Метод функций Грина

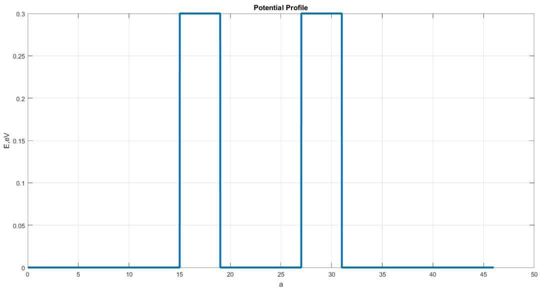
для моделирования процесса токоперноса в РТД

Власов Е.

Москва, 2017

Введение

Резонансно туннельный диод - полупроводниковый элемент электрической цепи с нелинейной вольт-амперной характеристикой.
В РТД используется гетероструктура, в которой потенциальная яма для носителей заряда, например, для электронов, отделена от контактных легированных областей потенциальными барьерами.



Функция Грина.Определение

Функция Грина $G(x, s)$ линейного дифференциального оператора $L = L(x)$, действующего на обобщённых функциях на подмножестве евклидового пространства R^n в точке s — это любое решение уравнения вида

$$LG(x, s) = \delta(x - s)$$

где δ — это дельта-функция. Это свойство функции Грина может использоваться для решения дифференциального уравнения вида

$$Lu(x) = f(x)$$

Функция Грина — это обратный оператор к $L : G(x, s) = L^{-1}$.

Уширение уровней

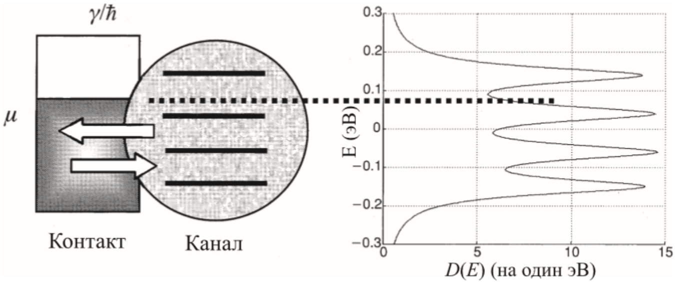


Figure: Канал, соединенный с одним контактом. Уширение уровней формирует непрерывную плотность состояний

Уширение уровней

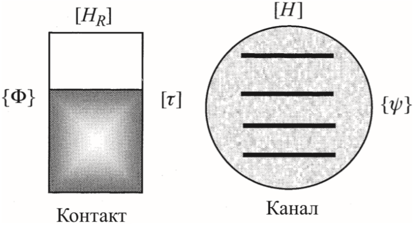


Figure: Канал, описываемый матрицей H, взаимодействует с контактом (взаимодействие определяется матрицей τ), которому, в свою очередь, отвечает матрица $\mathrm{H_R}$.

Запишем уравнение Шредингера, описывающее систему канал-контакт (см. Рис. 5).

$$\mathrm{E}\begin{pmatrix}\psi\\ \Phi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{H} & \tau\\ \tau^{+} & \mathrm{H_R}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi\\ \Phi\end{pmatrix}$$

Открытые системы

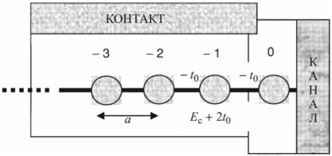


Figure: Простой пример: полубесконечная проволока. Первая точка системы "0" рассматривается как канал, а вся оставшаяся часть как контакт.

$$\mathrm{E}\psi = (\mathrm{E_c}+2\mathrm{t_0})\psi - \mathrm{t_0}\exp(\mathrm{ika})\psi + \mathrm{t_0}\mathrm{B}\left[\exp(\mathrm{ika}) - \exp(-\mathrm{ika})\right] = \mathrm{H}\psi + \Sigma\psi + \mathrm{S}$$

которое имеет необходимый вид, с функциями вида

$$\Sigma = -\mathrm{t_0}\exp(\mathrm{ika})$$

Общая постановка задачи

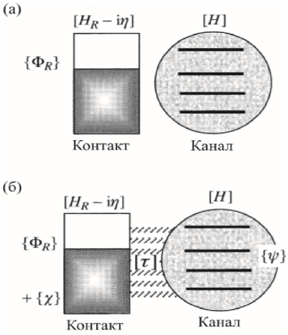


Figure: а - канал без электронов внутри, отсоединенный от контактов. б - при соединении с контактом волновые функции Ψ_R проникают вглубь структуры, формируя влновую функцию ψ, которая, в свою очередь,

Общая постановка задачи

$$[\mathrm{EI_R} - \mathrm{H_R}]\,\Psi_\mathrm{R} = 0$$

$$[\mathrm{EI_R} - \mathrm{H_R} + \mathrm{i}\eta]\,\Psi_\mathrm{R} = \{\mathrm{S_R}\}$$

где $[\eta] = 0^+\,[\mathrm{I_R}]$ Полная волновая функция составной системы будет удовлетворять блочному уравнению Шредингера, которое может быть записано в виде двух блоков

$$\begin{pmatrix} \mathrm{EI_R} - \mathrm{H_R} + \mathrm{i}\eta & -\tau^+ \\ -\tau & \mathrm{EI} - \mathrm{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_\mathrm{R} + \chi \\ \psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{S_R} \\ 0 \end{pmatrix}$$

LDOS

$$D(\vec{r}; E) = \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(\vec{r})|^2 \delta(E - \epsilon_{\alpha})$$

Это выражение можно рассматривать как деленный на 2π диагональный элемент другой более общей величины, называемой спектральной функцией, которая определяется как

$$A(\vec{r}, \vec{r'}, E) = 2\pi \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r'}) \delta(E - \epsilon_{\alpha}) \psi^*_{\alpha}(\vec{r'}) \tag{1}$$

$$D(E) = \frac{1}{2\pi} \mathrm{Tr}\,[A(E)] = \sum_{\alpha} \delta(E - \epsilon_{\alpha}) \tag{2}$$

Функция Грина

$$2\pi\delta(\mathrm{E}-\epsilon_\alpha)=\left[\frac{2\eta}{(\mathrm{E}-\epsilon_\alpha)^2+\eta^2}\right]=\mathrm{i}\left[\frac{1}{\mathrm{E}-\epsilon_\alpha+\mathrm{i}0^+}-\frac{1}{\mathrm{E}-\epsilon_\alpha-\mathrm{i}0^+}\right]$$

Которое, с учетом сказанного ранее, представимо в виде

$$2\pi\delta(\mathrm{EI}-\mathrm{H})=\mathrm{i}\{\left[(\mathrm{E}+\mathrm{i}0^+)\mathrm{I}-\mathrm{H}\right]^{-1}-\left[(\mathrm{E}-\mathrm{i}0^+)-\mathrm{H}\right]^{-1}\}$$

где 0^+ обозначает положительную б.м. величину.
Тогда, записывая последнее в матричной форме, получаем

$$\mathrm{A}(\mathrm{E})=\mathrm{i}\left[\mathrm{G}(\mathrm{E})-\mathrm{G}^+(\mathrm{E})\right] \tag{3}$$

где $\mathrm{G}(\mathrm{E})=[(\mathrm{E}+\mathrm{i}0^+)\mathrm{I}-\mathrm{H}]^{-1}$ - запаздывающая функция Грина, а $\mathrm{G}^+(\mathrm{E})=[(\mathrm{E}-\mathrm{i}0^+)\mathrm{I}-\mathrm{H}]^{-1}$ - опережающая. Полная функция Грина может бть получена из предыдущего выражения в виде

$$\vec{\mathrm{G}}=\begin{pmatrix}\mathrm{G} & \mathrm{G}_{\mathrm{dR}}\\ \mathrm{G}_{\mathrm{Rd}} & \mathrm{G}_{\mathrm{RR}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}(\mathrm{E}+\mathrm{i}0^+)\mathrm{I}-\mathrm{H} & -\tau\\ -\tau^+ & (\mathrm{E}+\mathrm{i}0^+)\mathrm{I}_\mathrm{R}-\mathrm{H}_\mathrm{R}\end{pmatrix}^{-1}$$

Канал с двумя контактами

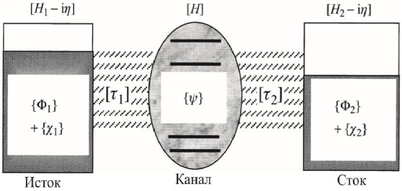


Figure: Канал с двумя контактами

$$[\mathrm{EI} - \mathrm{H}_1 + \mathrm{i}\eta]\{\Phi_1\} = \{\mathrm{S}_1\}$$

$$[\mathrm{EI} - \mathrm{H}_2 + \mathrm{i}\eta]\{\Phi_2\} = \{\mathrm{S}_2\}$$

Входящий и исходящий токи

$$J_1 = \frac{\mathrm{Tr}\left[\psi^+\tau_1\Phi_1 - \Phi_1^+\tau_1^+\psi\right]}{i\hbar} - \frac{\mathrm{Tr}\left[\chi_1^+\tau_1^+\psi - \psi^+\tau_1\chi_1\right]}{i\hbar}$$

Используя соотношения $\psi = GS$ и $\{S\} = \tau_1\{\Phi_1\} + \tau_2\{\Phi_2\}$ выражение для входящего в канал тока

$$I_{input} = \frac{1}{\hbar}\int \frac{dE}{2\pi} f_1(E)\mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A\right]$$

Исходящий ток

$$I_{output} = \frac{1}{\hbar}\int \frac{dE}{2\pi} f_1(E)\mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A f_1\right]$$

Функция пропускания

$$I_1 = T_{12}(E)\left[f_1(E) - f_2(E)\right]$$
$$T_{12}(E) = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A_2\right]$$

$$I_2 = T_{21}(E)\left[f_2(E) - f_1(E)\right]$$
$$T_{21}(E) = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_2 A_1\right]$$

Если выполняется равенство $\mathrm{Tr}\left[\Gamma_2 A_1\right] = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A_2\right]$, то можно ожидать, что токи в двух контактах будут равны по величине и противоположны по направлению.

$$\mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A\right] = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 G \Gamma G^+\right] = \mathrm{Tr}\left[\Gamma G^+ \Gamma_1 G\right] = \mathrm{Tr}\left[\Gamma A_1\right]$$

Вычитая $\mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A_1\right]$ из обеих частей уравнения, получаемый результат $\mathrm{Tr}\left[\Gamma_2 A_1\right] = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_1 A_2\right]$. Это позволяет записать следующее выражение для тока

$$I = \frac{q}{h}\int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E)\left[f_1(E) - f_2(E)\right] \tag{4}$$

ВАХ РТД

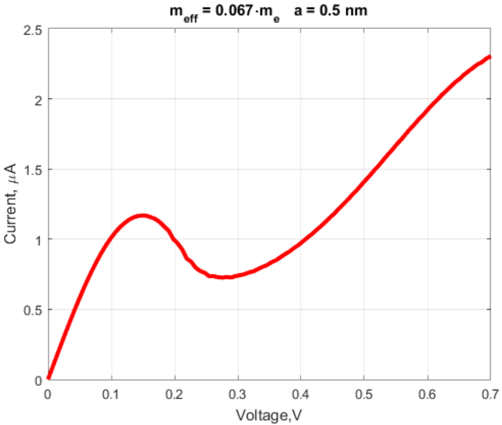


Figure: Пример полученной зависимости величины тока от напряжения в резонансно туннельной структуре методом функций Грина