



**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«Московский государственный технический университет**  
**имени Н.Э. Баумана**  
**(национальный исследовательский университет)»**  
**(МГТУ им. Н.Э. Баумана)**

---

Факультет «Радиоэлектроника и лазерная техника»  
Кафедра «Технологии приборостроения»

**Проект на тему**  
**«Уравнение Шредингера для пространственной неоднородной**  
**эффективной массы. Одноэлектронное приближение.**  
**Граничный метод квантовой передачи QТВМ.»**  
**по курсу**  
**«Компьютерное моделирование наноприборов»**

Выполнили:  
Титенко А.А.  
Шарафутдинов Э.М.  
Группа: РЛ6-71Б  
Проверила: Ветрова Н.А.

Москва, 2023

## Содержание

Глава 1 Эффективная масса .....	3
1.1 Зоны Бриллюэна.....	8
1.2 Гамильтониан в приближении эффективной массы. ....	9
1.2.1 Случай постоянной эффективной массы .....	9
1.2.2 Случай непостоянной эффективной массы .....	12
1.3 Уравнение Шредингера для пространственной неоднородной эффективной массы. ....	17
Глава 2 Одноэлектронное приближение (метод Хартри-Фока).....	18
2.1 Метод Хартри.....	18
2.2 Определитель Слэтера.....	19
2.3 Метод Хартри-Фока.....	20
2.4 Метод Хартри-Фока-Рутана .....	25
Глава 3 Граничный метод квантовой передачи QTBM.....	27
3.1 Расчет тока в полупроводниковых компонентах .....	27
3.2 Допущения метода QTBM .....	31
3.3 Описание метода QTBM .....	32
Список литературы .....	36

## Глава 1 Эффективная масса

В отличие от свободного электрона, электрон в кристалле непрерывно испытывает влияние потенциального поля решетки, что неизбежно должно приводить к определенным различиям в движении электрона в кристалле по сравнению с его движением в свободном пространстве. Рассмотрим подробнее, в чем проявляются эти различия.

Скорость электрона в кристалле зависит от закона дисперсии  $E(\vec{k})$ . Воспользуемся кинетическим уравнением для средней скорости электрона [1, с.61]

$$\vec{v}_{\text{гр}} = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \vec{v}(\vec{k}) \quad (1)$$

и динамическим уравнением движения

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{F} \quad (2)$$

для нахождения ускорения электрона в кристалле, находящегося во внешнем электрическом поле [1, с.62]

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\vec{k}} \right\} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{d\vec{k}} \left\{ \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\vec{k}} \right\} \frac{\hbar d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} \vec{F}, \quad (3)$$

где  $\vec{F} = -e\vec{E}$  - сила, с которой электрическое поле действует на электрон.

Сравнивая (3) с обычным уравнением Ньютона, можем заметить, что величина

$$m^* = \hbar^2 / \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} = 1 / \frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} \quad (4)$$

имеет смысл массы электрона.

Эта масса электрона, в отличие от массы свободного электрона, обозначается  $m^*$  и называется *эффективной массой электрона*. Следовательно, эффективная масса электрона отражает влияние периодического поля решетки на движение электрона в кристалле под действием *внешней силы*  $\vec{F}_{\text{внеш}}$ .

Эффективная масса, проявляющаяся при действии внешней силы, позволяет сохранить вид законов сохранения и, в частности, второй закон Ньютона  $\vec{a} = \vec{F}/m^*$ . Закон дисперсии, по аналогии с этим законом для свободного электрона, запишется в виде

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (5)$$

Таким образом, приписывая электрону массу  $m^*$ , можем считать этот электрон в кристалле свободным и описывать его движение во внешнем поле как движение свободного электрона.

Величина  $\frac{d^2 E}{d\vec{P}^2}$  является тензором второго ранга и определяет тензор обратной эффективной массы

$$m_{ij}^{*-1} = \frac{\partial^2 E}{\partial P_i \partial P_j} \text{ или } m_{ij}^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (6)$$

Этот тензор является наиболее близким аналогом динамической массы электрона. Поскольку  $m_{ij}^*$  - тензорная величина, в общем случае вектор ускорения не совпадает с вектором силы  $\vec{F}$ . В некоторых твердых телах с достаточно сложной структурой недиагональные компоненты этого тензора велики и электрическое поле, приложенное в одном направлении, вызывает ускорение в другом направлении. Для идеально простого и изотропного твердого тела все недиагональные элементы тензора  $m_{ij}^* (i \neq j)$  обращаются в нуль, а три диагональных элемента  $m_{ij}^* (i = j)$  одинаковы. В таком идеальном твердом теле электрон имеет скалярную эффективную массу  $m^*$ , совпадающую с массой свободного электрона  $m_0$ .

Эффективная масса в отличие от обычной массы  $m_0$  не отражает ни инерционных, ни гравитационных свойств частицы. Она является лишь коэффициентом в уравнении движения и отражает меру взаимодействия электрона с кристаллической решеткой. Эффективная масса электрона может

быть как больше, так и меньше массы свободного электрона  $m_0$ . Более того,  $m^*$  может быть величиной отрицательной.

Физический смысл эффективной массы можно понять, если рассмотреть процесс ускорения электрона во внешнем поле при различных значениях квазиимпульса  $\vec{P}$ . Обратимся к движению электрона в кристалле в электрическом поле. Пусть до включения поля электрон находится в зоне Бриллюэна в состоянии  $\vec{P} = 0$ , имеет скорость  $\vec{v} = \frac{\partial E}{\partial \vec{P}} = 0$ .

В начале движения, когда квазиимпульс электрона мал, происходит обычное ускорение электрона, при котором его скорость  $\vec{v}$  увеличивается в направлении внешней силы  $\vec{F}_{\text{внеш}}$ . Квазиимпульс  $\vec{P}$  увеличивается, уменьшается длина волны и электрон в импульсном пространстве движется к границе зоны Бриллюэна. При этом скорость электрона нарастает не так быстро, как для свободного электрона, так как часть ускоряющей внешней силы идет на преодоление реакции решетки. Это означает, что по мере увеличения импульса эффективная масса электрона становится больше массы свободного электрона.

Рост скорости постепенно замедляется и при значении квазиимпульса  $\vec{P}'$  (рис.1) скорость достигает максимального значения. Эффективная масса электрона в этой точке обращается в бесконечность. Фактически в этот момент сумма внешних и внутренних сил в уравнении движения электрона

$$m_0 \frac{d\vec{v}}{dt} = \sum \vec{F}_{\text{внеш}} + \sum \vec{F}_{\text{внут}} = 0 \quad (7)$$

После этого реакция решетки становится больше внешней силы, что соответствует эффективному возрастанию отраженной от решетки компоненты электронной волны.

Теперь сумма сил в уравнении (7) имеет обратный знак. В этой области электрон продолжает двигаться по инерции в прежнем направлении и тормозится во внешнем поле (из-за возрастающей реакции решетки).

После остановки электрон ускоряется в обратном направлении под действием сил реакции решетки, превышающих внешнюю силу (при значениях квазиимпульса  $-\frac{\pi\hbar}{a} < P_x < 0$ ). Точка  $A$  на рис. 1 эквивалентна точке  $A'$ , так как точки с импульсами  $+\frac{\pi\hbar}{a}$  и  $-\frac{\pi\hbar}{a}$  физически эквивалентны. Таким образом, каждый раз, когда квазиимпульс достигает значения  $P_x = \frac{\pi\hbar}{a}$  на границе зоны Бриллюэна, он "скачком" меняется на обратный: электрон зеркально отражается от границы зоны Бриллюэна.

Движение изображающей точки в фазовом пространстве продолжается теперь из точки  $A'$  в прежнем направлении. При  $P_x = -P'$  силы сравниваются, скорость достигает максимального значения. При  $-P'_x \ll 0$  электрон замедляется под действием внешней силы  $-|e|\vec{E}$ , так что его скорость обращается в нуль в центре зоны Бриллюэна. Это вторая точка остановки электрона в реальном пространстве.

Таким образом, под действием постоянного электрического поля  $\vec{E}$  электрон в кристаллической решетке совершает периодическое движение в  $\vec{P}$ -пространстве, каждый раз проходя зону Бриллюэна в одном и том же направлении, которое совпадает с направлением действующей на него силы  $-|e|\vec{E}$ .

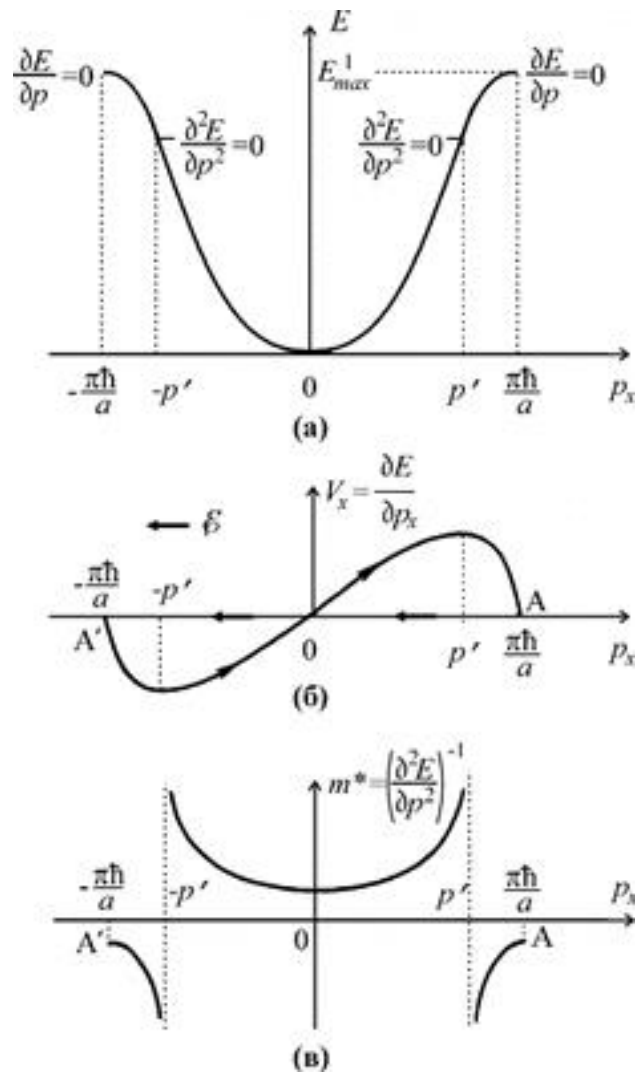


Рис. 1. Зависимость энергии (а), скорости (б) и эффективной массы (в) электрона от квазиимпульса. [1, с.64]

## 1.1 Зоны Бриллюэна

Условие трансляционной симметрии волновой функции  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  не нарушится, если волновой вектор  $\vec{k}$  заменить на вектор  $\vec{k} + 2\pi\vec{G}$ , где  $\vec{G} = h\vec{a} * +k\vec{b} * +l\vec{c} *$  - вектор трансляции обратной решетки. [1, с.47-49]

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}}\psi(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}+2\pi\vec{G})\vec{R}}\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}}\psi(\vec{r}), \quad (8)$$

так как скалярное произведение векторов прямой и обратной решеток  $(\vec{G}\vec{R}) = m$ , т.е.  $e^{i2\pi(\vec{G}\vec{R})} = 1$  для целых  $m$  и всех векторов  $\vec{R}$  решетки Бравэ.

Полученный результат означает, что к любому вектору  $\vec{k}$ , характеризующему состояние электрона в среде с периодическим потенциалом, всегда можно добавить любой вектор  $\vec{G}$  обратной решетки, причем это изменение не приводит к изменению состояния электрона. Следовательно, энергия электронов, находящихся в этих двух состояниях, одинакова. Другими словами, энергия электрона в кристалле является периодической функцией волнового вектора с периодом  $2\pi\vec{G}$  (или  $\vec{G}$ )

$$E(\vec{k} + 2\pi\vec{G}) = E(\vec{k}). \quad (9)$$

Если в  $\vec{k}$ -пространстве построить обратную решетку, то все  $\vec{k}$ -пространство можно разделить на области, в которых имеются физически эквивалентные состояния. Такие области называются *зонами Бриллюэна*. Тогда изменение волновой функции и энергии электрона можно рассматривать не во всем  $\vec{k}$ -пространстве, а лишь в пределах *первой зоны Бриллюэна*, объем которой ограничен пределами изменения волнового вектора

$$-\pi\vec{G}_i \leq \vec{k}_i \leq \pi\vec{G}_i. \quad (10)$$

Поскольку вектора  $\vec{k}$  определены с точностью до  $\vec{G}$ , возникает вопрос о выборе начального вектора  $\vec{k}$ . Обычно за такой вектор принимают тот из них, который ближе других расположен к началу координат  $\vec{k}$ -пространства. Для



простой кубической решетки области, в которых будут находиться все такие вектора, будут иметь границы

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a} \leq k_z \leq \frac{\pi}{a}. \quad (11)$$

Здесь  $\pm \frac{\pi}{a} = \pm \frac{1}{2} G_{1x}$ , (или  $\pm \frac{1}{2} G_{1y}$ ,  $\pm \frac{1}{2} G_{1z}$ ) где индекс 1 указывает на то, что за  $G_x, G_y, G_z$  принимают их наименьшие значения.

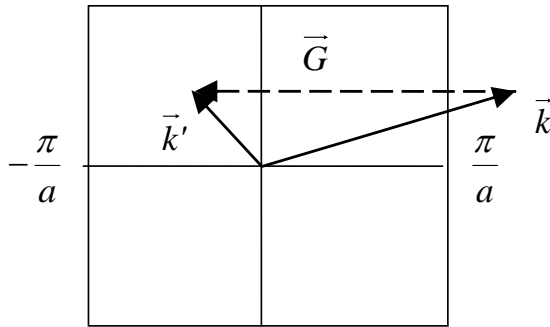


Рис. 2. Схема приведения волнового вектора  $\vec{k}$  к первой зоне Бриллюэна.

Так как вектора  $\vec{k}$  находятся с точностью до  $\vec{G}$ , то любая функция может быть переведена в первую зону Бриллюэна. Для этого из рассматриваемого вектора  $\vec{k}$  следует вычесть вектор  $\vec{G}$ , чтобы их разность  $\vec{k} - \vec{G}$  оказалась внутри или на границе первой зоны Бриллюэна (рис. 2).

## 1.2 Гамильтониан в приближении эффективной массы.

### 1.2.1 Случай постоянной эффективной массы

Уровни энергии в окрестности минимума зоны проводимости описываются простым выражением вида

$$[h(\vec{k})] = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}, \quad (12)$$

где параметры  $E_c$  и  $m_c$  можно подобрать из эксперимента,  $h(k)$  – собственные значения матрицы Гамильтониана. Нетрудно записать дифференциальное уравнение, из которого находятся собственные значения энергии, удовлетворяющие уравнению (12). Для этого в выражении  $h(\vec{k})$  необходимо заменить вектор  $\vec{k}$  на оператор  $-i \vec{\nabla}$  : [2, с.223-230]

$$\left[ E_c - \frac{\hbar^2}{2m_c} \nabla^2 \right] f(\vec{r}) = E f(\vec{r}). \quad (13)$$

Несложно проверить, что при любом  $\vec{k}$  решения в виде плоских волн  $f(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$  являются собственными функциями этого дифференциального уравнения, отвечающими собственным значениям  $E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}$ . Используя метод конечных разностей, можно перейти от уравнения (13) к гамильтоновской матрице, имеющей значительно более простую структуру, нежели исходный атомный гамильтониан. К примеру, в случае одного измерения мы могли бы записать трехдиагональную матрицу с элементом  $E_c + 2t_0$  на главной диагонали и элементом  $t_0$  на нижней и верхней ближайших диагоналях, которая может быть представлена в виде схемы, показанной на рис. 3. Гамильтоновская матрица в приближении эффективной массы может быть изображена схематически как трехмерная сеть единичных ячеек (не имеющих отношения к реальной кристаллической структуре), каждая из которых имеет энергию  $E_c + 6t_0$  и ее взаимодействие с ближайшими соседями определяется величиной матричного элемента  $-t_0$  (рис.4).

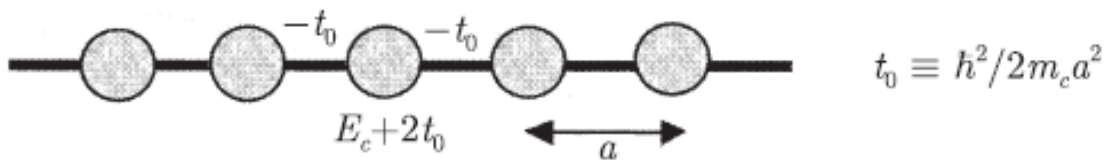


Рис. 3. Схематическое представление гамильтоновской матрицы в одномерном случае в виде одномерного массива единичных ячеек с энергией  $E_c + 2t_0$ , взаимодействующих с ближайшими соседями через матричный элемент величины  $-t_0$  [2, с.223-230]

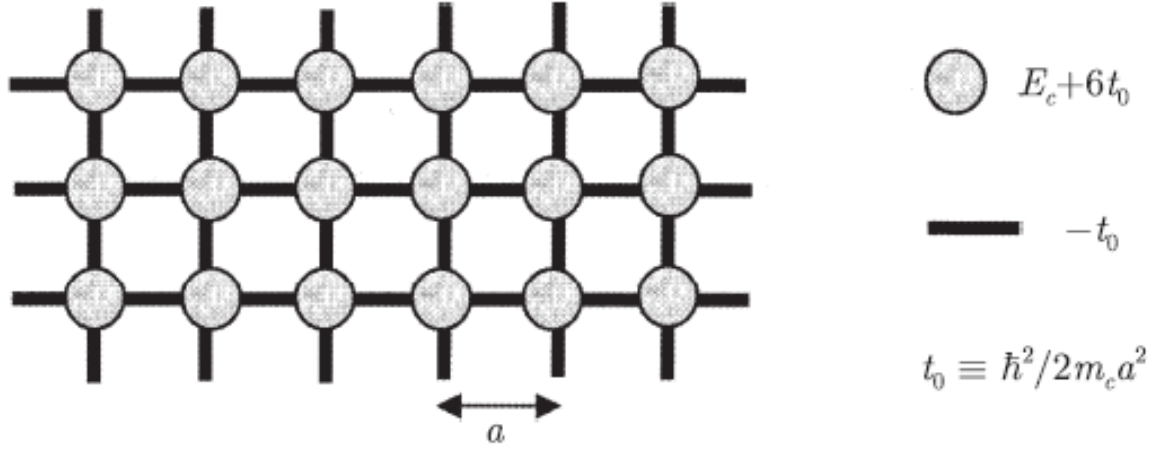


Рис. 4. Схематическое разрешение гамильтоновской матрицы в приближении эффективной массы в виде трехмерной сети единичных ячеек [2, с.223-230]

Параболический закон дисперсии будет выглядеть как:

$$[h(\vec{k})] = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_c}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (14)$$

Данный гамильтониан определяет лишь состояния с энергией вблизи дна зоны проводимости, где уравнение (12) обеспечивает адекватную аппроксимацию. Взамен, однако, мы получаем более простое математическое описание. Действительно, получающаяся гамильтоновская матрица  $[H_0]$  по своим размерам значительно меньше атомной. Во-первых, матрицы  $[H_{nm}]$ , представляющие элементарную ячейку или связи между ними, являются скалярами, а не матрицами размера  $(b \ b)$ . Во-вторых, отдельные ячейки, показанные на рис. 13, не обязаны соответствовать атомным элементарным ячейкам. Решетка может быть не обязательно гранецентрированной, а, к примеру, простой кубической, и постоянная решетки  $a$  может быть достаточно большой в зависимости от того, в каком интервале энергий мы стремимся получить точные результаты. Здесь работает простое правило: постоянная решетки  $a$  должна быть достаточно малой для того, чтобы величина  $t_0$  была бы больше, чем интересующий нас интервал энергий над  $E_c$ . Поскольку  $t_0 =$

$\frac{\hbar^2}{2m_c a^2}$ , то при фиксированном интервале энергий можно выбрать большее значение параметра  $a$ , если эффективная масса  $m_c$  является малой. Но при этом необходимо помнить, что волновая функция не описывает систему на атомном масштабе, она обладает лишь информацией на усредненном пространственном масштабе. Поэтому ее зачастую называют «огибающей функцией».

## 1.2.2 Случай непостоянной эффективной массы

### 1.2.2.1 Эффективная масса, зависящая от координаты

Полную волновую функцию можно записать как произведение периодической функции Блоха в центре зоны Бриллюэна и огибающей функции, которая, как предполагается, медленно меняется в течение одного периода. Когда  $z$  является направлением роста, свободное движение в направлении плоскости можно разделить, а волновая функция в структуре квантовой ямы определяется выражением

$$\Psi_{\nu\lambda, \mathbf{k}_{\parallel}}^{\eta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{x}_{\parallel}} \Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z) \quad (15)$$

где  $\mathbf{k}_{\parallel}$  — волновой вектор в плоскости,  $A$  — площадь поперечного сечения структуры с квантовой ямой, а  $\Phi(z)$  — электронная огибающая функция  $\nu$ -й подзоны. В предположении, что периодическая функция одинакова во всех слоях общий вид уравнения Шредингера для структуры квантовой ямы имеет вид

$$\hat{H} \Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z) = E_{\nu\lambda}^{\eta} \Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z) \quad (16)$$

Учитывая связь в точке  $z_0$  между областями двух материалов с разными периодическими потенциалами, сохранение тока гарантируется использованием следующих условий:

$$\Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z)|_{z \rightarrow z_0^-} = \Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z)|_{z \rightarrow z_0^+}, \quad \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z)}{dz} \right) |_{z \rightarrow z_0^-} = \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{d\Phi_{\nu\lambda}^{\eta}(z)}{dz} \right) |_{z \rightarrow z_0^+} \quad (17)$$

В условие согласования производной входит эффективная масса  $m^*(z)$ . Поскольку производная является оператором импульса, уравнение подразумевает требование, чтобы скорость была одинаковой с обеих сторон для сохранения тока.

Так как оператор импульса и  $m(r)$  не коммутируют, уже знакомый оператор кинетической энергии для непостоянной эффективной массы

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m(\vec{r})}\nabla^2$$

становится неэрмитовым, что приводит к несохранению плотности потока вероятности.

Экспериментально был выведен эрмитов оператор кинетической энергии для эффективной массы, зависящей от координаты

$$T = -\frac{\hbar^2}{4}(m^\alpha \vec{\nabla} m^\beta \vec{\nabla} m^\gamma + m^\gamma \vec{\nabla} m^\beta \vec{\nabla} m^\alpha), \quad (18)$$

в котором на коэффициенты накладывается ограничение

$$\alpha + \beta + \gamma = -1 \quad (19)$$

Приняв  $\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$ , мы можем соответствующий эрмитов гамильтониан записать как

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z). \quad (20)$$

Потенциал принимает вид:

$$V(z) = V_0(z) - eFz - e\varphi(z). \quad (21)$$

Здесь  $V_0$  — край зоны проводимости,  $e$  — элементарный заряд,  $F$  — внешнее электрическое поле,  $\varphi$  — электростатический потенциал.

#### **1.2.2.2 Эффективная масса, зависящая от координаты и времени**

Позиционно-зависимая эффективная масса (PDEM) была впервые рассмотрена при описании электронных свойств и зонной структуры в физике полупроводников. Позже было доказано, что эта концепция полезна и в других

областях физики. Однако из-за некоммутативности PDEM и импульса с первых дней существования PDEM стало понятно, что написать самосопряженный гамильтониан для этого типа системы непросто. Было понятно, что кинетическая часть гамильтониана будет иметь следующий вид (одномерный случай).

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}m^\alpha \left( \frac{d}{dx} \right) m^\beta \left( \frac{d}{dx} \right) m^\alpha. \quad (22)$$

При ограничении на постоянные параметры  $\alpha$  и  $\beta$

$$\beta + 2\alpha = -1. \quad (23)$$

Для системы с  $n$  степенями свободы, если  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$  обобщенный координатный вектор, тогда вся классическая динамическая информация о системе кодируется в лагранжевой функции

$$\mathcal{L}(x_1, x_2, \dots, x_n, \dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_n, t) = \frac{1}{2} \dot{X}^T M \dot{X} - V(x_1, x_2, \dots, x_n, t). \quad (24)$$

Здесь точка (.) обозначает производную по параметру времени  $t$ , а  $X^T$  означает транспонирование  $X$ . Положительно определенная матрица  $M$  называется матрицей инерции или просто матрицей масс.

Эквивалентно, можно описать системы с помощью функции энергии, называемой гамильтонианом, который представляет собой преобразование Лежандра лагранжиана следующим образом.

$$\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_n, p_1, p_2, \dots, p_n, t) = \sup_{\{\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_n\}} (\sum_i (p_i \dot{x}_i) - \mathcal{L}). \quad (25)$$

Sup – супремум (точная верхняя граница множества).

Из условия экстремизации в (25) по  $\dot{x}_i$  получаем сопряженный импульс  $p_i$ , соответствующий обобщенной координате  $x_i$ , при  $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}$ . Все классические наблюдаемые могут быть выражены как функции положения, импульса и времени. Например, в одномерном случае энергия может быть выражена функцией Гамильтона

$$H(x, p) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x). \quad (26)$$

В квантовой теории наблюдаемые представляют собой самосопряженные операторы, действующие в некотором гильбертовом пространстве (в зависимости от рассматриваемой системы). Хорошо это или плохо, но стратегия составления квантовой теории, соответствующей известной классической системе (т. е. системе, для которой известны классические наблюдаемые), предполагает создание квантовых наблюдаемых, соответствующих классическим наблюдаемым, по принципу соответствия Бора. Будучи операторами, действующими в гильбертовом пространстве, соответствующем системе, квантовые наблюдаемые не могут коммутировать друг с другом. Знание коммутационных отношений между рассматриваемыми наблюдаемыми необходимо для описания квантовой теории. Например, коммутационные соотношения для операторов положения ( $x_i$ ) и операторов импульса ( $p_i$ ) имеют вид

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{i,j}, \quad [x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0. \quad (27)$$

Здесь  $\delta_{i,j}$  — дельта Кронекера, значения которой равна 1 при равных значениях индексов и 0 в противном случае.

Очевидно, что для теории эффективной массы эффективная масса может быть функцией положения и времени. Поэтому следует проявлять осторожность с самого начала построения жизнеспособной теории эффективной массы. Хотя эффективная масса встречается только в области квантовой теории, предположим, что существует классическая модель, квантование которой является результирующей квантовой теорией эффективной массы. Пишем ли мы  $x_i$  после  $p_i$  или  $p_i$  после  $x_i$ , в классическом случае не имеет значения. В квантовой теории это серьезная проблема. В этом отношении в случае PDEM мы выступаем за изменение переопределения (25),

заменяя  $p_i \dot{x}_i$  на  $\frac{1}{2}(\dot{x}_i p_i + p_i \dot{x}_i)$  и  $\dot{x}_i$  на  $\frac{1}{m} p_i$  и  $p_i \frac{1}{2} m$  при вычислении классического уровня.

Для удобства рассмотрим одну обобщенную координату  $x$  и сопряженный ей импульс  $p$ .

Для лагранжиана  $L(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2} \dot{x} m(x, t) \dot{x} - V(x, t)$  классический гамильтониан считается равным

$$H(x, p, t) = \sup_{\{\dot{x}\}} \left[ \frac{1}{2} (\dot{x} p + p \dot{x}) - L \right] = \sup_{\{\dot{x}\}} [\mathcal{L}_{\mathcal{H}}(x, \dot{x}, p, t)]. \quad (28)$$

Супремум достигается при условии

$$\frac{\delta \mathcal{L}_{\mathcal{H}}}{\delta \dot{x}} = 0 = \left( \frac{1}{2} p + \frac{1}{2} p \right) - \left( \frac{1}{2} m \dot{x} + \frac{1}{2} \dot{x} m \right). \quad (29)$$

Теперь возьмем  $p = m \dot{x} \Rightarrow \dot{x} = \frac{1}{m} p$  в первом члене преобразования Лежандра (28), а также для крайнего левого  $\dot{x}$  лагранжиана и для других  $\dot{x}$  в (28) мы будем использовать  $p = m \dot{x} \Rightarrow \dot{x} = \frac{1}{m} p$ . Это приводит к Гамильтониану вида

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m} p p + p p \frac{1}{m} \right) - \frac{1}{2m} p m p \frac{1}{m} + V(x, t). \quad (30)$$

При квантовании можно получить квантовые наблюдаемые  $\hat{p}$  и  $\hat{x}$ , соответствующие классическим переменным  $p$  и  $x$  соответственно. В представлении  $\{|x_i\rangle\}$   $\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  (используя  $\hbar = 1$ ), а правильный гамильтониан для массы, зависящей от произвольных положения и времени,  $m(x, t)$  имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{1}{2m} \left( \frac{m'}{m} \right)^2 + V(x, t). \quad (31)$$

Здесь штрих обозначает производную по  $x$ . Гамильтониан в (31) является эрмитовым только для вещественной функции  $m(x, t)$ .



Вид гамильтониана (29) согласуется с (20) для случая  $\alpha = 0$ ,  $\beta = -1$ .

### 1.3 Уравнение Шредингера для пространственной неоднородной эффективной массы.

Используя гамильтониан из 1.2.2, мы получим следующее уравнение Шредингера:

$$\left[ E_c - \frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla} \cdot \left( \frac{1}{m_c(\vec{r})} \vec{\nabla} \right) \right] f(\vec{r}) = E f(\vec{r}). \quad (32)$$

Можно показать, что использование для решения этого уравнения метода конечных разностей на границе раздела, с эффективными массами  $m_1$  и  $m_2$ , приводит к гамильтоновской матрице, схематически представленной на рис.5 ниже.

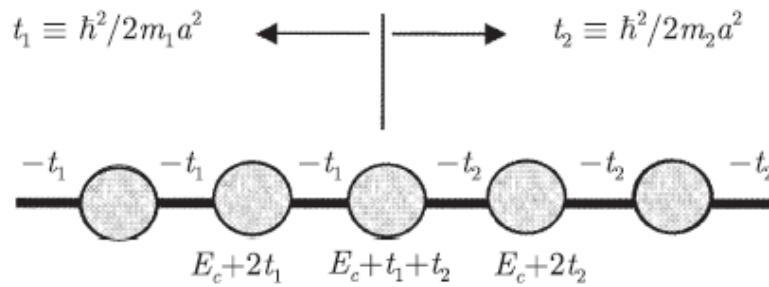


Рис. 5. Схематическое представление матрицы гамильтониана

Необходимо отметить, что полученная гамильтоновская матрица

$$\begin{pmatrix} E_c + 2t_1 & -t_1 & 0 \\ -t_1 & E_c + t_1 + t_2 & -t_2 \\ 0 & -t_2 & E_c + 2t_2 \end{pmatrix}$$

является эрмитовой, что обеспечивает вещественность собственных значений и сохранение тока.

Независимо от используемого приближения фундаментальным исходным требованием является эрмитовость матрицы гамильтониана. В противном случае мы можем столкнуться с несохранением плотности вероятности и нарушением непрерывности электронного тока.

## Глава 2 Одноэлектронное приближение (метод Хартри-Фока)

### 2.1 Метод Хартри

Проблема решения уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов. Гамильтониан  $n$ -электронной системы имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^n \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j}^n \sum_j^n \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (33)$$

Идея метода самосогласованного поля, предложенная Хартри (1927), заключается в том, что взаимодействие каждого электрона со всеми остальными электронами заменяется его взаимодействием с усредненным полем, создаваемым ядром и  $(n - 1)$  электроном. Это позволяет заменить потенциал  $(r_{ij})^{-1}$ , зависящий от координат двух электронов, выражением, описывающим межэлектронное взаимодействие как функцию координат каждого отдельного электрона. Хартри предложил искать полную волновую функцию в виде произведения волновых функций отдельных электронов:

$$\Psi = \Psi_1(1)\Psi_2(2)...\Psi_n(n). \quad (34)$$

Здесь подстрочные числа соответствуют номеру электронного состояния, а числа в скобках – формальному номеру электрона. Форма представления  $\Psi$ , предложенная Хартри, означает, что каждый электрон в атоме движется независимо от движения других электронов. В этом состоит основной недостаток данного метода, т. к. безусловно, движение электронов взаимно коррелировано. Например, если один электрон находится в данной точке пространства, то другой в этой точке находиться не может и, более того, «предпочитает» находиться на другом конце орбитали, атома или молекулы. Погрешность расчета полной энергии, обусловленная неучетом коррелированного движения электронов, получила название корреляционной энергии, а сам эффект – электронной корреляции.

## 2.2 Определитель Слэтера

Другим недостатком метода Хартри является то, что волновая функция Хартри не удовлетворяет принципу Паули. Действительно, для двухэлектронной системы

$$\Psi' = \Psi_1(1)\Psi_2(2). \quad (35)$$

Операция перестановки электронов приводит к новой функции, отличной от предыдущей

$$\Psi'' = \Psi_1(2)\Psi_2(1). \quad (36)$$

Постулат об антисимметричности волновой функции требует, чтобы  $\Psi'$  отличалась от  $\Psi''$  знаком, однако представление Хартри не обеспечивает выполнения этого требования. Для того чтобы  $\Psi$  была антисимметрична, необходимо ее представить в виде линейной комбинации

$$\Psi = \Psi' - \Psi'' = \Psi_1(1)\Psi_2(2) - \Psi_1(2)\Psi_2(1) = \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_1(2) \\ \Psi_2(1) & \Psi_2(2) \end{vmatrix}. \quad (37)$$

Джон Слэтер показал, что единственно возможной формой построения полностью антисимметричной волновой функции  $n$ -электронной системы из независимых ортонормированных спин-орбиталей отдельных электронов является определитель  $n$ -го порядка, который называют определителем Слэтера

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_1(2) & \dots & \Psi_1(n) \\ \Psi_2(1) & \Psi_2(2) & \dots & \Psi_2(n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_n(1) & \Psi_n(2) & \dots & \Psi_n(n) \end{vmatrix} \equiv |\Psi_1(1)\dots\Psi_n(n)|.$$

Перестановке двух электронов соответствует перестановка двух столбцов определителя, что приводит к смене его знака. Если два электрона будут иметь совершенно одинаковый набор квантовых чисел  $n, l, m, m_s$ , то им

будут соответствовать одинаковые строки детерминанта. Такой детерминант равен нулю. Таким образом, представление волновой функции в виде детерминанта Слэтера решает две задачи: разлагает полную волновую функцию  $\Psi$  на одноэлектронные и удовлетворяет принципу Паули.

### 2.3 Метод Хартри-Фока.

Владимир Александрович Фок усовершенствовал метод Хартри, представив полную волновую функцию атома в виде детерминанта Слэтера. Нахождение полной энергии системы является несложным, но трудоемким делом, поскольку нужно перебрать всевозможные комбинации всех элементов детерминанта в сочетании с гамильтонианом многоэлектронной системы. Однако, большая часть таких комбинаций вследствие ортонормированности волновых функций равна либо единице, либо нулю. Поясним сказанное на нескольких примерах.

$$\begin{aligned}
 1. \quad & \int \Psi_1^*(1)\Psi_2^*(2) \left\{ -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right\} \Psi_1(1)\Psi_2(2) dq_1 dq_2 = \\
 & = \int \Psi_2^*(2)\Psi_2(2) dq_2 \int \Psi_1^*(1) \left\{ -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right\} \Psi_1(1) dq_1 = H_1; \\
 2. \quad & \int \Psi_2^*(1)\Psi_1^*(2) \left\{ -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right\} \Psi_1(1)\Psi_2(2) dq_1 dq_2 = \\
 & = \int \Psi_1^*(2)\Psi_2(2) dq_2 \int \Psi_2^*(1) \left\{ -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{r_1} \right\} \Psi_1(1) dq_1 = 0; \\
 3. \quad & \int \Psi_1^*(1)\Psi_2^*(2)\Psi_3^*(3) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(1)\Psi_2(2)\Psi_3(3) dq_1 dq_2 dq_3 = \\
 & = \int \Psi_3^*(3)\Psi_3(3) dq_3 \int \Psi_1^*(1)\Psi_2^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(1)\Psi_2(2) dq_1 dq_2 = J_{12}; \\
 4. \quad & \int \Psi_1^*(1)\Psi_3^*(2)\Psi_2^*(3) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(1)\Psi_2(2)\Psi_3(3) dq_1 dq_2 dq_3 = \\
 & = \int \Psi_2^*(3)\Psi_3(3) dq_3 \int \dots dq_1 dq_2 = 0; \\
 5. \quad & \int \Psi_2^*(1)\Psi_1^*(2)\Psi_3^*(3) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(1)\Psi_2(2)\Psi_3(3) dq_1 dq_2 dq_3 = \\
 & = \int \Psi_3^*(3)\Psi_3(3) dq_3 \int \Psi_2^*(1)\Psi_1^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_1(1)\Psi_2(2) dq_1 dq_2 = K_{12}.
 \end{aligned}$$

В общем случае, если подействовать  $2n$ -электронным гамильтонианом на волновую функцию в виде детерминанта Слэтера, выражение для полной энергии атома примет вид [3, с.25-29]

$$E = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq = 2 \sum_i^n H_i + \sum_{i \neq j}^n \sum_j^n (2J_{ij} - K_{ij}). \quad (38)$$

Интеграл  $H_i$ , называемый *основным*, представляет собой сумму кинетической энергии электрона на орбитали  $J_i$  и потенциальной энергии притяжения его к ядру. Он умножен на 2, т. к. каждая орбиталь содержит два электрона. Двухэлектронный интеграл  $J_{ij}$ , называемый *кулоновским*, представляет собой среднюю энергию электростатического отталкивания электронов, находящихся на орбиталях  $\Psi_i$  и  $\Psi_j$ . По той же причине он имеет множитель 2. Наконец, интеграл  $K_{ij}$  называется *обменным*. Поясним физический смысл обменной энергии. При учете принципа Паули два электрона с параллельными спинами не могут находиться в одной точке пространства. Следовательно, среднее расстояние между электронами в этом случае больше, а электростатическая энергия отталкивания меньше на величину обменной энергии. Таким образом, обменный интеграл частично учитывает электронную корреляцию, хотя корреляция, вызванная кулоновским отталкиванием пар электронов с противоположными спинами, остается в одноэлектронном методе Хартри-Фока неучтенной.

Пространственные орбитали определяются из условия минимума полной энергии системы с помощью вариационного принципа. Для этого составляется новая функция. [3, с.25-29]

$$\Phi = E - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \varepsilon_{ij} \int \Psi_i \Psi_j dq = E - \sum_{i=1}^n \varepsilon_i \int \Psi_i^2 dq. \quad (39)$$

Полная энергия  $E$  достигает минимума при условии обращения первой вариации  $\delta\Phi$  в нуль: [3, с.25-29]

$$\delta\Phi = \sum_i^n \delta H_i + \sum_{i \neq j}^n \sum_j^n (2\delta J_{ij} - \delta K_{ij}) - \sum_i^n \varepsilon_i \int \delta\Psi_i \Psi_i dq = 0. \quad (40)$$

Подставим выражения для кулоновского и обменного интегралов в данное уравнение и получим: [3, с.25-29]

$$\sum_i^n \int \delta\Psi_i \left\{ \hat{H}_i(1)\Psi_i + e^2 \sum_{j(i \neq j)}^n \left( 2\Psi_i(1) \int \frac{\Psi_j^2(2)}{r_{12}} dq_2 - \Psi_j(1) \int \frac{\Psi_j(2)\Psi_i(2)}{r_{12}} dq_2 \right) - \varepsilon_i \Psi_i(1) \right\} dq_1 = 0 \quad (41)$$

Это равенство выполняется при любых  $\delta\Psi_i$  только если выражение в фигурных скобках обращается в нуль:

$$\hat{H}_i(1)\Psi_i(1) + e^2 \sum_{j(i \neq j)}^n \left( 2\Psi_i(1) \int \frac{\Psi_j^2(2)}{r_{12}} dq_2 - \Psi_j(1) \int \frac{\Psi_j(2)\Psi_i(2)}{r_{12}} dq_2 \right) = \varepsilon_i \Psi_i(1), \quad (42)$$

Данная система уравнений называется системой *одноэлектронных уравнений* или системой *уравнений Хартри-Фока*. Каждое из уравнений содержит координаты только одного электрона, но, чтобы его составить, нужно знать заранее эффективный потенциал межэлектронного отталкивания (в круглых скобках), зависящий от искомых функций  $\Psi_j$ .

Решают уравнения Хартри-Фока обычно итерационным путем. Выбирают на основе каких-либо соображений начальные функции  $\Psi_j^0$ , с ними определяют кулоновский и обменный члены  $J_j^0$  и  $K_j^0$ . Подставляют их в уравнение Хартри-Фока и находят волновые функции  $\Psi_j^1$ , с которыми снова рассчитывают эффективный потенциал отталкивания электронов  $2J_j^1 - K_j^1$ . На следующем шаге итерации рассчитывают  $\Psi_j^2$  и т. д. Если на каком-то этапе получаются одни и те же волновые функции (т. е. итерации сходятся), то на этом расчет заканчивается. Решение уравнений на конечном шаге итераций является «согласованным с полем потенциала», которое определяется кулоновскими и обменными операторами. Такое поле получило название *самосогласованного*, а сам метод Хартри-Фока – *метода самосогласованного поля (ССП)*.

Численное решение уравнений ССП Хартри-Фока приводит к достаточно точному решению и хорошему воспроизведению свойств многоэлектронных атомов. Основной недостаток состоит в том, что функции  $\Psi_i$  не имеют аналитического вида и могут быть получены только в виде таблиц. Из уравнений Хартри-Фока с очевидностью следует, что

$$H_i + \sum_j^n (2J_{ij} - K_{ij}) = \varepsilon_i, \quad (43)$$

т. е.  $\varepsilon_i$  соответствует полной энергии электрона, находящегося на орбитали  $\Psi_i$ . Полная энергия многоэлектронной системы равна сумме полных энергий всех электронов за вычетом энергии межэлектронного отталкивания:

$$E = 2 \sum_i^n \varepsilon_i - \sum_i^n \sum_j^n (2J_{ij} - K_{ij}). \quad (44)$$

Если при отрыве электрона с орбитали  $\Psi_i$  не происходит изменения волновых функций  $\Psi_j$  ( $j \neq i$ ), то  $\varepsilon_i$  можно приравнять (с противоположным знаком) к потенциалу ионизации  $i$ -ой орбитали,  $IP_i = -\varepsilon_i$ . Этот результат известен под названием *теоремы Купманса*. Во многих случаях потенциалы ионизации, вычисленные с помощью теоремы Купманса, оказываются хорошим приближением к истинным потенциалам ионизации и поэтому из-за простоты вычислений используются как оценки.

Метод Хартри-Фока может быть реализован по-разному, в зависимости от вида детерминанта Слэтера, т. е. от способа размещения электронов по орбиталям. В более простом варианте системы электронов с противоположными спинами ( $\alpha$  и  $\beta$ ) эквивалентны, т. е. все электроны спарены, а энергии  $\alpha$  и  $\beta$  пары электронов одинаковы. Если два электрона движутся в одной и той же области пространства (или как часто говорят, занимают одну и ту же орбиталь), то у них одинаковая пространственная часть волновой функции и различающаяся спиновая. Система с  $n$  орбиталями, таким образом, содержит  $2n$  электронов. Это так называемые *закрытые оболочки*, в

большинстве случаев соответствующие электронному распределению основного состояния молекул. Для таких систем детерминант Слэтера записывают следующим образом:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \begin{vmatrix} \Psi_1\alpha(1) & \Psi_1\alpha(2) & \Psi_1\alpha(3) & \dots & \Psi_1\alpha(2n) \\ \Psi_1\beta(1) & \Psi_1\beta(2) & \Psi_1\beta(3) & \dots & \Psi_1\beta(2n) \\ \Psi_2\alpha(1) & \Psi_2\alpha(2) & \Psi_2\alpha(3) & \dots & \Psi_2\alpha(2n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_n\beta(1) & \Psi_n\beta(2) & \Psi_n\beta(3) & \dots & \Psi_n\beta(2n) \end{vmatrix},$$

$n$  – число двукратно занятых орбиталей. Метод Хартри-Фока, использующий такую волновую функцию, называется *ограниченным*, ОХФ (в английской транскрипции *restricted Hartree-Fock, RHF*).

Более сложным, но и более корректным является описание многоэлектронной системы, когда состояние каждого электрона описывается своей спин-орбиталью, т. е. электроны  $\alpha$  и  $\beta$  не принуждены занимать одну и ту же область пространства. Следовательно, энергии  $\alpha$  и  $\beta$  пары электронов также могут быть различны. В этом случае говорят об *открытых оболочках*. Такой метод называется *неограниченным* методом Хартри-Фока, НХФ (или *unrestricted HF, UHF*), ему соответствует детерминант Слэтера вида

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{(2n)!}} \begin{vmatrix} \Psi_1\alpha(1) & \Psi_1\alpha(2) & \Psi_1\alpha(3) & \dots & \Psi_1\alpha(2n) \\ \Psi'_1\beta(1) & \Psi'_1\beta(2) & \Psi'_1\beta(3) & \dots & \Psi'_1\beta(2n) \\ \Psi_2\alpha(1) & \Psi_2\alpha(2) & \Psi_2\alpha(3) & \dots & \Psi_2\alpha(2n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi'_n\beta(1) & \Psi'_n\beta(2) & \Psi'_n\beta(3) & \dots & \Psi'_n\beta(2n) \end{vmatrix},$$

где  $\Psi_i$  в принципе может быть не равно  $\Psi'_i$ .

Для электронных систем, в которых принципиально невозможно спаривание всех электронов (например, для систем с нечетным числом электронов, т.е. для радикалов, либо для триплетных или синглетных



возбужденных состояний) компромиссным решением является использование так называемо-го ограниченного метода Хартри-Фока для открытых оболочек (*restricted open-shell HF, ROHF*). В этом методе все электроны спарены за исключением одного электрона для радикалов или двух электронов для триплетных или синглетных возбужденных состояний. В качестве примера на рисунке показано распределение электронов по энергетическим уровням (орбиталям) в триплетном состоянии электронной системы, описываемой методом *ROHF*.

## 2.4 Метод Хартри-Фока-Рутана

Основные идеи:

- Базисные функции центрированы на атомах
- Атомные орбитали образуют базис для представления молекулярных орбиталей
- Из молекулярных орбиталей строится полная электронная волновая функция
- Все уравнения записываются с помощью базисных функций

Уравнения Хартри-Фока в общем виде:

$$\hat{F}\varphi_i = \varepsilon_i\varphi_i, \quad (45)$$

где  $\varphi_i$  – базисные функции для представления электронной волновой функции,  $\hat{F}$  – матричное представление оператора Фока (матрица Фока). Оператор Фока – одноэлектронный оператор полной энергии.

Подставим разложение молекулярных орбиталей по атомным орбиталям:

$$\hat{F} \sum_{\mu=1}^M c_{\mu i} \chi_{\mu} = \varepsilon_i \sum_{\mu=1}^M c_{\mu i} \chi_{\mu} \quad (46)$$

В обозначениях Дирака умножим на  $\chi_{\nu}^*$  и проинтегрируем:

$$\sum_{\mu=1}^M \langle \chi_v | \hat{F} | \chi_\mu \rangle c_{\mu i} = \varepsilon_i \sum_{\mu=1}^M \langle \chi_v | \chi_\mu \rangle c_{\mu i} \quad (47)$$

Обозначим:

$$F_{v\mu} = \langle \chi_v | \hat{F} | \chi_\mu \rangle \quad S_{v\mu} = \langle \chi_v | \chi_\mu \rangle \quad (48)$$

$S_{\mu\nu}$ -матрица перекрывания. Её элементы говорят о степени пространственного перекрывания атомных орбиталей  $\chi_v$  и  $\chi_\mu$ .

Тогда

$$\sum_{\mu=1}^M F_{v\mu} c_{\mu i} = \varepsilon_i \sum_{\mu=1}^M S_{v\mu} c_{\mu i} \quad (49)$$

В матричном виде (47) можно записать:

$$\mathbf{FC} = \mathbf{\varepsilon SC} \quad (50)$$

$C$  – матрица, состоящая из коэффициентов  $c_{\mu i}$  для  $i$ -й молекулярной орбитали и  $\mu$ -й атомной орбитали,  $\varepsilon$ -диагональная матрица орбитальных энергий.

## Глава 3 Граничный метод квантовой передачи QTBM

### 3.1 Расчет тока в полупроводниковых компонентах

При моделировании полупроводниковых компонентов ток  $I$  [А] является важнейшей наблюдаемой величиной, которую надо учитывать. В одномерных моделях плотность тока  $j$  [А/м<sup>2</sup>], является более оптимальной мерой, поскольку только направление роста влияет на поток. Если  $j$  можно вычислить в одном измерении, то  $I$  можно оценить для устройства с площадью поперечного сечения, равной  $A$  [м<sup>2</sup>] через уравнение (51)

$$I = j \cdot A. \quad (51)$$

Исходя из волновой функции  $\psi$ , эффективная плотность тока может быть рассчитана следующим образом [4, с.17]

$$j(x) = \frac{i\hbar|e|}{2m^*(x)} \left( \psi \frac{d}{dx} \psi^* - \psi^* \frac{d}{dx} \psi \right), \quad (52)$$

Для моделирования тока в виде пучка электронов подходит аналог плоской волны (53).

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (53)$$

На рис. 6 показана модель гетероструктуры между двумя областями предполагаемого постоянного потенциала. Сторона с "входящим" током называется эмиттером (Е); другая сторона конструкции - коллектором (С). Предполагая, что область коллектора (С) не имеет отражения, в этой области не существует левых распространяющихся волн, и волновая функция представляет собой единственную плоскую волну,

$$\psi_C(x) = Fe^{ik_C x}.$$

На стороне излучателя волновая функция представляет собой суперпозицию входящей волны амплитуды  $|A|^2 = 1$  и отражения гетероструктуры,

$$\psi_E(x) = Ae^{ik_E x} + Be^{-ik_E x}.$$

Предполагается, что устройство имеет открытые границы (омические контакты).

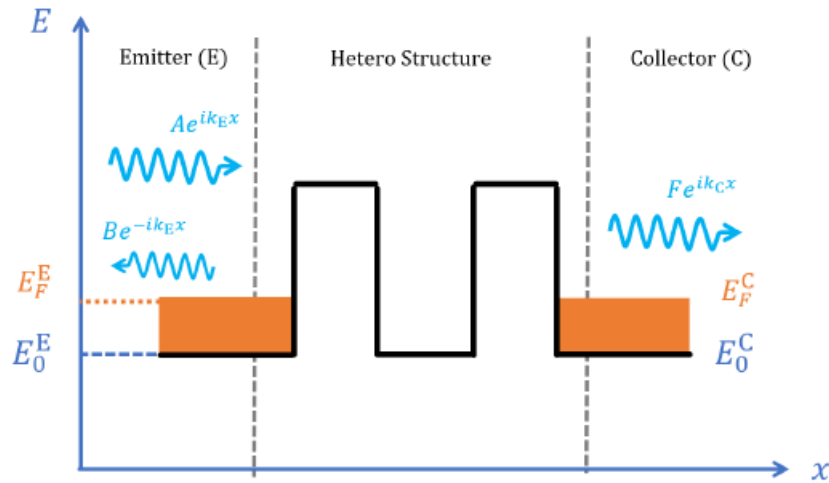


Рис.6 . Схематический вид энергетического профиля гетероструктуры зоны проводимости между областями эмиттера и коллектора.

Волновая функция для падающих волн от излучателя к коллектору  $\psi_{C \rightarrow E}(x)$  может быть использована с помощью (52) для определения коэффициента пропускания  $T$  и коэффициента отражения  $R$  [6, с.80] [4, с.36],

$$T = \frac{|j_{\text{trans}}|}{|j_{\text{inc}}|} = \frac{k_C m_E^* |F|^2}{k_E m_C^* |1|^2}, \quad (54)$$

$$R = \frac{|j_{\text{refl}}|^2}{|j_{\text{inc}}|^2} = |B|^2. \quad (55)$$

Суммарный поток плотности тока между  $E$  и  $C$  может быть рассчитан как [7, стр.13] [4, стр.22],

$$j = j_{E \rightarrow C} - j_{C \rightarrow E}. \quad (56)$$

Эти два тока уравнивались, если бы все устройство находилось в равновесии. С сильно изменчивыми неравновесными состояниями трудно справиться; вместо этого модель равновесия может быть модифицирована. Если устройство смоделировать в виде двух больших электронных резервуаров, эмиттера и коллектора, которые плотно заполнены электронами,

но имеют низкую плотность тока, то можно считать, что электроны внутри каждого резервуара находятся в тепловом равновесии друг с другом.

В этом случае каждый резервуар находится в равновесии с постоянной температурой и уровнем Ферми. Соединяющие водохранилища (с точки зрения плотности заполнения) гетероструктуры привели бы к значительной плотности тока внутри гетероструктуры, но к незначительному возмущению двух резервуаров. Возвращаясь к уравнению (56), отметим, что два тока не будут взаимоисключаться, поскольку они исходят из двух разных состояний равновесия.

Для моделирования будем использовать распределение Ферми-Дирака.

Возвращаясь к трем измерениям, структура полосы по-прежнему определяется приближением эффективной массы в каждом резервуаре,

$$E(\mathbf{k}) = E_C + \frac{\hbar^2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}}{2m^*}, \quad (57)$$

с волновым вектором  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z$ . Распределение Ферми-Дирака дает вероятность того, что состояние  $\mathbf{k}$  будет занято внутри зонной структуры  $E(\mathbf{k})$ ,

$$f^{E,C}[E(\mathbf{k})] = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E(\mathbf{k}) - E_F^{E,C}}{k_B \theta}\right)}. \quad (58)$$

где  $E_F^{E,C}$  - уровень Ферми для эмиттера или коллектора,

$k_B$  - постоянная Больцмана,

$\theta$  - абсолютная температура.

Для равновесия энергия Ферми соответствует 50%-ной вероятности заполнения энергетических уровней.

Используя формулу Цу-Эсаки [8], чтобы найти выражение для  $j$ , сначала рассмотрим небольшой вклад  $dj$  из некоторого региона структуры  $d\mathbf{k}$ ,

$$dj_{E \rightarrow C} = eT(k_x) v_x g(k_x, k_y, k_z) f^E(E) (1 - f^C(E)) dk_x, \quad (59)$$

$$dj_{E \leftarrow C} = eT(k_x) v_x g(k_x, k_y, k_z) f^C(E) (1 - f^E(E)) dk_x, \quad (60)$$

где  $g(k_x, k_y, k_z)$  - плотность положительных  $k$ -состояний для куба,  $v_x$  - групповая скорость,

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_x}{dk_x}, \quad (61)$$

$$g(k_x, k_y, k_z) = \frac{2}{8\pi^3}; \quad (62)$$

коэффициент два получается из каждого состояния, имеющего два возможных спина для электрона. Приближение эффективной массы для параболической полосовой структуры дает,

$$dj_{E \rightarrow C} = \frac{e}{4\pi^3 \hbar} T(E_x) dE_x \int_0^\infty \int_0^\infty f^E(E) (1 - f^C(E)) dk_y dk_z, \quad (63)$$

$$dj_{E \leftarrow C} = \frac{e}{4\pi^3 \hbar} T(E_x) dE_x \int_0^\infty \int_0^\infty f^C(E) (1 - f^E(E)) dk_y dk_z. \quad (64)$$

Примем  $k_{yz} = \sqrt{k_y^2 + k_z^2}$ , тогда

$$j_{E \rightarrow C} = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{E_{\min}}^\infty T(E_x) dE_x \int_0^\infty f^E(E) (1 - f^C(E)) dE_{yz}, \quad (65)$$

$$j_{E \leftarrow C} = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_E^\infty T(E_x) dE_x \int_0^\infty f^C(E) (1 - f^E(E)) dE_{yz}, \quad (66)$$

Подставим в формулу (56)

$$j = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_x) dE_x \int_0^\infty (f^C(E) - f^E(E)) dE_{yz}. \quad (67)$$

Интегрирование по  $E_{yz}$  называется функцией передачи  $S(E)$  и должно быть выполнено для общего значения  $E = E_x + E_y$ . Оба термина могут быть объединены отдельно с помощью [9, с.172]. Первый член ( $f^C(E)$ ) становится,

$$\int_0^\infty \frac{1}{1 + e^{\frac{E_x + E_{yz} - E_F^C}{k_B \theta}}} dE_{yz} = k_B \theta \ln \left[ 1 + \exp \left( -\frac{E_x - E_F^C}{k_B \theta} \right) \right]. \quad (68)$$

Таким образом, функция передачи, предполагающая распределение Ферми, равна,

$$S(E_x) = k_B \theta \ln \left( \frac{1 + \exp \left( -\frac{E_x - E_F^E}{k_B \theta} \right)}{1 + \exp \left( -\frac{E_x - E_F^C}{k_B T} \right)} \right) \quad (69)$$

И плотность тока

$$j = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_x) S(E_x) dE_x, \quad (70)$$

$$j = \frac{m^* e k_B \theta}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_x) \ln \left( \frac{1 + \exp \left( -\frac{E_x - E_F^E}{k_B T} \right)}{1 + \exp \left( -\frac{E_x - E_F^C}{k_B T} \right)} \right) dE_x. \quad (71)$$

### 3.2 Допущения метода QTBM

Данный численный метод использует следующие приближения:

1. Приближения эффективной массы используется для описания движения электронов в кристаллической решетке;
2. Диэлектрическая проницаемость постоянна по всей конструкции;
3. Распределение Ферми-Дирака для вероятности занятия энергетических состояний;
4.  $E_{\max} = 20k_B \theta$  [6] и  $E_{\min}$  приравнивают к локальному дну зоны проводимости;
5. Энергии Ферми вычисляются как [10, с.22-38]

$$E_F^0 = \frac{\pi \hbar^2 n_{2d}}{m^*}, \quad (72)$$

$$n_{2d} = n_d L_d \quad (73)$$

Температурная зависимость принимает вид,

$$E_F(T) = k_B \theta \ln \left( e^{E_F^0 / k_B \theta} - 1 \right). \quad (74)$$

6. Процесс туннелирования является когерентным

6.1 Ортогональный импульс  $k_y$  и  $k_z$  не оказывает влияния на туннелирование и отделим от  $k_x$ .

6.2 Отсутствие рассеяния на фононах или примесях.

6.3 Отсутствие накопления электронов в квазисвязанных состояниях

### 3.3 Описание метода QTBM

QTBM использует метод конечных разностей, в котором уравнение Шредингера расширяется на простой набор базисных функций, которые могут быть выражены в виде системы линейных уравнений, удобной для численных вычислений. Первым шагом является дискретизация пространственной области  $x = [x_0, x_{N_x+1}]$  на  $N_x$  внутренних точек с равномерным расстоянием  $\Delta x$  и двумя граничными узлами,

$$x_j = x_0 + j\Delta x, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N_x, N_x + 1, \quad \Delta x = \frac{x_{N_x+1} - x_0}{N_x + 1}. \quad (75)$$

На этой сетке уравнение

$$E\psi(x) = \hat{H}\psi(x). \quad (76)$$

может быть решено для значения волновой функции в узлах, пусть обозначен дискретный набор значений волновой функции и потенциала,

$$\psi(x_j) = \omega_j, \quad V(x_j) = V_j. \quad (77)$$

Стандартный Гамильтониан посредством трехточечной аппроксимации может быть представлен как

$$\hat{H}\omega_j = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\omega_{j-1} - 2\omega_j + \omega_{j+1}}{\Delta x^2} \right) + V_j\omega_j, \quad (78)$$

Приведем уравнение к виду

$$-b_j\omega_{j-1} + a_j\omega_j - b_{j+1}\omega_{j+1} = E\omega_j, \quad (79)$$

Приняв

$$a_j = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} + V_j, \quad b_j = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \quad j = 1, 2, 3, \dots, N_x.$$

Если допустимо изменение эффективной массы в зависимости от  $x$ , то эта схема должна быть изменена. Используя гамильтониан эффективной



массы, та же процедура конечных разностей может быть использована для получения новых коэффициентов  $d_j$  и  $s_j$

$$-s_j\omega_{j-1} + d_j\omega_j - s_{j+1}\omega_{j+1} = E\omega_j, \quad (80)$$

где

$$d_j = \frac{\hbar^2}{m\Delta x^2} \left( \frac{1}{m_{j+1}^* + m_j^*} + \frac{1}{m_{j-1}^* + m_j^*} \right) + V_j, \quad j = 1, 2, 3 \dots N_x,$$

$$s_j = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} \frac{1}{m_{j-1}^* + m_j^*}, \quad j = 1, 2, 3 \dots N_x.$$

В предыдущем разделе граничные точки  $x_0, x_{N_x+1}$  не обрабатывались при установке  $j = 0$  в (79) или (80) потребовали бы значений за пределами области моделирования. В зависимости от того, как обрабатываются эти точки, могут быть достигнуты различные граничные условия. Для открытой системы с плоскими волнами наложим условия непрерывности

$$\begin{cases} \psi, & \text{является непрерывным } \forall x \\ \frac{1}{m^*} \cdot \frac{d\psi}{dx}, & \text{непрерывно, если } V(x) \text{ конечно} \end{cases}$$

на плоские волны вне области с граничными точками.

В одномерном случае волновая функция в точках  $j = 1$  и  $j = N_x$  равняется коэффициентам  $A, B$  и  $F, G$  [4], так что

$$\begin{aligned} \omega_1 &= A + B, \\ \omega_{N_x} &= F + G. \end{aligned}$$

Предполагая, что потенциал для  $x < x_0$  постоянен и равен потенциалу при  $x_0$ , волновое число вне области равно  $k_0 = \sqrt{2m_0^*(V_0 - E)/\hbar^2}$  (то же самое относится к  $k_{N_x}$  на другом краю), создавая волновую функцию на границе и за пределами области,

$$\omega_j = Ae^{i(1-j)k_0\Delta x} + Be^{i(j-1)k_0\Delta x}, \quad j \leq 1 \quad (81)$$

$$\omega_j = Fe^{i(j-N_x)k_{N_x}\Delta x} + Ge^{i(N_x-j)k_{N_x}\Delta x}, \quad j \geq N_x \quad (82)$$

Таким образом, условия для волновой функции в граничных областях становятся,

$$\omega_0 = Ae^{ik_0\Delta x} + Be^{-ik_0\Delta x},$$

$$\omega_1 = A \cdot 1 + B \cdot 1,$$

$$\omega_{N_x} = F \cdot 1 + G \cdot 1,$$

$$\omega_{N_x+1} = F \cdot e^{ik_{N_x}\Delta x} + Ge^{-ik_{N_x}\Delta x}.$$

Чтобы записать простую систему линейных уравнений, А и F могут быть записаны как функции  $\omega$ ,

$$\omega_1 = A + B \Rightarrow B = \omega_1 - A$$

$$\omega_0 = Ae^{ik_0\Delta x} + (\omega_1 - A)e^{-ik_0\Delta x},$$

$$A = \frac{\omega_0 - \omega_1 e^{-ik_0\Delta x}}{e^{ik_0\Delta x} - e^{-ik_0\Delta x}} = \alpha_1 \omega_0 + \beta_1 \omega_1$$

$$G = \frac{\omega_{N_x+1} - \omega_{N_x} e^{ik_{N_x}\Delta x}}{e^{-ik_{N_x}\Delta x} - e^{ik_{N_x}\Delta x}} = \alpha_{N_x} \omega_{N_x+1} + \beta_{N_x} \omega_{N_x}$$

Где

$$\alpha_1 = \frac{1}{e^{ik_0\Delta x} - e^{-ik_0\Delta x}}, \quad \beta_1 = \frac{-e^{-ik_0\Delta x}}{e^{ik_0\Delta x} - e^{-ik_0\Delta x}},$$

$$\alpha_{N_x} = \frac{1}{e^{ik_{N_x}\Delta x} - e^{-ik_{N_x}\Delta x}}, \quad \beta_{N_x} = \frac{-e^{-ik_{N_x}\Delta x}}{e^{ik_{N_x}\Delta x} - e^{-ik_{N_x}\Delta x}}.$$

Дискретизированный гамильтониан из (78-79) теперь дает QТВМ-решение,

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ -b_1 & a_1 - E & -b_2 & & \\ & -b_2 & a_2 - E & -b_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -b_{N_x} & a_{N_x} - E & -b_{N_x+1} \\ & & & & \beta_{N_x} & \alpha_{N_x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{N_x} \\ \omega_{N_x+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ G \end{bmatrix},$$

если вместо этого используется гамильтониан из (78), то эффективная масса QТВМ равна

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ -s_1 & d_1 - E & -s_2 & & & \\ & -s_2 & d_2 - E & -s_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -s_{N_x} & d_{N_x} - E & -s_{N_x+1} \\ & & & & \beta_{N_x} & \alpha_{N_x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_0 \\ \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_{N_x} \\ \omega_{N_x+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ G \end{bmatrix}.$$

Данные системные матрицы являются трехдиагональными и могут быть эффективно решены с помощью Matlab. Удобной особенностью QTBM является то, что  $A$  и  $G$  - это просто левая и правая амплитуды падения соответственно. Для одиночного левого входящего луча амплитудой  $A = 1$  и  $G = 0$ , что делает известной правую часть. То же самое можно сделать для прямых входящих лучей,  $G = 1$  и  $A = 0$ .

Установив как  $A = 0$ , так и  $G = 0$ , уравнение можно переформатировать как задачу на собственные значения для нахождения собственных энергий  $E$  и состояний  $\omega$ .

### *Список литературы*

1. **Садыков С.А.** Физика твердого тела. Электронная структура кристаллов. Махачкала, ИПЦ ДГУ, 2007. 96 с.
2. **Датта С.** Квантовый транспорт: от атома к транзистору. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2009. — 532 с.
3. **Шалимова К. В.** Физика полупроводников: Учебник. 4\_е изд., стер.— СПб.: Издательство «Лань», 2010. — 400 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература).
4. **Andreas Gehring.** “Simulation of tunneling in semiconductor devices”. en. Accepted:2020-06-30T11:09:35Z. Thesis. Technische Universität Wien, 2003. url: <https://repositum.tuwien.at/handle/20.500.12708/12170>
5. **Michael Feiginov.** “Frequency Limitations of Resonant-Tunnelling Diodes in Sub-THz and THz Oscillators and Detectors”. en. In: Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves 40.4 (Apr. 2019), pp. 365–394. issn: 1866-6892, 1866-6906.doi: 10.1007/s10762-019-00573-5. url: <https://link.springer.com/10.1007/s10762-019-00573-5>
6. **Bryan A. Biegel.** “Quantum electronic device simulation”. en. PhD thesis. Stanford University, 1997. url: [https://www.researchgate.net/publication/253824431\\_Quantum\\_electronic\\_device\\_simulation](https://www.researchgate.net/publication/253824431_Quantum_electronic_device_simulation).
7. **Hiroshi Mizuta and Tomonori Tanoue.** The physics and applications of resonant tunnelling diodes. Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering 2. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 1995. isbn:978-0-521-43218-4.
8. **R. Tsu and L. Esaki.** “Tunneling in a finite superlattice”. In: Applied Physics Letters 22.11 (June 1973), pp. 562–564. issn: 0003-6951. doi: 10.1063/1.1654509. url: <https://doi.org/10.1063/1.1654509>

9. **Bertil Westergren, Lennart Råde, and Frank Wikström.** Mathematics Handbook - for Science and Engineering. Studentlitteratur AB, 2019. isbn: 978-91-44-12843-6.
10. **J. H. Davies.** The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. Cambridge, U.K. ; New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1998. isbn:978-0-521-48148-9 978-0-521-48491-6.
11. **K. Biswas, J. P. Saha, P. Patra.** On the position dependent effective mass Hamiltonian. October 22, 2019.
12. **Oldwig von Roos.** Position-dependent effective masses in semiconductor theory. Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, California 91109. 15 JUNE 1983