Нелинейный отклик двухъямной наноструктуры с учетом межэлектронного взаимодействия

© В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев[¶], М.А. Ремнев

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

(Получена 17 апреля 2008 г. Принята к печати 30 мая 2008 г.)

С помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера в приближении Хартри–Фока исследовано влияние межэлектронного взаимодействия на высокочастотные характеристики двухъямной наноструктуры. Рассчитаны отклик и эффективность излучения в структуре в сильном и слабом переменном электромагнитном поле. Показано, что межэлектронное взаимодействие не приводит к заметному снижению эффективности излучения и изменению резонансной частоты.

PACS: 73.63.Hs, 78.67.De, 72.30.+q

1. Введение

Наноструктуры привлекают к себе возрастающее внимание в связи с применением их в высокочастотных устройствах (см. например, [1,2]). Принципиально новые возможности появляются, если реализуются условия когерентного туннелирования, которое непосредственно связано с явлением квантовой интерференции электронов и возникновением резонансных уровней. Современный уровень технологий уже обеспечивает когерентность на больших длинах (до 10 квантовых ям) [3].

В работах [4–6] была развита теория когерентного отклика для двухъямной наноструктуры (ДНС) в рамках простой модели. Структура состоит из двух туннельносвязанных квантовых ям, к которым прикладывается постоянное напряжение $V_{\rm dc}$ (рис. 1). Было показано, что ДНС можно использовать в качестве генератора электромагнитного поля терагерцевого диапазона с плавной перестройкой частоты. Причем эффективность излучения поля может достигать 1. Также на возможность генерации электромагнитного поля на ДНС обращалось внимание в работах [7,8].

В то же время резонансное туннелирование может быть достаточно чувствительно к межэлектронному взаимодействию. Это следует из того, что сдвиг резонансных уровней за счет взаимодействия даже на малую величину резко меняет резонансный ток через структуру. Как показано в [9], для одноямной структуры (резонансно-туннельного диода) межэлектронное взаимодействие сильно влияет на низкочастотный отклик, но на высокой частоте (порядка нескольких терагерц) отклик меняется довольно слабо. Поэтому представляется интересным изучить влияние межэлектронного взаимодействия на высокочастотные свойства ДНС.

В данной работе в рамках самосогласованного приближения Хартри-Фока численно найден активный ток поляризации и эффективность излучения ДНС в широком интервале частот и полей. Основной результат работы сводится к тому, что межэлектронное взаимодействие не приводит к заметному снижению эффективности излучения ДНС и изменению резонансной частоты.

2. Постановка задачи. Основные уравнения

Рассмотрим структуру, состоящую из двух одинаковых квантовых ям шириной a с δ -функционными барьерами мощностью α (рис. 1). Слева к структуре подводится стационарный поток электронов с энергией ε и амплитудой q. Ко второй яме ДНС приложено постоянное электрическое напряжение V_{dc} . В области структуры действует переменное электрическое поле $E(t) = E_0 \cos \omega t$ с потенциалом $V_{ac}(x, t)$:

$$V_{\rm ac}(x,t) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -eEx, & 0 \le x \le 2a, \\ -2eEa, & x > 2a. \end{cases}$$
(1)

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



Рис. 1. Двухъямная наноструктура. Ширина квантовой ямы $a = 2\pi$, мощность δ -функционных барьеров $\alpha = 10$.

[¶] E-mail: ikateyev@mail.ru

(здесь и далее $\hbar = 2m^* = 1$):

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \left[\alpha \sum_{n=0}^2 \delta(x - na) - V_{dc} \Theta(x - a) + V_{ac}(x,t) + V_{ee}(x,t) \right] \psi, \qquad (2)$$

где $V_{ee}(x,t) = g |\psi(x,t)|^2$ — слагаемое, моделирующее локальное межэлектронное взаимодействие в приближении Хартри-Фока (см. [10]), g — константа взаимодействия электронов. Падение электронов слева с энергией ε и амплитудой q, их прохождение и отражение от ДНС описывают следующие открытые граничные условия:

$$\begin{cases} \psi(0,t)\left(1-\frac{\alpha}{ip}\right) + \frac{1}{ip}\frac{\partial\psi(0,t)}{\partial x} = 2q\exp(-i\varepsilon t),\\ \psi(2a,t)\left(1-\frac{\alpha}{ip_1}\right) - \frac{1}{ip_1}\frac{\partial\psi(2a,t)}{\partial x} = 0, \end{cases}$$
(3)

где $p = \sqrt{\varepsilon}$ и $p_1 = \sqrt{\varepsilon + V_{dc}}$ — волновые вектора электрона слева и справа от структуры соответственно. Выражение для тока через ДНС имеет вид

$$J(t) = -\frac{i}{2a} \int_{0}^{2a} \left\{ \psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} - \psi(x,t) \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} \right\} dx$$
$$= J_0 + J_c \cos \omega t + \sum_{k=1} J_k \sin k\omega t + \sum_{k=2} J_k \cos k\omega t,$$
(4)

где активный ток поляризации (усиление) *J*_c вычисляется по формуле

$$J_{\rm c} = \frac{\omega}{\pi} \int_{0}^{2\pi/\omega} dt J(t) \cos \omega t.$$
 (5)

Для расчета была выбрана структура с барьерами мощностью $\alpha = 10$ и ямами с шириной $a = 2\pi$, а также константой межэлектронного взаимодействия g = 0.01 [9]. Такая модель соответствует гетероструктуре AsGa/AlAsGa с тремя барьерами шириной 30 Å и высотой 1.2 эВ, разделенными квантовыми ямами шириной 100 Å. Мы не исследовали гистерезисные явления, возникающие при больших q [10]. Методика нахождения волновой функции ψ из системы уравнений (2), (3) подробно описана в работе [6].

Коэффициент прохождения в стационарном случае с учетом межэлектронного взаимодействия

Рассмотрим влияние межэлектронного взаимодействия на коэффициент прохождения электронов сквозь ДНС. Коэффициент прохождения вычисляется как ток



Рис. 2. Зависимости коэффициента прохождения *T* от энергии налетающих электронов ε при $V_{dc} = 0$ и различных значениях амплитуды налетающего потока электронов *q* (указаны на рисунке). *I* — верхний $\varepsilon_R^{(1)}$ и *2* — нижний $\varepsilon_R^{(2)}$ расщепленные уровни. Г — полуширина верхнего уровня при $V_{dc} = 0$ и *g* = 0.



Рис. 3. Зависимости коэффициента прохождения T от энергии налетающих электронов ε при $V_{dc} = 100\Gamma$ и различных значениях q (указаны на рисунке). Штриховая линия обозначает обратный ход зависимости. I, 2 — то же, что на рис. 2.

через структуру *J*, определяемый выражением (4), отнесенный к току налетающих частиц $2q^2\sqrt{\varepsilon}$ при $V_{\rm ac} = 0$.

Исследуем сначала случай $V_{dc} = 0$. На рис. 2 представлены зависимости коэффициента прохождения T от энергии ε при различных значениях амплитуды налетающего потока q. Видно, что зависимости имеют 2 пика, соответствующих расщепленным уровням ДНС (см. подробнее [4]). Поскольку межэлектронный потенциал V_{ee} пропорционален gq^2 , с ростом q его величина также растет. Из рис. 2 видно, что межэлектронное взаимодействие смещает оба резонансных уровня в сторону больших энергий. Кроме того, верхний $\varepsilon_R^{(1)}$ и нижний $\varepsilon_R^{(2)}$ расщепленные уровни смещаются практически

одинаково. Отсюда следует, что в отсутствие напряжения расстояние между расщепленными уровнями ДНС $\Delta \varepsilon = \varepsilon_R^{(1)} - \varepsilon_R^{(2)}$ мало изменяется под влиянием межэлектронного взаимодействия. Однако нужно отметить, что нижний уровень все-таки смещается немного больше верхнего. Из рис. 2 видно, что с увеличением *q* разность уровней очень медленно (в пределах ширины уровней) уменьшается линейно.

Ситуация кардинально меняется при $V_{dc} = 100\Gamma$ ($\Gamma = 3.7 \cdot 10^{-4}$ — полуширина верхнего уровня ДНС при $V_{dc} = 0$ в отсутствие взаимодействия). В этом случае при изменении q заметно смещается только верхний уровень с энергией $\varepsilon_R^{(1)}$ (рис. 3), а положение нижнего $\varepsilon_R^{(2)}$ остается практически неизменным. Вдобавок с ростом q расстояние между уровнями $\Delta \varepsilon$ заметно увеличивается (а не уменьшается, как при $V_{dc} = 0$). В [10] для одноямной структуры было показано, что если q превосходит некоторое критическое значение, зависящее от параметров структуры и величины g, на зависимости $T(\varepsilon)$ (а в случае реальных структур — на вольт-амперной характеристике) возникает гистерезис. То же наблюдается и для ДНС, где гистерезис возникает при $q^2 > q_c^2 \approx 0.5 \cdot 10^{-4}$ при g = 0.01 (рис. 3).

Влияние межэлектронного взаимодействия на линейный высокочастотный отклик двухъямной наноструктуры

Исследуем влияние межэлектронного взаимодействия на линейный отклик J_c/V_{ac} в слабом поле с амплитудой $V_{ac} = 2eE_0a = 0.01\Gamma$ при $\varepsilon = \varepsilon_R^{(1)}$. Сама величина $\varepsilon_R^{(1)}$ зависит от межэлектронного взаимодействия согласно рис. 2 и 3. На рис. 4 показаны зависимости J_c/V_{ac} от частоты переменного поля ω при $V_{dc} = 0$. Видно, что линейный отклик имеет минимум на частоте ω_R , примерно равной энергии расщепления $\Delta \varepsilon$. При увеличении q, а следовательно, с увеличением межэлектронного



Рис. 4. Зависимости линейного отклика J_c/V_{ac} от частоты ω при $V_{dc} = 0$ и различных значениях q (указаны на рисунке).



Рис. 5. Зависимости линейного отклика J_c/V_{ac} от частоты $f = \omega/2\pi$ при $V_{dc} = 0.01$ В для реальной структуры. Сплошная линия — без межэлектронного взаимодействия, штриховая — с взаимодействием.

взаимодействия минимум смещается влево (рис. 4). На рис. 4 изображена только область самого пика отклика. По масштабу видно, что этот пик очень узкий, порядка Г, а межэлектронное взаимодействие смещает пик на величину, не превышающую полуширины этого пика. Из рис. 4 видно, что с ростом q резонансная частота ω_R уменьшается, причем эта зависимость линейная. Такое поведение происходит из-за того, что, как отмечалось в разд. 3, верхний уровень $\varepsilon_R^{(1)}$ сдвигается меньше нижнего $\varepsilon_R^{(2)}$ и расстояние между ними $\Delta \varepsilon$ немного сокращается.

При $V_{\rm dc} = 100\Gamma$ зависимость отклика также имеет минимум на резонансной частоте ω_R , но с ростом q он смещается вправо, поскольку в этом случае расстояние между уровнями $\Delta \varepsilon$ линейно увеличивается (рис. 3).

Нами также был рассчитан линейный отклик реальной структуры GaAs/AlGaAs с прямоугольными барьерами, соответствующей нашей модели (см. разд. 2). На верхний расщепленный уровень структуры налетает моноэнергетический пучок электронов с $q_e^2 = 1.5 \cdot 10^{10}$ см⁻³, к ДНС приложено постоянное напряжение $V_{\rm dc} = 0.01$ В. Из рис. 5 видно, что резонансная частота смещается вправо, поскольку межэлектронное взаимодействие увеличивает расстояние между уровнями аналогично модельной задаче (рис. 3).

Влияние межэлектронного взаимодействия на эффективность излучения двухъямной наноструктуры в сильном переменном поле

Как показано в [5], в двухъямной наноструктуре излучение фотонов возникает за счет переходов электронов между уровнями, расщепленными в результате межъямной интерференции, и эффективность излучения ДНС



Рис. 6. Зависимости эффективности Q от расстройки ξ при $V_{dc} = 0$. Сплошные линии — без взаимодействия (g = 0), штриховые — $q^2 = 0.5 \cdot 10^{-4}$, штрихпунктирные — $q^2 = 1.0 \cdot 10^{-4}$, пунктирные — $q^2 = 1.5 \cdot 10^{-4}$.



Рис. 7. Зависимости эффективности Q от расстройки ξ при $V_{\rm dc} = 100\Gamma$ и $V_{\rm ac} = 80\Gamma$. Сплошные линии — без взаимодействия (g = 0), штриховые — $q^2 = 1.0 \cdot 10^{-4}$, штрихпунктирные — $q^2 = 2.0 \cdot 10^{-4}$.

характеризуется параметром

$$Q = \frac{|J_c|V_{\rm ac}}{2\omega}.$$
 (6)

В работе [5] было продемонстрировано в отсутствие межэлектронного взаимодействия, что Q может достигать 1/2 при $V_{dc} = 0$ и 1 при $V_{dc} \to \infty$. На рис. 6 изображены зависимости эффективности Q от расстройки $\xi = \varepsilon - \varepsilon_R^{(1)}$ при различных значениях q для $V_{dc} = 0$ без подстройки по частоте, т. е. ω_R соответствовало случаю без взаимодействия (см. рис. 4, g = 0). Если амплитуда поля V_{ac} меньше критического значения $V_{ac}^c = 8\Gamma$, то эффективность имеет единственный максимум в точке $\xi = \xi_0 = 0$, как и в [5]. Значение эффективности в максимуме $Q(\xi_0) = Q_m$ уменьшается из-за межэлектронного взаимодействия. С ростом V_{ac} эффективность растет,

а при некотором критическом значении $V_{\rm ac}^{\rm c}$ на зависимости $Q(\xi)$ появляются 2 максимума [5]. При этом величина $Q_{\rm m}$ растет с увеличением межэлектронного взаимодействия и расстояние между максимумами ξ_0 немного уменьшается.

На рис. 7 показана зависимость эффективности от расстройки при $V_{\rm dc} = 100\Gamma$ в сильном поле $V_{\rm ac} = 80\Gamma$. Видно, что расстояние между пиками и величина $Q_{\rm m}$ с ростом q не меняется. Несмотря на то что в стационарном случае при $V_{\rm dc} = 100\Gamma$ на зависимости коэффициента прохождения от энергии возникает гистерезис (см. рис. 3) уже при $q^2 > q_{\rm c}^2 \approx 0.5 \cdot 10^{-4}$, на зависимости эффективности от расстройки в сильном переменном поле (рис. 7) гистерезис не наблюдается даже при $q^2 = 2.0 \cdot 10^{-4}$.

6. Заключение

Главный вывод состоит в том, что учет межэлектронного взаимодействия не приводит к заметному снижению эффективности излучения ДНС и изменению резонансной частоты. При этом следует отметить, что концентрация электронов достаточна, чтобы вызвать гистерезис на вольт-амперной характеристике. Причина состоит в том, что межэлектронное взаимодействие практически одинаково действует на оба расщепленных уровня, как и в когерентном лазере [11]. Действительно, в [11] это было явно показано для когерентного лазера (переходы между уровнями пространственного квантования одной ямы), а в [6] продемонстрирована аналогия с ДНС. Аналогичные эффекты были продемонстрированы на реальной ДНС GaAs/AlGaAs и была показана возможность генерации на частоте 1.13 ТГц.

Работа выполнена в рамках федеральной целевой программы "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 годы" (контракт № 02.513.11.3068).

Список литературы

- [1] N. Shimizu et al. Electron. Lett., **31**, 1695 (1995).
- [2] A. Orihashi, B. Suzuki, C. Asada. Appl. Phys. Lett., 87, 233 501 (2005).
- [3] S. Haas et al. Phys. Rev. B, 57, 14860 (1998).
- [4] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, 127, 131 (2005).
- [5] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, **128**, 922 (2005).
- [6] В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев. ФТП, 39, 1106 (2005).
- [7] В.Ф. Елесин, В.В. Капаев, Ю.В. Копаев, А.В. Цуканов. Письма ЖЭТФ, 66, 709 (1997).
- [8] Е.И. Голант, А.Б. Пашковский. ФТП, 36, 330 (2002).
- [9] В.Ф. Елесин, И.Ю. Катаев, А.И. Подливаев. ФТП, 36, 1133 (2002).
- [10] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, 119, 816 (2001).
- [11] В.Ф. Елесин. ЖЭТФ, 122, 131 (2002).

Редактор Т.А. Полянская

Nonlinear response of double-well nanostructures with account for electron-electron interaction

V.F. Elesin, I.Yu. Kateev, M.A. Remnev

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

Abstract By means of self-consistent solution of Schrödinger equations, an effect of electron-electron interaction on highfrequency characteristics of a double-well nanostructure has been investigated using the Hartree–Fock approximation. A response and a radiation efficiency were calculated at strong and week ac fields. It was shown that the electron-electron interaction does not lead to the appreciable reduction of the radiation efficiency or the resonance frequency shift in the double-well structures.