times \\
 &\times |T^R(p, \omega)|^2 G_0^<(0, 0, p, \omega) = \\
 &= \frac{1}{|D_Q|^2} \left[(q + i\kappa_1) e^{-i\kappa_1(z-a-d)} - (q - i\kappa_1) e^{i\kappa_1(z-a-d)} \right] \times \\
 &\times \left[(q - i\kappa_1) e^{i\kappa_1(z'-a-d)} - (q + i\kappa_1) e^{-i\kappa_1(z'-a-d)} \right] \times \\
 &\times \frac{(4q)^2}{q^2 + \kappa_0^2} e^{-2qa} \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{2} n_0(\omega), \quad (52)
 \end{aligned}$$

где

$$D_Q = (q - i\kappa_1)^2 e^{-i\kappa_1 d} - (q + i\kappa_1)^2 e^{i\kappa_1 d}.$$

Именно это выражение получится при точном решении задачи для структуры с квантовой ямой (с точностью до членов e^{-2qa}).

В случае малой прозрачности барьера переход на язык туннельного гамильтониана здесь выглядит так же, как и для полубесконечного правого берега: исходные «нулевые» функции Грина — это тоже функции свободного пространства или изолированной квантовой ямы, а туннельный матричный элемент зависит от частоты и продольного импульса и символически может быть записан как $\delta(z_1)T(p, \omega)\delta(z_2 - a)$. Это означает, что пространственные аргументы функций Грина, связанных туннельным матричным элементом, должны быть взяты на краю барьера (каждая — на своем).

Описание системы с квантовой ямой еще более упростится, если свести задачу к «нуль-мерной», вводя туннельные матричные элементы, описывающие переходы из определенных состояний берегов в состояния определенной подзоны размерного квантования в яме. Энергии зон размерного квантования даются полюсами функции $G_Q^R(z, z', p, \omega)$, описывающей электроны в изолированной яме. Эти полюсы, т. е. энергии уровней размерного квантования, даются уравнением (см. (49))

$$D_Q \equiv (q - i\kappa_1)^2 e^{-i\kappa_1 d} - (q + i\kappa_1)^2 e^{i\kappa_1 d} = 0. \quad (53)$$

Отсюда имеем

$$e^{i\kappa_1 d} = \pm \frac{q - i\kappa_1}{q + i\kappa_1}, \quad (54)$$

или

$$\operatorname{arctg} \frac{2q\kappa_1}{q^2 - \kappa_1^2} = n\pi - \kappa_1 d. \quad (55)$$

Вблизи полюсов (54) функция Грина для квантовой ямы (49) имеет вид

$$G_Q^n(z, z', p, \omega) \approx \frac{2 \psi_p^n(z) \psi_p^n(z')}{d \omega - \varepsilon_n(p)}. \quad (56)$$

Здесь $\varepsilon_n(p)$ — спектр n -й подзоны, $\psi_p^n(z)$ — волновые функции размерного квантования:

$$\psi_p^n(z) = \frac{\kappa_1^n \cos \kappa_1^n(z - a) + q^n \sin \kappa_1^n(z - a)}{\sqrt{(q^n)^2 + (\kappa_1^n)^2}}, \quad (57)$$

где

$$\kappa_1^n = \kappa_1(\omega = \varepsilon_n(p)), \quad q^n = q(\omega = \varepsilon_n(p)).$$

Вблизи полюсов можно перейти на язык функций Грина подзон размерного квантования:

$$G_n^R(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_n(p) + i\delta}, \quad (58)$$

и эффективных туннельных констант:

$$\begin{aligned}
 \tilde{T}_n(p) &= T^R(p, \omega = \varepsilon_n(p)) \sqrt{\frac{2}{d}} \psi_p^n(a) = \\
 &= T^R(p, \omega = \varepsilon_n(p)) \sqrt{\frac{2}{d}} \frac{\kappa_1^n}{\sqrt{(q^n)^2 + (\kappa_1^n)^2}}, \quad (59)
 \end{aligned}$$

связывающих состояния n -й подзоны с импульсом p с состояниями левого берега за барьером.

Анализ точной функции Грина $G^R(z, z')$ (47) для всей системы показывает, что вблизи энергий уровней размерного квантования (54) уширение уровней за счет туннельных эффектов также точно описывается на языке туннельного гамильтониана с туннельным матричным элементом (26). Это означает, что вблизи полюса размерного квантования в знаменателе точной функции Грина $G^R(z, z')$ появляется мнимая добавка, в точности равная

$$\Sigma^R(p, \omega) = T^R(p, \omega) G_0^R(0, 0, p, \omega) T^{R*}(p, \omega). \quad (60)$$

Или, если перейти к функциям (58),

$$G_n^R(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_n(p) + \Sigma_n^R(p)} \quad (61)$$

и уширение и сдвиг данного уровня ε_n точно, как и в методе туннельного гамильтониана, определяется туннельным матричным элементом (59):

$$\Sigma_n^R(p) = |\tilde{T}_n(p)|^2 G_0^R(0, 0, p, \omega = \varepsilon_n(p)). \quad (62)$$

Для случая двухбарьерной структуры, т. е. когда квантовая яма расположена между двумя берегами

контакта, можно ввести аналогичные эффективные туннельные константы для связи с состояниями правого берега. Положение дна зоны проводимости правого берега (V_2) может не совпадать с положением дна зоны проводимости левого (у нас дно зоны проводимости левого берега служило началом отсчета энергии: $V_0 = 0$), поэтому во всех формулах, описывающих связь квантовой ямы с правым берегом, величина $\kappa_0 = \sqrt{\omega - p^2/2m + i\gamma}$ должна заменяться на величину $\kappa_2 = \sqrt{\omega - p^2/2m - V_2 + i\gamma}$.

Таким образом, переход от описания многобарьерных структур на языке уравнений эффективной массы (37) к подходу туннельного гамильтониана состоит в следующем.

1. Исходными элементами диаграммной техники являются функции Грина:

$$G_{n0}^R(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_n(p) + i\delta} \quad \text{— для } n\text{-й}$$

размерной подзоны квантовой ямы,

$$G_0^R(0, 0, p, \omega) = \frac{1}{i\kappa_0 - q} 2m, \quad G_0^<(0, 0, p, \omega) =$$

$$= in_0(\omega) \frac{\kappa_0 + \kappa_0^*}{|q - i\kappa_0|^2} 2m \quad \text{— для левого берега,} \quad (63)$$

$$G_2^R(l, l, p, \omega) = \frac{1}{i\kappa_2 - q} 2m,$$

$$G_2^<(l, l, p, \omega) = in_2(\omega) \frac{\kappa_2 + \kappa_2^*}{|q - i\kappa_2|^2} 2m$$

— для правого берега.

Здесь l — суммарная толщина структуры, т. е., толщина квантовой ямы и двух барьеров вокруг нее.

2. Туннельное взаимодействие описывается эффективными константами $\tilde{T}_n^0(p)$ и $\tilde{T}_n^2(p)$, определяемыми формулами соответственно (59), (26), для связи с левым и правым берегами и аналогичными выражениями для связи двух соседних квантовых ям, если структура трехбарьерная и больше.

Дальше диаграммной техникой для туннельного гамильтониана определяются ток, неравновесные числа заполнения состояний размерных подзон и т. д.

Заметим, что в случае с двухбарьерной структурой (с квантовой ямой посередине между двумя берегами) протекание тока обеспечивается в данном

описании тем, что берега слева и справа связаны с термостатом (есть малая, но ненулевая константа γ), появляется собственно-энергетическая часть $\Sigma^<$, которая и описывает приход электронов из одного термостата и уход их в другой.

В совершенно реальном случае, когда квантовая яма связана только с одним берегом, если в эксперименте ток протекает из «объемного» берега в двумерную яму, к которой сделаны контакты, описание тока в представленном формализме содержит следующую сложность. Если не вводить взаимодействие с термостатом для ямы так, чтобы обеспечивался равномерный по площади отток электронов из ямы, то придется описывать ток вдоль ямы, чтобы электроны куда-то уходили на края двумерного слоя к контактам. Это сразу делает задачу по крайней мере двумерной, а не одномерной, и ток вдоль слоя должен возрастать к краям при равномерном вдоль плоскости притоке электронов через туннельный барьер, чтобы был выполнен закон сохранения заряда. Эти эффекты неоднородности могут быть существенны в каких-то реальных структурах, однако в теории проще ввести однородное вдоль слоя взаимодействие электронов в квантовой яме с термостатом, что будет обеспечивать уход электронов из ямы как бы равномерно по всей площади. Однако это взаимодействие даст дополнительное уширение уровней размерного квантования γ_1 . Вводимые таким искусственным путем величины γ_1 не будут влиять на физические результаты, если удовлетворяются неравенства

$$1 \gg \frac{d^2 m \gamma_1}{\hbar^2} \gg (dq e^{-qa})^2.$$

Отсюда следует выполнение двух условий: 1) сохраняется хорошее размерное квантование — уровни уширены слабо; 2) скорость «оттока» электронов, обеспечиваемых термостатом, гораздо выше, чем скорость туннелирования через барьер — это показывает, что вся кинетика определяется именно процессами туннелирования через барьер (это самое «узкое» место в системе).

Если в квантовой яме необходимо учесть взаимодействие с оптическими фононами, которое может приводить к переходу электронов между разными подзонами, то такое взаимодействие схематически добавляется следующим образом. Взаимодействие с фононами в диаграммной технике определяется собственно-энергетической частью вида (35).

Во все уравнения диаграммной техники такая неприводимая часть входит в виде интегралов, в которых стоит функция Грина в квантовой яме G_Q :

$$\int G_Q(z, z_1) \Sigma_{phon}(z_1, z_2) G_Q(z_2, z') dz_1 dz_2 = \int_a^{a+d} G_Q(z, z_1) \Sigma(z_1, z_1) G_Q(z_1, z') dz_1. \quad (64)$$

Вблизи полюсов размерного квантования зависимость от z, z' в функциях $G_Q(z, z')$ факторизуется, как видно из представления (56). Поэтому можно ввести эффективный гамильтониан, описывающий электрон-фононное взаимодействие в терминах переходов электронов с одного уровня размерного квантования на другой с одновременным испусканием или поглощением фона:

$$H_{el-phon} = \sum_{n,m} g_{nm} c_n^\dagger c_m (b + b^\dagger). \quad (65)$$

Здесь операторы c_n, c_m соответствуют размерно квантованным электронным состояниям в яме, b — фононные операторы и появляется эффективная константа электрон-фононного взаимодействия:

$$g_{nm}^2 = g^2 \int_a^{a+d} \psi_n^2(z_1) \psi_m^2(z_1) dz_1, \quad (66)$$

где $\psi_n(z)$ определяются формулой (57). Гамильтонианы вида (65) часто используются для описания электрон-фононного взаимодействия в наноструктурах [8–12].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, для планарных туннельных структур, в принципе, можно использовать «континуальный» вариант неравновесной диаграммной техники, позволяющий получить более точные выражения, чем в методе туннельного гамильтониана. Особенно важно это в тех случаях, когда туннельная прозрачность барьера достаточно велика или когда существенными становятся электрон-фононное или электрон-электронное взаимодействия в области барьера. Такие эффекты с помощью метода туннельного гамильтониана не могут быть рассмотрены в принципе. В случае слабой прозрачности туннельного барьера может быть установлено четкое соответствие между выражениями,

полученными в «континуальном» варианте НДТ и в рамках метода туннельного гамильтониана. В этом пределе описание на языке туннельного гамильтониана, безусловно, сильно упрощает теорию.

Для случая многобарьерной туннельной структуры (ряд квантовых ям, разделенных потенциальными барьерами) переход на язык туннельного гамильтониана является почти точным вблизи энергий размерных подзон. При таком переходе мы пренебрегаем эффектами, связанными с влиянием туннелирования из квантовой ямы в левый берег на туннельные процессы между квантовой ямой и правым берегом и наоборот. Мы говорим о пренебрежении членами порядка $e^{-qa}e^{-2qb}$ по сравнению с членами порядка e^{-qa} или членами порядка $e^{-qb}e^{-2qa}$ по сравнению с членами порядка e^{-qb} (где a и b — ширины барьеров по разные стороны квантовой ямы). Для энергий, далеких от размерных уровней в яме, соответствие точных выражений в подходе эффективной массы с полученными таким переходом к туннельному гамильтониану не очень хорошее. Но в этих областях плотность состояний в яме мала, поэтому мал и вклад этих областей во все физические эффекты.

В данной статье все формулы приведены для простых систем с барьерами прямоугольной формы, при этом изменение потенциала лишь поднимает или опускает уровень Ферми в берегах контакта или в яме. Нетрудно модифицировать формулы и с учетом «перекося» потенциальных барьеров приложенным напряжением. В этом случае найденные эффективные туннельные константы будут зависеть от приложенного напряжения, что скажется на вольт-амперных характеристиках.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **4**, 916 (1971).
2. Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).
3. А. Н. Старостин, М. А. Чесноков, *ЖЭТФ* **124**, 1367 (2003).
4. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **4**, 2598 (1971).

5. A. Wacker and A.-P. Jauho, Phys. Rev. Lett. **80**, 369 (1998).
6. M. A. Davidovich, E. V. Anda, C. Tejedor, and G. Platero, Phys. Rev. B **47**, 4475 (1992).
7. C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, and D. Saint-James, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **5**, 21 (1972).
8. П. И. Арсеев, Н. С. Маслова, УФН **180**, 1197 (2010).
9. A. Wacker, A.-P. Jauho, S. Rott et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 836 (1999).
10. J. K. Viljas, J. C. Cuevas, F. Pauly, and M. Hafner, Phys. Rev. B **72**, 245415 (2005).
11. L. de la Vega, A. Martin-Rodero, N. Agrait, and A. Levy Yeyati, Phys. Rev. B **73**, 075428 (2006).
12. H. Ueba, T. Mii, and S. G. Tikhodeev, Surf. Sci. **601**, 5220 (2007).