

Высокочастотный нелинейный отклик двухъямных наноструктур

© В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев

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

(Получена 2 ноября 2004 г. Принята к печати 19 января 2005 г.)

Развита теория нелинейного высокочастотного отклика для двухъямной наноструктуры в постоянном электрическом поле. Такая структура является простейшей на пути от одноямной (резонансно-туннельный диод — РТД) к сверхрешетке с однозонной „штарковской лестницей“. В работе с помощью численного решения уравнения Шредингера найден ток поляризации в широком интервале частот и полей (включая сильные поля) для модельных и реальных структур. Показано, что отклик двухъямной наноструктуры значительно превосходит (на 1–2 порядка) отклик резонансно-туннельного диода. Предсказывается новый оптимальный режим генерации, аналогичный режиму в когерентном лазере на межуровневых переходах.

1. Введение

Использование резонансного туннелирования в лазерах на наноструктурах, интегральных схемах и логических элементах является исключительно перспективным [1–3]. Принципиально новые возможности появляются, если реализуются условия когерентного туннелирования. В качестве примера можно указать когерентные лазеры [4], не требующие инверсной населенности, генераторы на двухзонной „штарковской лестнице“ [5], способные обеспечивать объемную генерацию.

Современный уровень технологии уже обеспечивает когерентность на достаточно больших длинах (до десятка квантовых ям [6]). Кроме того, простое условие когерентного туннелирования $\tau_T < \tau_{ph}$ ($\tau_T = \hbar/\Gamma$, Γ — ширина уровня, τ_{ph} — время разрушения когерентности) может быть слишком жестким. Действительно, как показывает детальная теория, электрон-фононное взаимодействие не влияет при определенных условиях на затухание блоховских осцилляций [7], а резонансное туннелирование остается когерентным даже при $\tau_T \gg \tau_{ph}$ [8]. Следовательно, представляется интересным изучить возможности создания генераторов и физику явлений в них в условиях когерентного туннелирования.

Цель настоящей работы — разработать теорию нелинейного высокочастотного отклика для двухъямной наноструктуры (ДНС) в постоянном электрическом поле. Такую структуру можно рассматривать как простейшую на пути от одноямной (РТД — резонансно-туннельный диод) к сверхрешетке с однозонной „штарковской лестницей“. Кроме того, ДНС представляет самостоятельный интерес. Во-первых, проявляются принципиально новые черты, обусловленные расщеплением уровней и межъямной интерференцией. Во-вторых, высокочастотный отклик, обусловленный переходами между уровнями, может значительно превосходить отклик в РТД [9,10], что делает ДНС весьма перспективными для создания генераторов в терагерцовом диапазоне.

В работе [10] была развита аналитическая теория линейного отклика для ДНС в рамках модели, использованной ранее в [11]. Были получены простые выражения

для коэффициента прохождения и усредненного тока поляризации.

В данной работе с помощью численного решения уравнений теории [10] найден ток поляризации для сильных полей в широком интервале частот и параметров структуры (в частности, для реальных структур квантовых ям).

Результаты согласуются с хорошей точностью с аналитическими для слабого поля и предсказывают новые эффекты в области сильного поля. Они также дают возможность расчета мощности генерации на ДНС.

2. Постановка задачи и методика численного решения

Следуя [10], рассмотрим структуру, состоящую из двух одинаковых квантовых ям шириной a с δ -барьерами мощностью α , к которой приложено постоянное электрическое поле V_{dc} (рис. 1). Слева к структуре подводится стационарный поток электронов с энергией ϵ и ам-

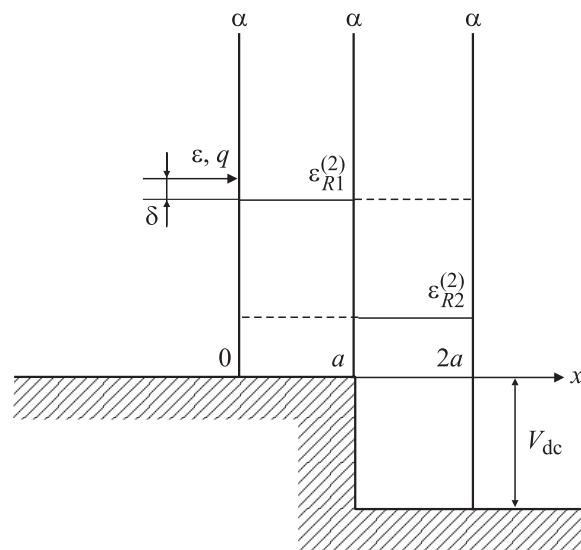


Рис. 1. Двухъямная наноструктура с приложенным напряжением V_{dc} .

плитудой q . В области структуры действует переменное электрическое поле E с потенциалом $V(x, t)$:

$$V(x, t) = U(x) \cos \omega t,$$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ -eEx, & 0 \leq x \leq 2a \\ -2eEa = -V_{ac}, & x > 2a, \end{cases}$$

где e — заряд электрона, а ω — частота внешнего поля.

Волновая функция электрона $\Psi(x, t)$ удовлетворяет одномерному нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \alpha [\delta(x) + \delta(x-a) + \delta(x-2a)] \Psi + [V(x, t) - V_{dc} \Theta(x-a)] \Psi. \quad (1)$$

Здесь Θ — единичная функция Хевисайда, m^* — эффективная масса электрона в структуре. Граничные условия к уравнению Шредингера (1) запишем следующим образом:

$$\begin{cases} \Psi(0, t) \left(1 - \frac{\alpha}{ip}\right) + \frac{1}{ip} \frac{\partial \Psi(0, t)}{\partial x} = 2q \exp\left(-\frac{i\epsilon t}{\hbar}\right), \\ \Psi(2a, t) \left(1 - \frac{\alpha}{ip_1}\right) - \frac{1}{ip_1} \frac{\partial \Psi(2a, t)}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

где

$$p = \sqrt{\frac{2m^* \epsilon}{\hbar^2}} \quad \text{и} \quad p_1 = \sqrt{\frac{2m^* (\epsilon + V_{dc})}{\hbar^2}}$$

— волновые вектора электрона слева и справа от структуры соответственно.

Приведенный ток n -й ямы J_n дается следующим выражением:

$$J_n(t) = \frac{e\hbar}{2m^*} \frac{1}{a} \int_{a(n-1)}^{an} dx \operatorname{Im} \left\{ \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right\},$$

где $n = 1, 2$. Под действием переменного электрического поля в структуре возникают активный J_c , т.е. синфазный с внешним полем, и реактивный J_s токи поляризации. Активный ток (усиление) можно рассчитать, используя формулу

$$J_{nc} = \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt J_n(t) \cos(\omega t). \quad (3)$$

В дальнейшем полагаем $\hbar = 2m^* = q = 1$.

Для численного решения уравнения (1) возьмем дискретную прямоугольную сетку с фиксированными шагами по координате $dx = 2a/(N_x - 1)$ и по времени dt (N_x — количество координатных узлов в сетке) и воспользуемся методом конечных разностей [12]. Тогда для каждого фиксированного временного слоя j решение

задачи сводится к решению матричного уравнения

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{ipdx} & \frac{1}{ipdx} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{1}{dx^2} & A_2 & \frac{1}{dx^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \frac{1}{dx^2} & A_k & \frac{1}{dx^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 - \frac{1}{ip_1 dx} & \frac{1}{ip_1 dx} \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} \Psi(1, j) \\ \Psi(2, j) \\ \dots \\ \Psi(k, j) \\ \dots \\ \Psi(1, N_x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(1, j) \\ f(2, j) \\ \dots \\ f(k, j) \\ \dots \\ f(N_x, j) \end{pmatrix},$$

$$f(k, j) = \Psi(k, j-1) \left[\frac{2i}{dt} + U(k, j-1) - \epsilon \right]$$

$$- \frac{\Psi(k-1, j-1) - 2\Psi(k, j-1) + \Psi(k+1, j-1)}{dx^2},$$

где $\Psi(k, j)$ — искомая волновая функция, $U(k, j) = V_{ac}(k, j) + V_{dc}(k)$ — известные величины потенциала в узлах сетки по координате k и по времени j , $i = \sqrt{-1}$.

Символами A_2, A_k обозначены элементы матрицы:

$$A_2 = \frac{2i}{dt} - \frac{2}{dx^2} + \epsilon - U(2, j) - \frac{\alpha}{dx},$$

$$A_k = \frac{2i}{dt} - \frac{2}{dx^2} + \epsilon - U(k, j) - \frac{\alpha}{dx}.$$

Решение данного матричного уравнения ищется методом прогонки [12]. Найдя таким способом функции $\Psi(k, j)$, переходим к следующему временному слою $j+1$ и т.д., получая решение задачи (1), (2). Симметричная шеститочечная схема Кранка–Николсона [13] дает высокую точность решения в широком интервале частот внешнего поля.

Для расчета была выбрана структура с барьерами мощностью $\alpha = 5, 10, 15$ и ямами с шириной $a = 2\pi$. Для изолированной ямы и $\alpha = 10$ энергия основного резонансного уровня $\epsilon_R^{(1)} \approx 0.235$, а его полуширина (затухание) $\Gamma^{(1)} \approx 7 \cdot 10^{-4}$.

3. Энергетический спектр и коэффициент прохождения

Энергию и ширину резонансных уровней можно искать непосредственно из зависимости коэффициента прохождения T от энергии электрона ϵ (рис. 2). Видно, что T имеет два пика с энергиями $\epsilon_{R1}^{(2)} \approx 0.228$ и $\epsilon_{R2}^{(2)} \approx 0.242$ и ширинами $\Gamma_1^{(2)} = 3.3 \cdot 10^{-4}$ и $\Gamma_2^{(2)} = \Gamma = 3.7 \cdot 10^{-4}$ (при $V_{dc} = 0$). Расстояние между пиками растет с увеличением V_{dc} . Отсюда находим

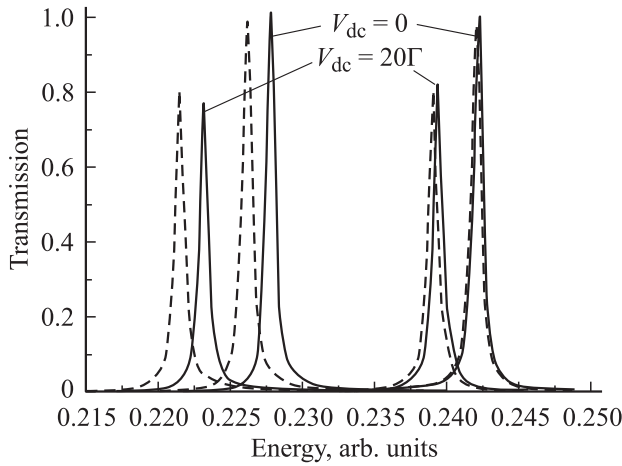


Рис. 2. Зависимости коэффициента прохождения T от энергии налетающих электронов ε при $V_{ac} = 0$. Сплошная линия — численное решение, штриховая линия — аналитический результат.

энергетический спектр структуры. Отметим, что величина $\varepsilon_{R1}^{(2)}$ уменьшается с ростом V_{dc} , а $\varepsilon_{R2}^{(2)}$ остается практически неизменной. Коэффициент прохождения T на резонансных уровнях при этом падает, а величины $\Gamma_1^{(2)}$ и $\Gamma_2^{(2)}$ почти не изменяются. Все эти результаты хорошо согласуются с соответствующими аналитическими расчетами [10]. В частности, на рис. 2 проведено сравнение для коэффициента прохождения $T(\varepsilon)$. Небольшое расхождение связано с тем, что сравнение ведется с аналитической формулой, в которой опущены квадратичные поправки по параметру p/α .

4. Лине́йный отклик двухъямной структуры

Вначале найдем токи в первой J_{1c} и второй J_{2c} ямах в слабом поле $V_{ac} \ll \Gamma$ при $\varepsilon = \varepsilon_{R2}^{(2)}$ в зависимости от параметров структуры, а также от частоты ω и напряжения V_{dc} . Это позволит нам также провести сравнение с аналитическими результатами [10]. На рис. 3 приведены зависимости J_{1c}/V_{ac} (отклика) от ω при различных напряжениях V_{dc} для усредненного тока первой ямы J_{1c} (ток второй ямы практически совпадает с током первой ямы). Видно, что отклик имеет резкий пик при определенных частотах ω_m , которые примерно равны расстоянию между резонансными уровнями (ср. с зависимостью коэффициента прохождения от энергии на рис. 2). Значение отклика в пике вначале растет с напряжением, достигая максимума при $V_{dc} \approx 20\Gamma$, а затем падает.

Следует особо отметить, что величина отклика в пике значительно превосходит отклик в РТД (см. [14]). Вычисление отклика для различных значений α/p показывает, что он растет пропорционально $(\alpha/p)^3$.

Все перечисленные результаты хорошо согласуются с аналитическими [10], включая зависимость отклика от напряжения V_{dc} . Отсюда, в частности, можно сделать вывод о правильности работы численной программы.

5. Нелинейный отклик двухъямной структуры

Для расчета мощности генерации необходимо найти ток при больших полях, т.е. при $V_{ac} > \Gamma$. Типичные результаты расчета приведены на рис. 4 для различных V_{dc} при частотах $\omega = \omega_m$. Видим, что J_{1c} имеет максимум по абсолютной величине при определенных значениях V_{ac}^m , который сдвигается с ростом V_{dc} . При этом значение тока в максимуме увеличивается. Полученные зависимости J_{1c} от величины переменного поля V_{ac} позволяют найти мощность генерации, пользуясь, например, методом, использованным в [4,14]. Анализ показывает,

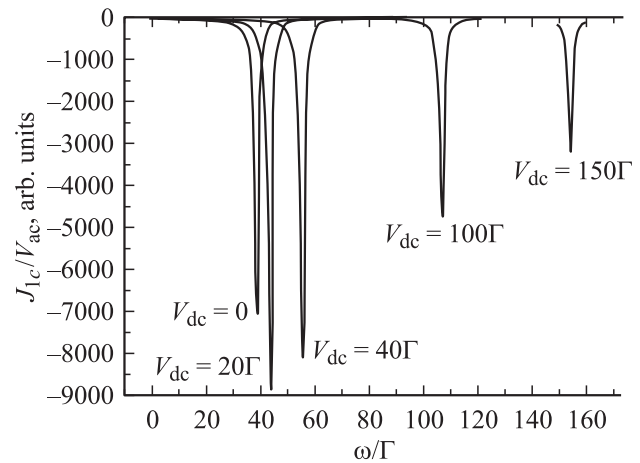


Рис. 3. Зависимости линейного отклика первой ямы J_{1c}/V_{ac} от частоты ω при $V_{ac} = 0.01\Gamma$ для различных значений V_{dc} .

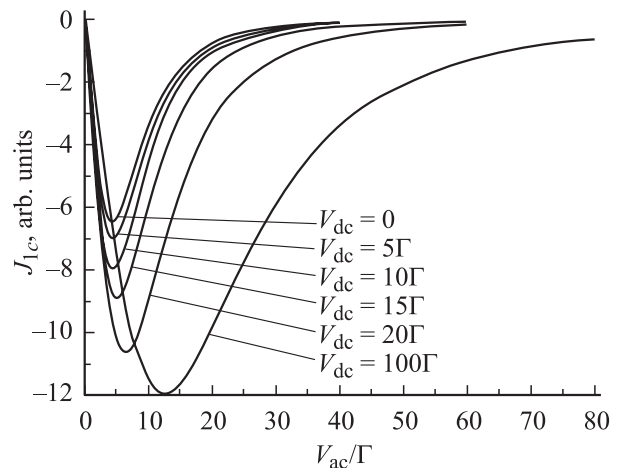


Рис. 4. Зависимости тока поляризации J_{1c} от амплитуды переменного электрического поля V_{ac} для различных значений V_{dc} при частотах $\omega = \omega_m$.

что мощность генерации может достигать значительных величин, особенно для больших напряжений смещения V_{dc} . Если учесть, что варьирование напряжения V_{dc} изменяет и резонансную частоту, то следует сделать вывод о перспективности ДНС для создания генераторов в терагерцовом диапазоне.

Поскольку в ДНС излучательные переходы идут между двумя уровнями, то генерация должна иметь „лазерный“ характер, причем частота генерации мала по сравнению с частотой перехода между резонансными уровнями одной ямы. Поэтому следует ожидать особенностей, присущих когерентным лазерам в сильном поле [4], в частности, резкой зависимости тока J_{1c} от энергии электронов, подводимых к структуре. Такая особенность возникает из-за расщепления резонансных уровней в сильном переменном поле.

На рис. 5, *a, b* приведены результаты расчетов величины $J_{1c}V_{ac} = Q$ от расстройки $\delta = \varepsilon = \varepsilon_R$ при различных значениях V_{ac} . При $V_{dc} = 0$ и $V_{ac} = 8\Gamma$ Q имеет один минимум (максимум по абсолютной величине) при $\delta = 0$. Если V_{ac} превосходит 8Γ , появляются два минимума, которые расходятся, причем расстояние прямо пропорционально V_{ac} . Таким образом, ДНС демонстри-

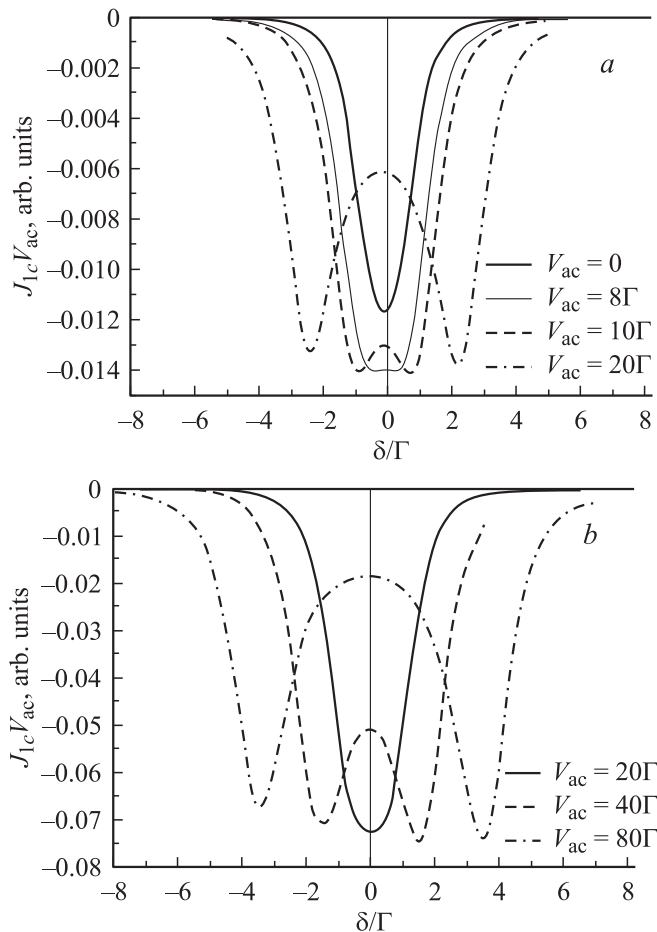


Рис. 5. Зависимости величины $J_{1c}V_{ac}$ от расстройки δ при различных значениях V_{ac} при частотах $\omega = \omega_m$: *a* — для $V_{dc} = 0$, *b* — для $V_{dc} = 100\Gamma$.

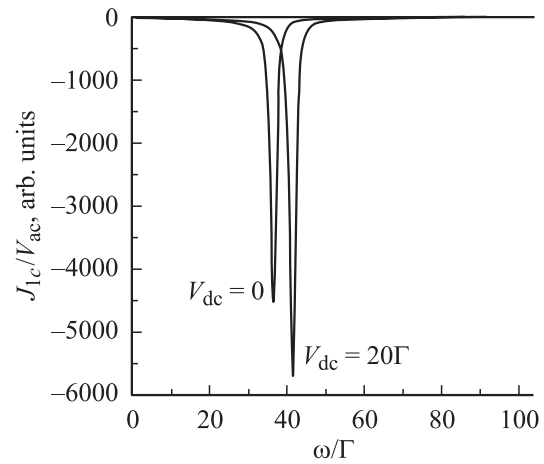


Рис. 6. Зависимости линейного отклика J_{1c}/V_{ac} от частоты ω в реальной структуре с прямоугольными барьерами для различных значений V_{ac} .

рует поведение, аналогичное с когерентным лазером с переходами между резонансными уровнями одной ямы. Поэтому существует оптимальный режим генерации с подстройкой, предсказанный в работе [4]. Однако имеются и отличия. Это — некоторая асимметрия при $\delta > 0$ и $\delta < 0$ и падение Q в минимуме с ростом V_{ac} . При большом значении V_{dc} (рис. 5, *b*) асимметрия уменьшается, а величина $J_{1c}V_{ac}$ в минимумах остается почти постоянной.

6. Заключение

Результаты, приведенные выше, получены в рамках простой модели с δ -образными барьерами. Мы полагаем, что качественное содержание не изменится для реальных структур. Для явной проверки мы рассчитали линейный отклик для структуры со следующими параметрами: ширина ямы $a = 150 \text{ \AA}$, барьеров $b = 16 \text{ \AA}$, высота барьеров $V_b = 2 \text{ эВ}$. Параметры подобраны так, чтобы $\alpha/p \approx 10$, $\alpha = V_b b$. Результаты расчета показаны на рис. 6. Видно, что зависимость отклика от частоты аналогична зависимости на рис. 3, а отклик совпадает по порядку величины.

Работа выполнена в рамках ФЦП „Интеграция“ (грант № Б0049) при поддержке программы „Физика твердотельных наноструктур“ Министерства промышленности и науки (проект № 40.072.1.1.1177).

Список литературы

- [1] A. Kazarinov, R. Suris. *Sov. Phys. Semicond.*, **5**, 207 (1971).
- [2] J. Fainst, F. Capasso, D. Sivco et al. *Science*, **264**, 553 (1994).
- [3] J.P. Sun, G.I. Haddad, Mazumder, J.N. Schulman. *Proc. IEEE*, **86** (4), 644 (1998).
- [4] В.Ф. Елесин. *ЖЭТФ*, **113**, 484 (1997).
- [5] В.Ф. Елесин, Ю.В. Копяев. *ЖЭТФ*, **123** (6), 1308 (2003).

- [6] S. Haas et al. Phys. Rev. B, **57**, 14 860 (1998).
- [7] И.А. Дмитриев, Р.А. Сурис. ФТП, **36**, 1460 (2002).
- [8] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **96**, 966 (2003).
- [9] В.Ф. Елесин, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, А.В. Цуканов. Письма ЖЭТФ, **66** (11), 709 (1997).
- [10] В.Ф. Елесин. Принята к печати в ЖЭТФ, **127**, (2005).
- [11] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **116**, 704 (1999).
- [12] А.А. Самарский, Е.С. Николаев. *Методы решения сеточных уравнений* (М., Наука, 1978).
- [13] J. Crank, P. Nicholson. Proc. Cambridge Phil. Soc., **50**, 43 (1947).
- [14] В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, А.И. Подливаев. ФТП, **34**, 1373 (2000).

Редактор Т.А. Полянская

High-frequency nonlinear response of two-wells nanostructures

V.F. Elesin, I.Yu. Kateev

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

Abstract The theory of nonlinear high-frequency response for two-wells nanostructure (TNS) in a constant electric field is developed. Such a structure is most simple on the way from the single-well one (resonant tunneling diode — RTD) to a superlattice with a single-band „Stark ladder“. In this paper the polarization current is obtained by a numerical solution of the Schrödinger equation in a broad interval of frequencies and fields (including large fields) for model and real structures. It is demonstrated that the TNS response considerably exceeds (by a factor of 1–2) the RTD one. The new optimum regime of generation similar to the interlevels transition regime in the coherent laser is predicted.