

МЕТОД ПЕРЕДАТОЧНЫХ МАТРИЦ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУННЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА

В. А. Федирко^а, С. В. Поляков^б, Д. А. Зенюк^а

^аМосковский государственный технологический университет «Станкин», Москва

^бИнститут математического моделирования РАН, Москва

Развит эффективный подход для численного моделирования стационарного рассеяния и туннельного переноса в произвольном одномерном потенциале. Разработаны алгоритмы и программы, проведены тестовые расчеты. Исследована сходимость метода.

The problem of numerical simulation of steady state scattering and tunneling transfer of electrons was considered. It was analyzed for 1D potential barrier with arbitrary shape. The effective numerical approach for decision of the problem was developed on the basis of the transform matrix method. For testing of the approach the computer programs were constructed and applied to calculations of tunneling processes. In numerical experiments the convergence of the proposed method was investigated.

PACS: 12.39.Pn

1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Физические закономерности объединяют самые разнообразные явления, связанные с туннельным эффектом: α -распад и эффект Джозефсона, холодную эмиссию электронов и примесную проводимость полупроводников, низкотемпературные химические реакции и множество других. Существенную роль эффекты квантового туннелирования играют в перспективных устройствах наноэлектроники (см., например, [1]).

Точные аналитические решения для задачи туннельного переноса могут быть получены лишь для ограниченного числа потенциальных барьеров. Широко применяемое приближение Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна имеет известные ограничения и не позволяет достигать удовлетворительной точности. Кроме того, этот метод не позволяет адекватно учитывать резонансные эффекты. В связи с этим весьма актуально развитие эффективных методов численного моделирования туннельного транспорта через потенциальные барьеры произвольной формы. В настоящей работе с этой целью анализируется и развивается метод передаточных матриц [2–5].

Коэффициент туннельного переноса в одномерной геометрии определяется решением краевой задачи для соответствующего стационарного уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0, \quad x \in [0, a], \quad (1)$$

где $V(x)$ — потенциальный барьер, сосредоточенный в области $0 < x < a$. Смешанные краевые условия определяются непрерывностью волновой функции и ее первой производной на границах барьера. Коэффициент туннелирования D определяется [6] как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне. В общей постановке задачи, когда барьер нельзя считать сосредоточенным на некотором конечном интервале, волновые амплитуды определяются асимптотикой уравнения (1).

2. МЕТОД ПЕРЕДАТОЧНЫХ МАТРИЦ

Основным принципом этого метода является сегментация барьера и последующая аппроксимация функции потенциала таким образом, чтобы на каждом сегменте волновые функции имели достаточно простое аналитическое выражение [2, 3]. Наиболее приемлемыми в этом отношении являются постоянные и линейные функции.

В случае кусочно-постоянной интерполяции на каждом сегменте фундаментальное решение уравнения Шредингера представляется суперпозицией двух плоских волн. С использованием условий непрерывности волновой функции и ее первой производной и граничных условий исходная задача может быть сведена к решению следующей системы линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} 0 \\ T \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} R \\ 1 \end{pmatrix}, \quad M = \prod_{k=0}^N M_k, \quad (2)$$

где T и R — амплитуды падающей и прошедшей волн соответственно; $D = |T|^2$, M — передаточная матрица для области, содержащей барьер, получаемая путем перемножения передаточных матриц M_k в каждой точке сопряжения сегментов.

Аналогичные рассуждения можно провести для случая кусочно-линейной аппроксимации. В этом случае аналитическое решение уравнения Шредингера на сегменте будет представлять собой линейную комбинацию функций Эйри (см. [6–8]).

Рассматриваемые методы адекватно учитывают различные квантово-механические эффекты, например, резонанс проницаемости [9] при совпадении энергетического уровня частицы с уровнями связанных состояний в потенциальной яме.

В [4, 5] мы провели детальные численные исследования сходимости описанных методов. Существенным недостатком кусочно-постоянной интерполяции является нарушение сходимости в случае, когда энергетический уровень частицы совпадает с одним из значений V_j , приближающих потенциал. На примере модельной задачи о переносе через треугольный барьер продемонстрировано, что в случае $E \approx V_j$ происходит существенное ухудшение сходимости.

Недостатком подхода на основе кусочно-линейной аппроксимации является вычислительная неустойчивость для структур с медленно меняющимся в пространстве потенциалом, обусловленная экспоненциальным ростом функции Эйри второго рода [5].

Для преодоления этих проблем нами был построен гибридный алгоритм, который комбинирует аппроксимацию потенциала постоянными или линейными элементами в зависимости от геометрии потенциала. Выбор способа аппроксимации делается на основе абсолютного значения наклона касательной к графику потенциала, т. е. на основе значения dV/dx . А именно, если $dV/dx < p$, то используется кусочно-постоянная аппроксимация константами, в противном случае используется кусочно-линейная аппроксимация.

Метод был протестирован на комбинированном барьере (в безразмерных переменных):

$$V(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 0,5], \\ 1 - 0,5x, & x \in [0, 0,5]. \end{cases}$$

Использование какого-либо одного из рассмотренных методов аппроксимации для такого барьера по упомянутым выше причинам неэффективно. Таким образом, предложенный полуаналитический метод передаточных матриц для решения задачи туннельного переноса применим для потенциалов любой конфигурации и позволяет проводить вычисления с желаемой точностью. Кроме того, этот метод обладает простой алгоритмической структурой, что облегчает его программную реализацию.

3. МАТРИЧНЫЙ МЕТОД НА ОСНОВЕ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ АДАМСА

Более эффективный матричный метод может быть построен на основе неявной одношаговой схемы Адамса второго порядка аппроксимации [10]. Эквивалентной формулировкой для уравнения (1) является система (в безразмерных переменных, V_0 — высота потенциальной структуры):

$$\begin{cases} \frac{d\psi}{dx} = p, \\ \frac{dp}{dx} = -k(x)\psi, \end{cases} \quad k(x) = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}[E - V(x)], \quad 0 < x < 1. \quad (3)$$

Применяя к (3) указанный метод, получим следующие рекуррентные соотношения для определения значений искомых функций на новом слое:

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \frac{h}{2}(p_{i+1} + p_i), \quad p_{i+1} = p_i - \frac{h}{4}(k_{i+1} + k_i)(\psi_{i+1} + \psi_i).$$

Следствием этих соотношений будет матричное уравнение, связывающее значения функций $\psi(x)$ и $p(x)$ на слоях i и $i + 1$:

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{h}{2} \\ \frac{h}{4}(k_{i+1} + k_i) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ p_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{h}{2} \\ -\frac{h}{4}(k_{i+1} + k_i) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ p_i \end{pmatrix},$$

что эквивалентно

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ p_{i+1} \end{pmatrix} = Q_{i+1} \begin{pmatrix} \psi_i \\ p_i \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Тогда связь между значениями функций в граничных точках рассматриваемой области будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} \psi_N \\ p_N \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^N Q_i \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} \psi_0 \\ p_0 \end{pmatrix}.$$

С учетом граничных условий получим систему линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} T \\ ik_L T \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} 1 + R \\ ik_R(1 - R) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

которая может быть легко разрешена относительно T .

Шаг разбиения h должен быть выбран таким образом, чтобы матрица коэффициентов в правой части (4) была обратима, что приводит к условию

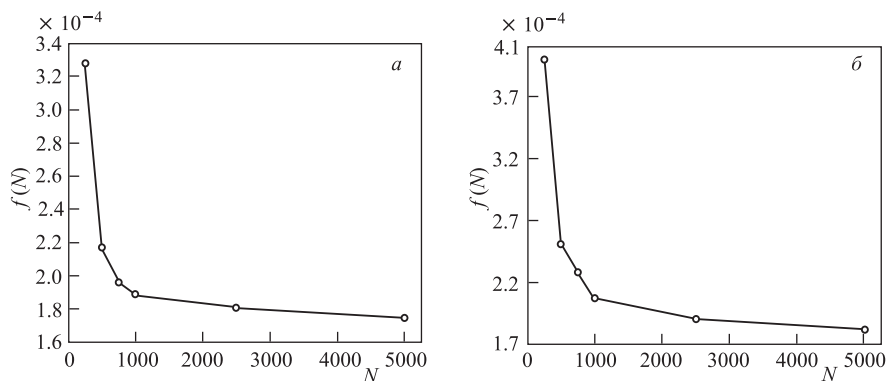
$$1 - \frac{h^2}{8}|k_{i+1} + k_i| > 0, \quad i = 0, \dots, N - 1.$$

Отметим, что предложенный метод позволяет одновременно определять как волновую функцию, так и ее производную, что позволяет использовать его при расчетах туннельного переноса методом туннельного гамильтониана Бардина [11]. Предложенный метод свободен от недостатков, присущих матричному методу на основе кусочно-постоянной или кусочно-линейной аппроксимации. Исследования показывают также, что преимуществом данного подхода перед гибридным методом является сокращение затрат вычислительных ресурсов за счет отказа от «дорогостоящих» вычислений цилиндрических функций Эйри. Так, для параболического барьера время вычисления на системе с процессором Intel Core 2 Duo 1.86 GHz в 53-битной арифметике при числе точек разбиения $N = 5 \cdot 10^3$ с помощью гибридного метода составило 100,4 с, а с помощью описанного метода Адамса — всего 5,4 с.

Численное исследование сходимости на простых барьерах (прямоугольном и трапециевидном) показало хорошую сходимость метода. Метод был протестирован также на более сложном модифицированном потенциале Пешля–Теллера:

$$V(x) = \pm \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 ax},$$

для которого известно точное аналитическое решение [6, 8]. К этой задаче можно свести, например, проблему баллистического транспорта электронов через сужающиеся каналы



Абсолютная погрешность метода для $s = 0,998$ (а), $0,676$ (б)

с размерным квантованием в структурах наноэлектроники [12]. Характер переноса электронов определяется, в основном, безразмерным параметром $s = \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 + \frac{8mV_0}{a^2\hbar^2}} - 1 \right]$.

В расчетах исследовалась зависимость нормы разности точного, $D(E)$, и численного, $D^N(E)$, решений:

$$f(N) = \|D(E) - D^N(E)\| = \max_E |D(E) - D^N(E)|$$

как функция числа точек разбиения N при различных значениях параметра s (здесь $D^N(E)$ — рассчитанное численно значение коэффициента проницаемости при заданных E и N). На рис. *a* и *б* представлены результаты исследования для рассеяния на потенциальной яме Пешля–Теллера при различных значениях параметра s . Как видно из рисунков, метод обладает достаточно хорошей сходимостью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитый матричный подход является эффективным методом моделирования стационарного туннельного переноса для широкого круга задач. Преимущество матричного метода на основе разностной схемы Адамса второго порядка состоит в сокращении затрат вычислительных ресурсов. Это весьма существенно при решении двумерных и трехмерных динамических задач: коэффициент проницаемости в каждой точке можно, как правило, рассчитывать в одномерной модели, но возникает необходимость его расчета в большом массиве точек на каждом временном слое.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №09-01-00448а) и Программы Союзного государства «СКИФ-ГРИД» (проект №209р420).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Кобаяси Н.* Введение в наноэлектронику. М.: БИНОМ, 2008.
2. *Ando Y., Itoh T.* Calculation of Transmission Tunneling Current across Arbitrary Potential Barriers // Appl. Phys. 1987. V. 61, No. 4. P. 1497–1502.
3. *Lui W., Fukuta M.* Exact Solution of the Schrödinger Equation across an Arbitrary One-Dimensional Piecewise-Linear Potential Barrier // Appl. Phys. 1986. V. 60, No. 5. P. 1555–1559.
4. *Федирко В. А., Зенюк Д. А., Поляков С. В.* Численное моделирование стационарного туннелирования электронов через потенциальный барьер // Моделирование нелинейных процессов и систем: Сб. тез. Междунар. науч. конф. М., 2008. С. 100–101.
5. *Федирко В. А., Зенюк Д. А., Поляков С. В.* Численное моделирование стационарного туннелирования электронов через потенциальный барьер // Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем / Под ред. Л. А. Уваровой. Вып. 12. Т. 1. М., 2009. С. 170–184.
6. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 2004.
7. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
8. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974.

784 Федирко В. А., Поляков С. В., Зенюк Д. А.

9. Бом Д. Квантовая теория. М.: Наука, 1965.
10. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
11. Bardeen J. Tunneling from a Many-Particle Point of View // Phys. Rev. Lett. 1961. V.6, No.2. P.57–59.
12. Fedirko V.A. et al. An Explicit Model for a Quantum Channel in 2DEG // Superlattices and Microstructures. 2002. V. 31, No. 5. P.207–217.