

Нелинейная теория когерентной генерации резонансно-туннельного диода в широком интервале частот

© В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, А.И. Подливаев

Московский государственный инженерно-физический институт (Технический университет),
115409 Москва, Россия

(Получена 25 февраля 2000 г. Принята к печати 17 мая 2000 г.)

Найдены численные решения уравнения Шредингера с открытыми граничными условиями, позволяющие описать когерентную генерацию резонансно-туннельного диода в широком интервале частоты и амплитуды полей. В линейном по полю приближении и адиабатическом пределе численные результаты совпадают с аналитическими результатами с высокой точностью. Найдена мощность генерации в зависимости от тока и параметров резонансно-туннельного диода. Показано, что в квантовом режиме возможна генерация большой мощности на частотах, превышающих ширину уровня, т. е. в терагерцовом диапазоне.

1. Введение

Высокочастотные генераторы на резонансно-туннельных диодах (РТД) считаются перспективными. В работе [1] была достигнута генерация вплоть до частот 712 ГГц. Однако широкое применение генераторов на РТД задерживается сравнительно низкими достигнутыми мощностями и частотами. Пути повышения мощности и частоты генерации остаются неясными, что связано, в частности, с проблемами теоретического описания. Несмотря на сравнительно небольшое число работ, остаются нерешенными вопросы описания зависимости мощности генерации от частоты и параметров РТД.

В работе [2] в рамках простой аналитической модели было найдено точное выражение для зависимости коэффициента усиления от частоты, но в линейном по полю приближении. В этой же работе проведен анализ полученных результатов в ранее опубликованных статьях (см. также обзор [3]).

Цель настоящей работы — описать когерентную генерацию РТД в широком интервале частот и амплитуд полей с помощью численного решения уравнения Шредингера с открытыми граничными условиями.

2. Постановка задачи. Основные уравнения. Методика численного решения

Разработанная программа позволяет в принципе рассмотреть широкий спектр моделей когерентной генерации РТД. В настоящей работе мы изучим простую модель, использованную в [2]. Это позволит провести тестирование программ, сравнение с точными аналитическими результатами [2,4], а также получить новые данные, которые наиболее просто интерпретировать.

Итак, следуя [2], рассмотрим одномерную квантовую яму (КЯ) с барьерами в виде δ -функции в точках $x = 0$ и $x = a$ (см. рис. 1). Слева ($x = -\infty$) к КЯ подводится стационарный поток электронов, пропорциональный q^2 , с энергией ε , приблизительно равной энергии резонансного уровня ε_R . В области КЯ действует переменное

электрическое поле $E(t)$ с потенциалом $v(x, t)$:

$$v(x, t) = v(x) \cos \omega t, \quad (1)$$

$$v(x) = \begin{cases} eE_0x\Theta(x), & x < a, \\ eE_0a, & x > a. \end{cases} \quad (2)$$

Волновая функция $\Psi(x, t)$ подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + [\alpha\delta(x) + \alpha\delta(x-a)]\Psi(x, t) + v(x, t)\Psi(x, t). \quad (3)$$

Переменное поле вызывает ток поляризации

$$J_c(x, t) = -\frac{ie}{\hbar} \left\{ \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \right\} \equiv J_c(x) \cos \omega t + \sum_{k=2} J_k \cos k\omega t. \quad (4)$$

Приведенный ток вычисляется согласно [5] как

$$J_c = \frac{1}{a} \int_0^a J_c(x) dx. \quad (5)$$

Граничные условия к уравнению получим, следуя [2]. В предположении малости частоты ω и амплитуды по-

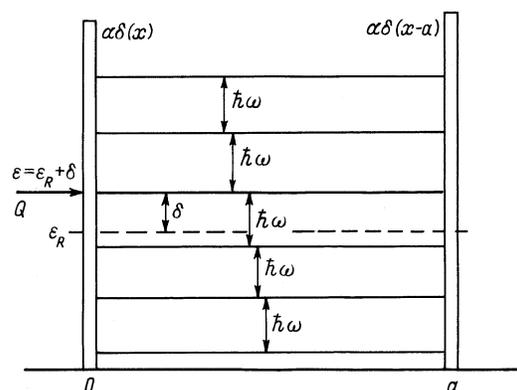


Рис. 1. Квантовая структура с δ -барьерами в точках $x = 0$ и $x = a$.

тенциала eEa по сравнению с энергией электрона ε_R получим

$$\Psi(0, t) \left(1 - \frac{\alpha}{ip}\right) + \frac{\Psi'(0, t)}{ip} = q \exp\left(-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}\right),$$

$$\Psi(a, t) \left(1 - \frac{\alpha}{ip}\right) - \frac{\Psi'(a, t)}{ip} = 0, \quad p^2 = \varepsilon. \quad (6)$$

Граничное условие (6) описывает поток электронов слева, пропорциональный q^2 , их отражение и уход в область $x > a$. Следует отметить, что параметры КЯ выбираются так, чтобы полуширина резонансного уровня Γ была мала по сравнению с ε_R .

Основным фактором, определяющим накопление ошибки численного решения задачи (1), является наличие двух процессов, протекающих с принципиально различными характерными временами — временем изменения фазы волновой функции и временем изменения внешнего потенциала. В нашем алгоритме задача нормализуется следующей заменой искомой волновой функции Ψ на функцию φ : $\Psi(x, t) = \varphi(x, t) \exp(-i\varepsilon t/\hbar)$. Решение задачи для φ ищется методом прогонки (стандартным методом решения уравнения Шредингера [6]) на дискретной сетке с шагом по координате $dx = L/500$ и шагом по времени $dt \approx 2\pi/200\omega$.

3. Линейная теория когерентной генерации

В [2] было найдено решение уравнения (3) с граничными условиями (6) в линейном по полю приближении, а также выражение для тока J_c

$$\tilde{J}_c(\omega, \delta) = \frac{4J_c}{e^2 E a Q}$$

$$= -\frac{\delta \Gamma^2}{[(\delta - \omega)^2 + \Gamma^2][(\delta + \omega)^2 + \Gamma^2]}, \quad (7)$$

$$\delta = \varepsilon - \varepsilon_R, \quad \Gamma = \frac{4p^3}{\alpha^2 a}, \quad Q = q^2 p.$$

Здесь Γ — полуширина резонансного уровня, Q — ток накачки моноэнергетических электронов. С помощью (7) в [2] был сделан анализ зависимости коэффициента усиления (поглощения) \tilde{J}_c от частоты и расстройки δ . Было показано, что в зависимости от отношения δ/Γ возможны два режима генерации: классический и квантовый. При $\delta/\Gamma < 1$ (классический режим) \tilde{J}_c имеет максимум при $\omega = 0$, причем наибольшее усиление достигается, если $\delta = \Gamma/\sqrt{3}$ (см. рис. 2). В квантовом режиме ($\delta/\Gamma > 1$) усиление максимально при частоте (рис. 2)

$$\omega_m^2 = \delta^2 - \Gamma^2. \quad (8)$$

Новый максимум \tilde{J}_c соответствует квазирезонансным переходам между состояниями ε_R и ε , так как при $\omega \gg \Gamma$ равенство (8) дает условие "квазирезонанса" $\omega = \varepsilon - \varepsilon_R$.

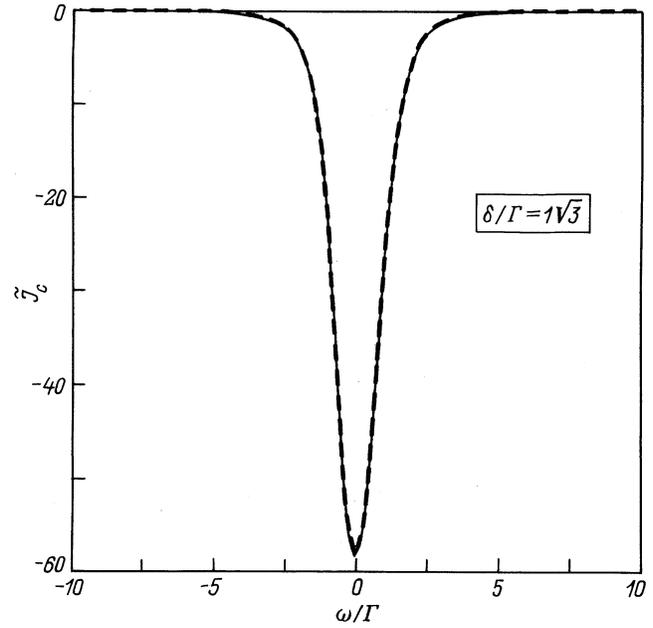


Рис. 2. Зависимость динамической проводимости J_c/eEa от частоты при оптимальном режиме генерации. Сплошная линия — численный расчет, штриховая — аналитическая теория.

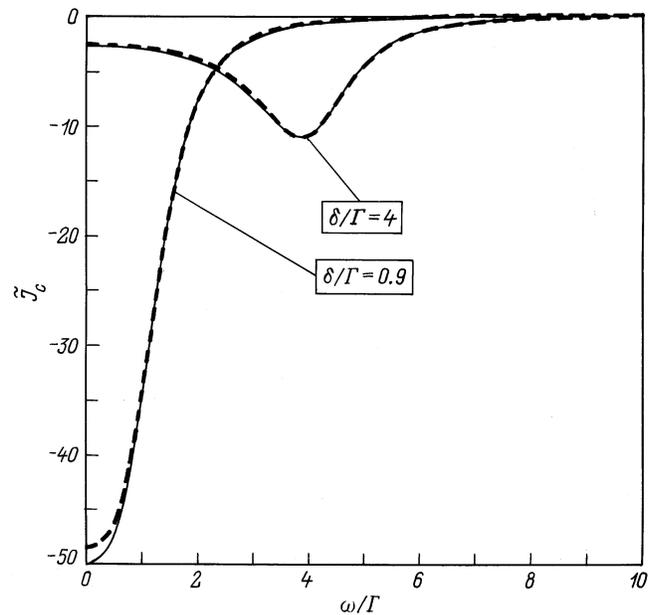


Рис. 3. Зависимость динамической проводимости J_c/eEa от частоты при квантовом и классическом режиме генерации. Сплошная линия — численный расчет, штриховая — аналитическая теория.

Следовательно, если выбрать расстройку $\delta = \omega \gg \Gamma$, т. е. вне области максимальной отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП), то возможна генерация на частоте, превосходящей Γ . На рис. 2 и 3 приведены зависимости $\tilde{J}_c(\omega/\Gamma)$ для $\delta = 4\Gamma$, $\delta = 0.9\Gamma$ и $\delta = (1/\sqrt{3})\Gamma$, найденные аналитически с помощью (7) и численно.

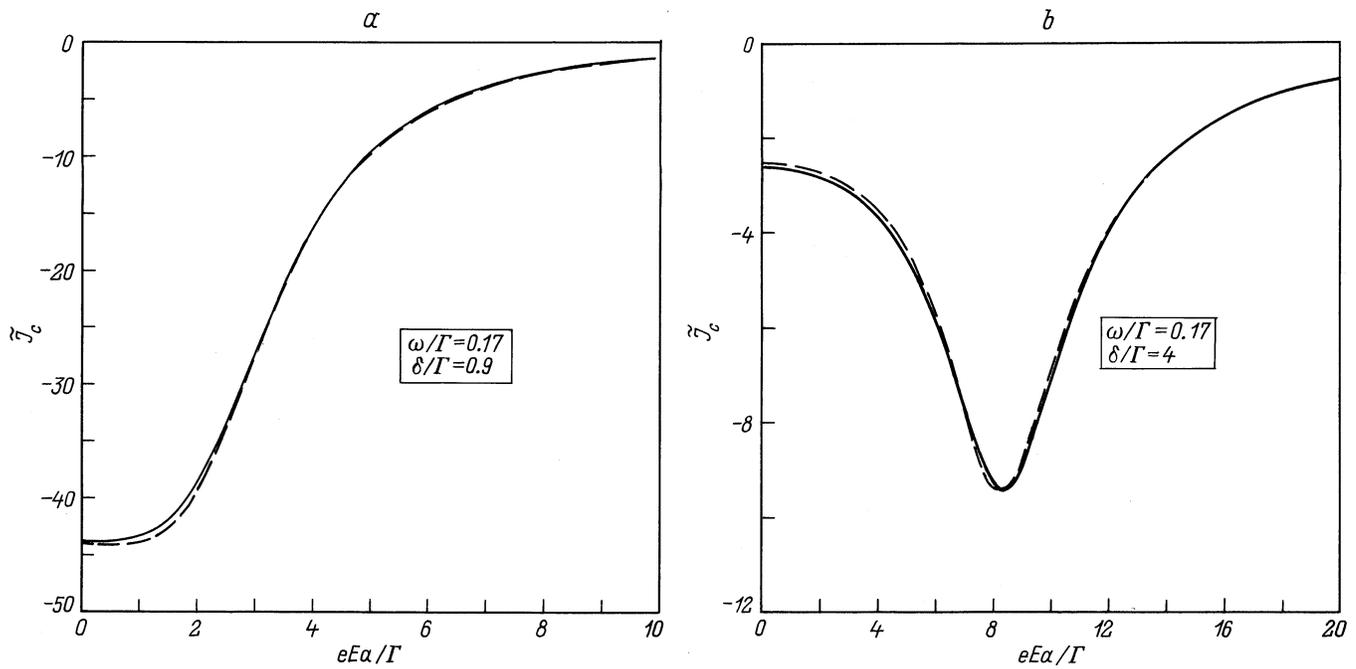


Рис. 4. Зависимость динамической проводимости J_c/eEa от амплитуды переменного электрического поля: *a* — при классическом режиме генерации, *b* — при квантовом режиме генерации. Сплошная линия — численное решение, штриховая линия — аналитическое решение.

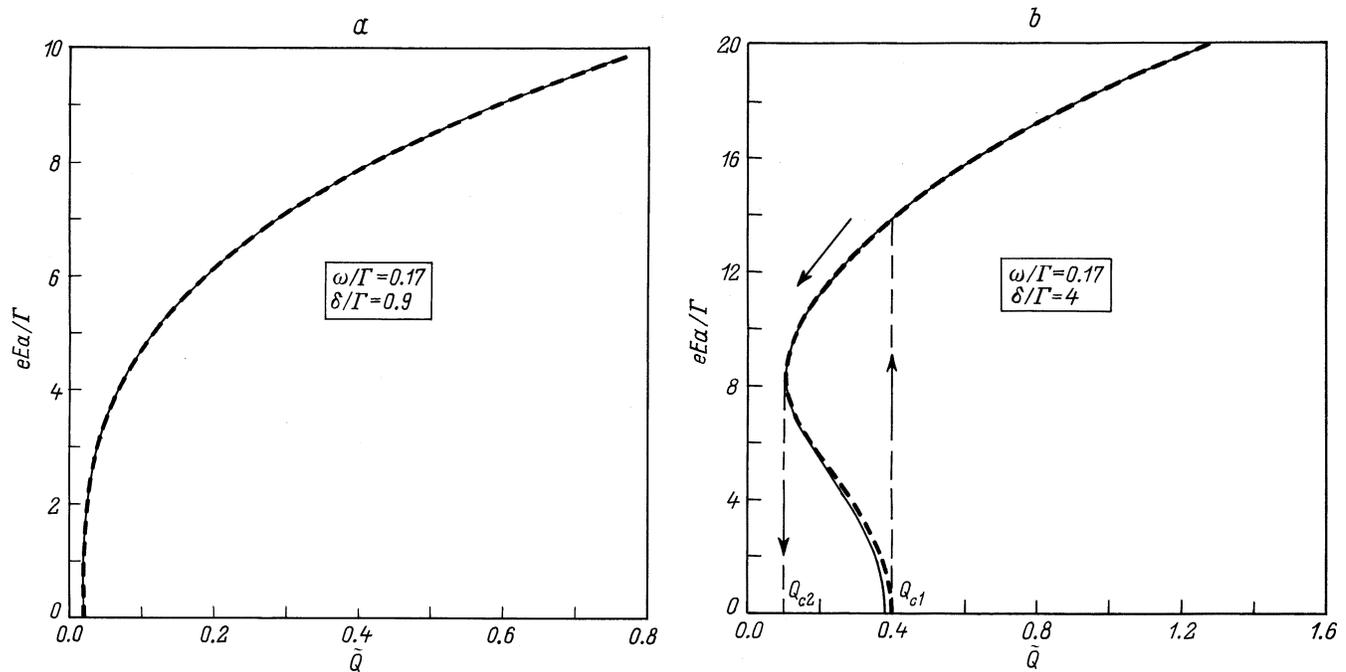


Рис. 5. Зависимость генерируемого поля eEa/Γ от безразмерного тока накачки \tilde{Q} : *a* — при классическом режиме генерации, *b* — при квантовом режиме генерации. Q_{c1} и Q_{c2} — токи возникновения и срыва генерации соответственно. Сплошная линия — численное решение, штриховая — аналитическое решение.

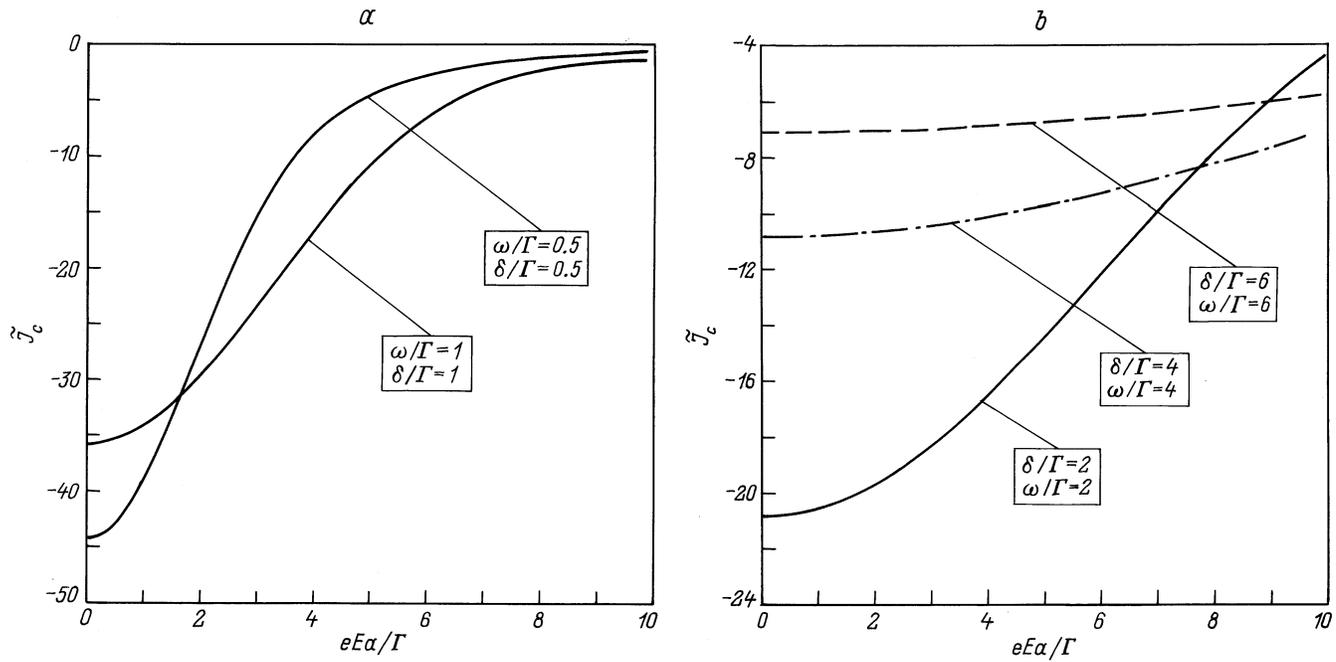


Рис. 6. Зависимость динамической проводимости J_c/eEa от амплитуды переменного электрического поля: a — при классическом режиме генерации, b — при квантовом режиме генерации.

Нетрудно видеть, что аналитические и численные результаты совпадают с высокой точностью. Сравнение было выполнено также для целого ряда других зависимостей. Оно продемонстрировало отличное согласие. Очевидно, можно считать совпадение результатов хорошим тестом правильности численной программы.

4. Нелинейная теория генерации в адиабатическом пределе

В работе [4] одного из авторов удалось построить нелинейную теорию когерентной генерации РТД в адиабатическом пределе $\omega \ll \Gamma$. В этом случае усиление \tilde{J}_c имеет вид [4]

$$\tilde{J}_c = -\frac{\Gamma}{\sqrt{2}\tilde{E}^2} \frac{\sqrt{\sqrt{x^2+y^2}-x}}{\sqrt{x^2+y^2}}, \quad (9)$$

где

$$x = 1 + \frac{\tilde{E}^2(\Gamma^2 - \delta^2)}{(\Gamma^2 + \delta^2)^2}, \quad y = \frac{2\delta\Gamma\tilde{E}^2}{(\Gamma^2 + \delta^2)^2}, \quad \tilde{E} = \frac{eEa}{2}. \quad (10)$$

Зависимости \tilde{J}_c от безразмерного поля eEa/Γ изображены на рис. 4, a ($\delta = 0.9\Gamma$) и b ($\delta = 4\Gamma$). Видно, что ход зависимости \tilde{J}_c принципиально различается для классического ($\delta/\Gamma < 1$) и квантового ($\delta/\Gamma > 1$) режимов. В первом случае усиление монотонно падает с ростом поля. В квантовом режиме вначале наблюдается рост \tilde{J}_c , а после достижения максимума — падение усиления. Такое поведение приводит к радикальным особенностям генерации РТД в квантовом режиме (см. далее).

Для нахождения поля генерации РТД нужно выражение для тока (9) подставить в уравнение для поля (см. [2,4]):

$$\frac{E_0}{\tau_0} = \frac{4\pi\tau}{\chi} J_c, \quad (11)$$

где τ_0 — время, характеризующее потери в резонаторе, χ — диэлектрическая проницаемость.

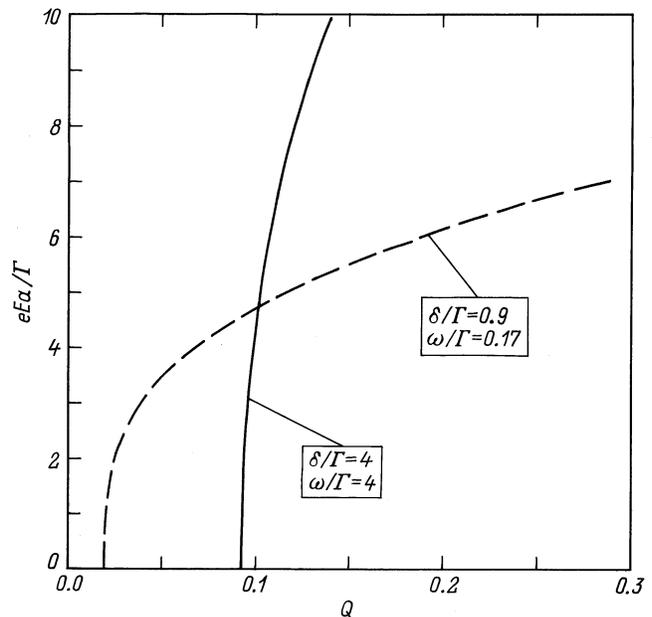


Рис. 7. Зависимость поля, при котором существует генерация, от тока накачки.

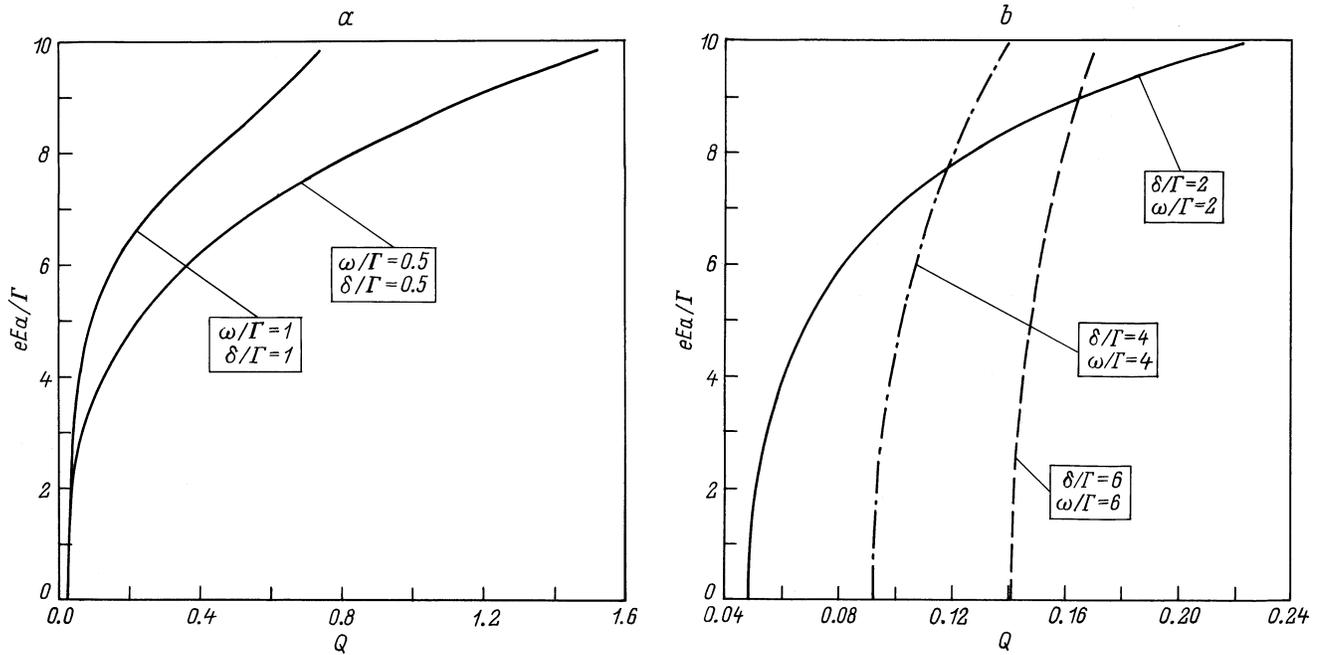


Рис. 8. Зависимость поля, при котором существует генерация, от тока накачки. *a* — при малых значениях частоты и параметра расстройки, *b* — при больших значениях частоты и параметра расстройки.

Уравнение (11) дает возможность найти поле (и мощность) генерации в зависимости от $\tilde{Q} = -1/\tilde{J}_c$, $\tilde{Q} = 4\pi\tau_0eaQ/\chi$ и параметров РТД. На рис. 5, *a* ($\delta = 0.9\Gamma$) и 5, *b* ($\delta = 4\Gamma$) приведена зависимость eEa/Γ от \tilde{Q} . Видно, что в классическом случае РТД проявляется мягкий режим генерации. Если $\delta/\Gamma > 1$, то наблюдается жесткий режим, когда генерация начинается скачком при некотором критическом значении Q_{c1} . При уменьшении \tilde{Q} генерация срывается при $Q_{c2} < Q_{c1}$, т.е. имеет место гистерезис. На рис. 4, 5 приведены также результаты численных решений для адиабатического предела при $\omega = 0.17\Gamma$. Видим снова совпадение аналитических и численных зависимостей с высокой точностью, демонстрирующей правильность программы и в нелинейной теории.

5. Нелинейная теория генерации в широком интервале частот

В наиболее интересном интервале частот $\Gamma \leq \omega \ll \epsilon_R$ нам неизвестны как аналитические, так и численные данные о зависимости усиления \tilde{J}_c от амплитуды поля. Разработанная нами программа позволяет получить эти данные. На рис. 6, *a* и *b* приведены типичные зависимости усиления \tilde{J}_c от поля при добавочном условии квазирезонанса $\delta = \omega$. Видны две особенности этого набора кривых. Во-первых, монотонное падение \tilde{J}_c с полем. Во-вторых, скорость падения усиления с полем уменьшается с ростом частоты. Отмеченный принципиальный результат означает, что в квантовом режиме при выполнении условия квазирезонанса достигаются гораздо большие поля, чем в классическом режиме. Это

отчетливо следует из рис. 7. Действительно, видно, что при $Q \geq 0.1$ поле в квантовом режиме ($\delta = \omega = 4\Gamma$) значительно превосходит поле в классическом режиме ($\delta = 0.9\Gamma$, $\omega = 0.17\Gamma$). Таким образом, квантовый режим позволяет получать большие мощности на высоких частотах. Зависимости поля от Q для широкого набора параметров приведены на рис. 8, *a* и *b*. Их анализ позволяет провести оптимизацию режимов генерации,

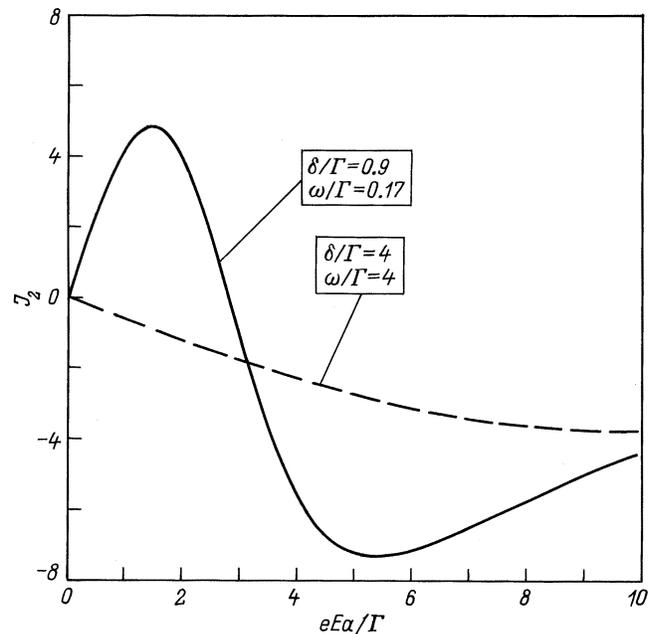


Рис. 9. Зависимость второй гармоники тока от амплитуды поля.

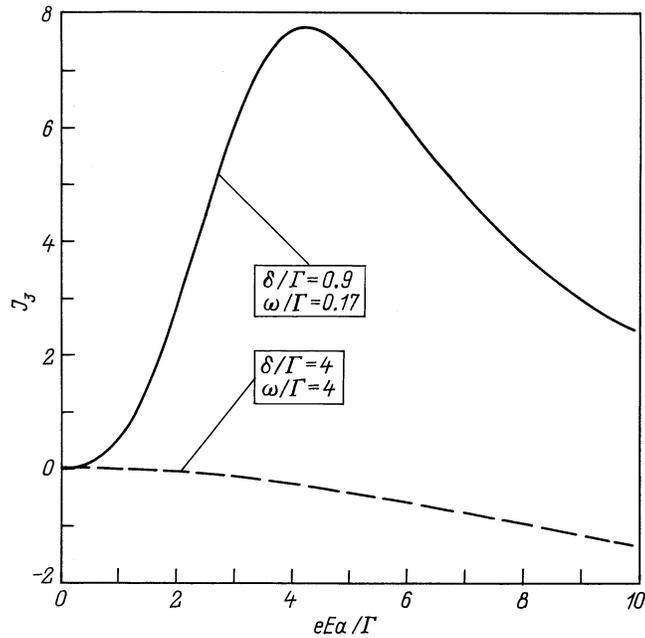


Рис. 10. Зависимость третьей гармоники тока от амплитуды поля.

находя наиболее подходящие соотношения между порогом, полем и частотой генерации.

6. Поведение высших гармоник

Из-за присущей РТД нелинейности возможна генерация высших гармоник, т.е. появление токов, изменяющихся с частотами, кратными $k\omega$, $k = 2, 3 \dots$. Представляется интересным рассчитать величину и знак соответствующих токов.

На рис. 9 и 10 приведены зависимости второй (J_2) и третьей (J_3) гармоник от поля для набора параметров. Интересно отметить, что ток J_3 для низкой частоты всегда положителен, в то время как J_2 изменяет знак с полем и становится отрицательным. На рисунках отложены также аналитические результаты для адиабатического предела [4]. В квантовом режиме J_2 и J_3 отрицательны, но невелики по абсолютной величине.

7. Заключение

Таким образом, разработанная программа решения уравнения Шредингера с открытыми граничными условиями позволила описать когерентную генерацию РТД в широком интервале частоты и амплитуды полей. В линейном приближении и адиабатическом пределе численные результаты совпадают с высокой точностью с точными аналитическими результатами работ [2,4]. В нелинейном приближении и для широкого интервала частот получены новые данные, позволяющие установить зависимость поля генерации от тока и параметров РТД.

Важный вывод состоит в том, что в квантовом режиме возможна генерация большой мощности на частотах, превышающих ширину уровня, т.е. в терагерцовом диапазоне.

Программа допускает обобщение на более реалистичные модели, учитывающие, в частности, реальные барьеры, энергетическое распределение электронов, эффекты накопления заряда, учет постоянного внешнего поля и др.

Авторы благодарны Ю.В. Копаеву за полезное обсуждение работы. Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы "Интеграция" (проект № АО133) и при поддержке Министерства науки РФ, программа "Физика твердотельных наноструктур" (проект № 99-1140).

Приложение

Калибровка на модельной задаче

Программа проверялась сравнением численных результатов с точным аналитическим решением модельной задачи с потенциалом $v(x, t)$. Пусть потенциал $v(x, t)$ имеет следующий вид:

$$v(x, t) = \begin{cases} \frac{U_1 + U_2}{U_3}, & x \in (0, L), \\ 0, & x \notin (0, L), \end{cases} \quad (\text{П1})$$

где

$$U_1 = i\hbar \left\{ \frac{dB}{dt} \cos^2 \left(\frac{\pi x}{2L} \right) \exp(-ikx) + \frac{dC}{dt} \sin^2 \left(\frac{\pi x}{2L} \right) \exp(ikx) \right\},$$

$$U_2 = \frac{\hbar^2 \pi}{2m^* L} \left\{ \left(\frac{\partial \psi_2}{\partial t} - \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \right) \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) + \frac{\pi}{2L} (\psi_2 - \psi_1) \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right\},$$

$$U_3 = \psi_1 \cos^2 \left(\frac{\pi x}{2L} \right) + \psi_2 \sin^2 \left(\frac{\pi x}{2L} \right),$$

$$C(t) = \frac{A}{2} [1 + \cos^2(\omega_0 t) \exp(-\omega_0 t)],$$

$$B(t) = A - C(t),$$

$$\psi_1 = A \exp(ikx) + B(t) \exp(-ikx),$$

$$\psi_2 = C(t) \exp(ikx), \quad \psi_0(x) = A \exp(ikx),$$

$$k = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}}, \quad A = 1,$$

$$E = 82 \text{ мэВ}, \quad L = 40 \text{ \AA}, \quad m^* = 0.042 m_e,$$

где m_e — масса свободного электрона. Решение уравнения (3) с потенциалом (П1) при $\psi_0(x) = A \exp(ikx)$

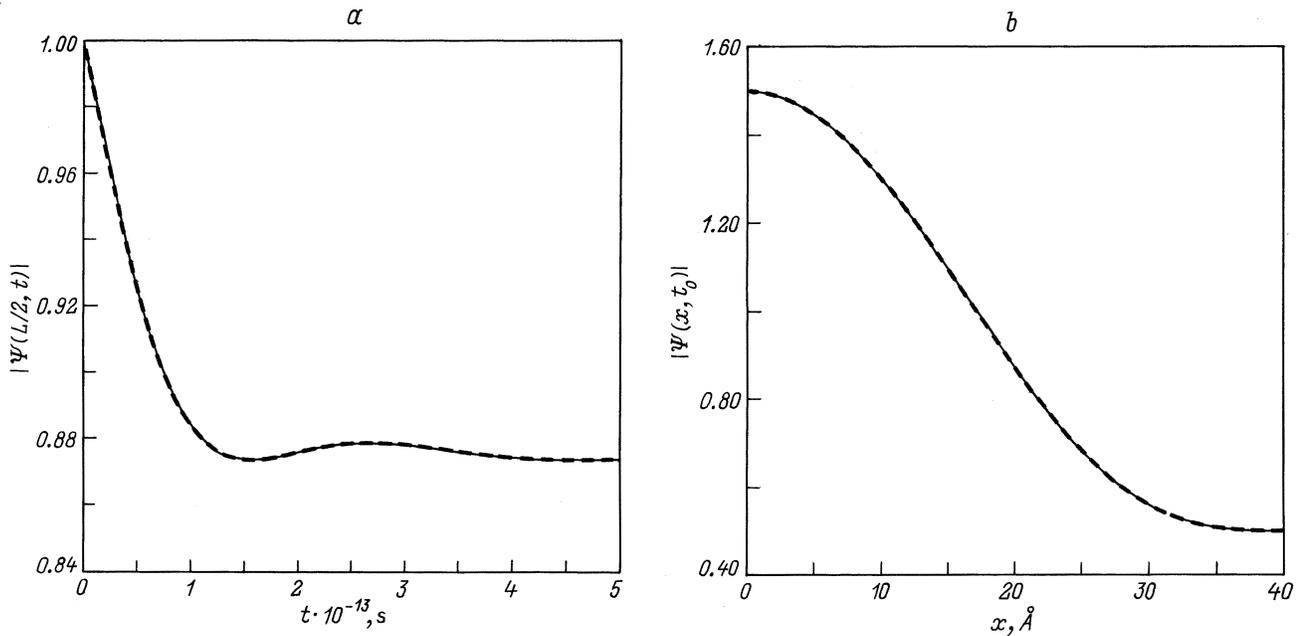


Рис. 11. Зависимость модуля волновой функции $|\Psi|$ от времени t (a) и координаты x (b) ($t_0 = 5 \cdot 10^{13}$ с — время, при котором δ максимально) для $\omega = 10^{13}$ Гц ($\delta_{\max} = 3 \cdot 10^{-3}$). Штриховая линия — численный расчет, сплошная — аналитическая теория.

определяется следующим выражением:

$$\Psi_{\text{teor}}(x, t) = \begin{cases} \psi_1 \exp(-i\omega t), & x < 0, \\ \left[\psi_1 \cos^2(\pi x/2L) + \psi_2 \sin^2(\pi x/2L) \right] \exp(-i\omega t), & 0 \leq x \leq L, \\ \psi_2 \exp(-i\omega t), & x > L, \end{cases}$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Аналитически и численно определенные зависимости модуля волновой функции $|\Psi|$ от времени t и координаты x при разной величине ω_0 изображены на рис. 11. Из рисунка следует достаточно высокая точность решения задачи. Погрешность численного решения определяется параметром

$$\delta = \frac{\int_0^L |\Psi_{\text{teor}} - \Psi_{\text{numer}}| dx}{\int_0^L |\Psi_{\text{teor}}| dx}$$

и при данном расчете не превышает величины $3 \cdot 10^{-3}$.

Список литературы

[1] E.R. Brown, T.C.L.G. Sollner, C.D. Parker et al. Appl. Phys. Lett., **55**, 1777 (1989); E.R. Brown, J.R. Södestrom, C.D. Parker et al. Appl. Phys. Lett., **58**, 2291 (1991).
 [2] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **116**, 704 (1999).
 [3] H.C. Liu, T.C.L.G. Sollner. Semicond. Semimet., **41**, 359 (1994).

[4] V.F. Elesin. Phys. Low-Dim. Structur. (1999) (в печати).
 [5] В.И. Сафоров. Радиоприемные устройства (М., Наука, 1954).
 [6] А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений (М., Наука, 1978) с. 83.

Редактор В.В. Чалдышев

A nonlinear theory of a coherent generation in the resonant tunneling diodes within a broad frequency range

V.F. Elesin, I.Yu. Kateev, A.I. Podlivaev

Moscow State Engineering-Physics Institute (Technical University),
 115409 Moscow, Russia

Abstract We have found a numerical solution to the Schrödinger equation with open boundary conditions, which makes it possible to describe coherent generation in resonant-tunneling diodes in a broad interval of frequencies and field amplitudes. Within the linear field area approximation results obtained coincide with a high degree of accuracy with analytical results. The power of generation is calculated as a function of the current and other parameters of the resonant-tunneling diode. It is demonstrated that the high-power generation is possible in the quantum regime at frequencies exceeding the level width, i. e. within the THz range.