Динамическое туннелирование электронов через квантовую точку в условиях кулоновской блокады

© С.М. Кашин[+¶], А.М. Сатанин[+,*¶¶]

[+] Научно-исследовательский физико-технический институт
Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия
[+] Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 8 апреля 2010 г. Принята к печати 13 апреля 2010 г.)

Исследована динамика туннелирования электронов через квантовую точку в условиях кулоновской блокады. Численно решено нестационарное уравнение Шредингера, исследована динамика многоэлектронного волнового пакета в системе, состоящей из кватовой точки, соединенной с двумя омическими контактами. Построены зависимости прозрачности от средней энергии волнового пакета. Произведено сравнение полученных зависимостей с решениями соответствующей стационарной задачи.

1. Введение

Исследования наноструктур со встроенными квантовыми точками (КТ) показывают, что кондактанс таких систем в зависимости от потенциала смещения имеет резонансную структуру [1–5]. Наличие резонансов в кондактансе открывает широкие возможности по использованию туннельных переходов с КТ в устройствах электроники. В ряде случаев простые модели позволяют качественно объяснить наблюдаемые в эксперименте эффекты резонансного туннелирования. Однако на данный момент остается еще много проблем, связанных с многоэлектронным туннелированием через КТ. Ранее многоэлектронное туннелирование в условиях кулоновской блокады изучалось только в стационарном случае [6], когда рассматривался установившийся поток электронов через КТ. В данной работе исследуется динамическое туннелирование электронов в системе, состоящей из КТ с присоединенными к ней омическими контактами. Для этого рассматривается временно́е поведение многоэлектронного волнового пакета, распространяющегося в системе омические контакты–квантовая точка. Развита методика численного решения временно́го уравнения Шредингера для взаимодействующих электронов.

2. Модель и основные уравнения

Рассмотрим КТ с присоединенными к ней омическими контактами. Пусть в левом контакте формируется начальное состояние — волновой пакет, а затем рассчитывается его эволюция согласно уравнению Шредингера. Предполагается, что в КТ имеется фиксированное число уровней (N) с энергиями ε_i (i — номер уровня) и в равновесии M из них заняты электронами [6]. При этом могут реализоваться два случая. Первый случай — когда туннелирующий электрон находится в одном из узлов контактов ($m \neq 0$), а в КТ заняты M состояний (обозначим данную комбинацию состояний индексом L). Волновую функцию такого состояния можно представить в виде

$$\Phi_{m,L} = \hat{a}_m^+ \left\{ \prod_{i \in L} \hat{d}_i^+ \right\} |0\rangle, \tag{1}$$

где $\hat{a}_m^+$ — оператор рождения электрона на узле m, а $\hat{d}_i^+$ — оператор рождения электрона в КТ в состоянии i. Второй случай — когда в КТ находятся $M+1$ электронов (обозначим комбинацию этих $M+1$ занятых состояний L'). Волновая функция в таком случае имеет вид

$$\Phi_{L'} = \left\{ \prod_{i \in L'} \hat{d}_i^+ \right\} |0\rangle. \tag{2}$$

В общем случае число возможных комбинаций из M занятых состояний равно $\frac{N!}{M!(N-M)!}$, и число комбинаций равно $\frac{N!}{(M+1)!(N-M-1)!}$, когда занято $M+1$ состояние. Общая волновая функция — линейная комбинация выражений (1) и (2):

$$|\Psi\rangle = \sum_{m \neq 0} \sum_{L} A_{m,L} \hat{a}_m^+ \prod_{i \in L} \hat{d}_i^+ |0\rangle + \sum_{L'} B_{L'} \prod_{i \in L'} \hat{d}_i^+ |0\rangle, \tag{3}$$

$A_{m,L}$ и $B_{L'}$ — амплитуды вероятностей, которые зависят от времени t.

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\mathrm{QD}} + \hat{H}_t, \tag{4}$$

где $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{\mathrm{QD}}$ — гамильтонианы электронов в контактах и в изолированной КТ,

$$\hat{H}_0 = -t_0 \sum_m \left(\hat{a}_{m+1}^+ \hat{a}_m + \hat{a}_m^+ \hat{a}_{m+1} \right), \tag{5}$$

[¶] E-mail: smkashin@gmail.com
[¶¶] E-mail: sarkady@mail.ru

$$\hat{H}_{\rm QD} = \frac{e^2}{2C}\left(\sum_{i=1}^{N}\hat{d}_i^{+}\hat{d}_i\right)^2 + \sum_{i=1}^{N}(e\varphi + \varepsilon_i)\hat{d}_i^{+}\hat{d}_i, \qquad (6)$$

$\hat{H}_t$ описывает туннельную связь КТ с контактами,

$$\hat{H}_t = \sum_{i=1}^{N}\left(V_i^L\hat{a}_{-1}^{+}\hat{d}_i + V_i^R\hat{a}_1^{+}\hat{d}_i + H.C.\right). \qquad (7)$$

В (5)–(7) использованы следующие обозначения: e — элементарный заряд, C — эффективная емкость КТ, V_0 и V_i — матричные элементы, описывающие переходы между узлами контактов и КТ (верхние индексы L, R указывают на левый и правый контакт соответственно), φ — потенциал смещения на КТ.

Из временнóго уравнения Шредингера $i(\partial/\partial t)|\Psi\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle$ (выбрана система единиц, где $\hbar = 1$) получаем систему уравнений для коэффициентов $A_{m,L}$ и $B_{L'}$:

$$\begin{cases} i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{m,L} = E_L A_{m,L} - V_0(A_{m-1,L} + A_{m+1,L}), \;\; j \neq 0, \pm 1, \\ i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{-1,L} = E_L A_{-1,L} - V_0 A_{-2,L} + \displaystyle\sum_{i\in L} V_i^L B_{(L,i)}, \\ i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{1,L} = E_L A_{1,L} - V_0 A_{2,L} + \displaystyle\sum_{i\in L} V_i^R B_{(L,i)}, \\ i\,\dfrac{\partial}{\partial t}B_{L'} = E_{L'}B_{L'} + \displaystyle\sum_{i\in L'}\left(V_i^{L*}A_{-1,(L',-i)} + V_i^{R*}A_{1,(L',-i)}\right). \end{cases} \qquad (8)$$

Здесь индекс (L, i) обозначает заполнение КТ M электронами в соответствии с комбинацией L и еще одним электроном в состоянии i, а $(L', -i)$ представляет комбинацию уровней L' с исключенным уровнем i. Для упрощения записи введены обозначения

$$E_L = \frac{e^2M^2}{2C} + Me\varphi + \sum_{i\in L}\varepsilon_i, \qquad (9)$$

$$E_{L'} = \frac{e^2(M+1)^2}{2C} + (M+1)e\varphi + \sum_{i\in L'}\varepsilon_i, \qquad (10)$$

E_L и $E_{L'}$ представляют собой энергии КТ с M и $M+1$ электронами.

Решив систему уравнений (8), можно исследовать эволюцию во времени волнового пакета, распространяющегося по контакту с КТ. Амплитуды $A_{m,L}$ зависят от номера узла m, а также от конфигурации L заполнения КТ электронами. Таким образом, при $M > 0$ каждое уравнение в системе (8) представляет собой совокупность уравнений, соответствующих разному заполнению КТ, и задача туннелирования электронов становится многоканальной.

Рассмотрим случай, когда одно состояние КТ занято ($M = 1$). Тогда L представляет собой индекс, обозначающий занятое состояние. В этом случае система (8) примет вид:

$$\begin{cases} i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{m,i} = E_i A_{m,i} - V_0(A_{m-1,i} + A_{m+1,i}), \;\; m \neq 0, \pm 1, \\ i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{-1,i} = E_i A_{-1,i} - V_0 A_{-2,i} - \sqrt{2}\displaystyle\sum_{j=1}^{N} V_j^L B_{i,j}, \\ i\,\dfrac{\partial}{\partial t}A_{1,i} = E_i A_{1,i} - V_0 A_{2,i} - \sqrt{2}\displaystyle\sum_{j=1}^{N} V_j^R B_{i,j}, \\ \sqrt{2}i\,\dfrac{\partial}{\partial t}B_{ij} = \sqrt{2}E_{ij}B_{ij} + \big(V_i^{L*}A_{-1,j} + V_i^{R*}A_{1,j} \\ \qquad\qquad - V_j^{L*}A_{-1,i} - V_j^{R*}A_{1,i}\big), \end{cases} \qquad (11)$$

где $E_i = e^2/2C + e\varphi + \varepsilon_i$ и $E_{ij} = 4e^2/2C + 2e\varphi + \varepsilon_i + \varepsilon_j$, амплитуды B_{ij} антисимметричны относительно перемены индексов i и j.

Движение электрона в омических контактах подчиняется первому уравнению в системе (11). Полагая контакты бесконечными, будем искать решение $A_{m,i}$ в виде плоских волн. Нетрудно получить выражение для энергии системы:

$$E(k) = E_i - 2V_0\cos k, \qquad (12)$$

где k — волновое число, а $E(k)$ — энергия электронов. Волновое число электрона в контакте зависит от E_i, т. е. от заполнения КТ. Таким образом, в контактах имеется N энергетических каналов.

Задавая разные начальные условия, можно, согласно (11), моделировать эволюцию произвольного состояния системы во времени. В частности, если начальное состояние формируется в виде волнового пакета в одном из открытых каналов в левом контакте, то через достаточно большое время, когда произойдет рассеяние электрона на КТ, можно определить коэффициент прохождения электрона и зависимость коэффициента прохождения от энергии, что позволит вычислить вольт-амперную характеристику (ВАХ) туннельного контакта с КТ.

3. Основные результаты

Начальное состояние в i-м канале можно приготовить следующим образом. Сначала надо задать начальное распределение по волновому числу k:

$$C_m^i = \exp\left[-\frac{(\Delta k\, m - k_0)^2}{\sigma_k^2}\right], \qquad (13)$$

где k_0 — несущее волновое число, $\Delta k = \pi/aN_k$ — шаг сетки в первой зоне Бриллюэна. Установив положение волнового пакета k_0 и его ширину σ_k в пространстве k, можно определить амплитуды $A_{m,i}$:

$$A_{m,i} = \frac{1}{2\pi}\sum_{m=-N}^{N} C_m^i e^{i\Delta k\, m(j-j_0)}. \qquad (14)$$

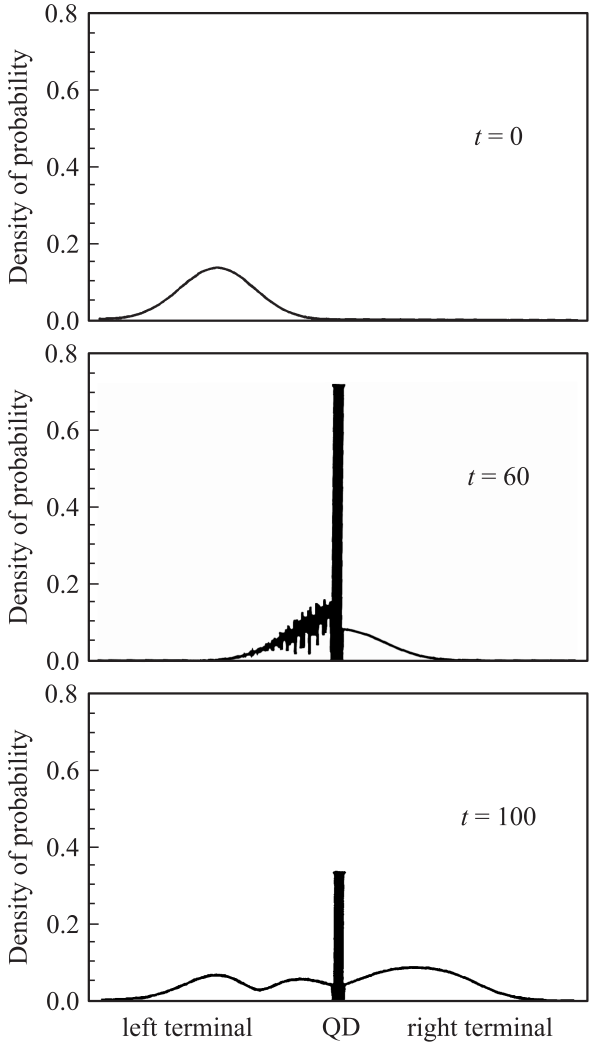

Рис. 1. Эволюция волнового пакета при туннелировании через КТ (QD).

Уравнения (11) с начальным условием (14) были решены численно методом Рунге–Кутты 4-го порядка. На рис. 1 изображен волновой пакет в три последовательных момента времени t. По вертикальной оси отложена сумма квадратов амплитуд $A_{m,i}$ и B_{ij} по всем каналам, а по горизонтальной оси — координаты узлов контактов и номера состояний КТ (отмечены вертикальными линиями в центре). После отражения волнового пакета КТ остается высокая амплитуда вероятности, которая затем постепенно уменьшается, что объясняется большим временем жизни резонансных состояний в КТ.

Если приготовить распределение (13), которое сильно локализовано в k-пространстве, то коэффициент прохождения будет совпадать с решением стационарного уравнения Шредингера. Прозрачность в нестационарной задаче можно вычислить, проследив эволюцию системы за большое время. Волновой пакет туннелирует через КТ, часть его отразится, а часть пройдет в правый контакт. Тогда коэффициент прохождения можно найти по формуле

$$T(k_0) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{m=1}^{n} |A_{m,i}|^2, \tag{15}$$

где суммирование идет по всем каналам и узлам правого контакта, а также учтено, что в начальный момент $\sum_{i=1}^{N} \sum_{m=-n}^{n} |A_{m,i}|^2 = 1$.

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента прохождения от средней энергии волнового пакета E. При этом полагалось, что в КТ имеется $N = 3$ уровня, а параметры системы взяты следующими: $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i = 0.2$, $e^2/2C = 0.3$, $V_i^R = V_i^L \equiv V = 0.10$, $e\varphi = -1.5$; в качестве единицы энергии выбран резонансный туннельный интеграл V_0. Пунктирными ли-

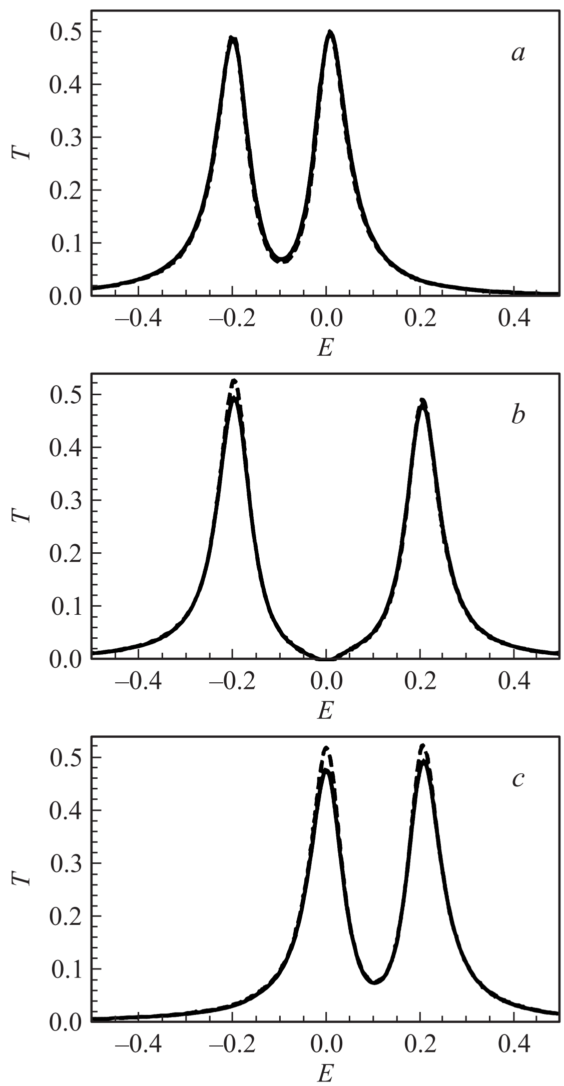

Рис. 2. Зависимость коэффициента прохождения T от средней энергии волнового пакета (сплошные кривые): начальное состояние формировалось в 1-м канале (a), во 2-м канале (b) и в 3-м канале (c). Штриховые линии — парциальные коэффициенты прохождения в соответствующие каналы, полученные из решения стационарной задачи.

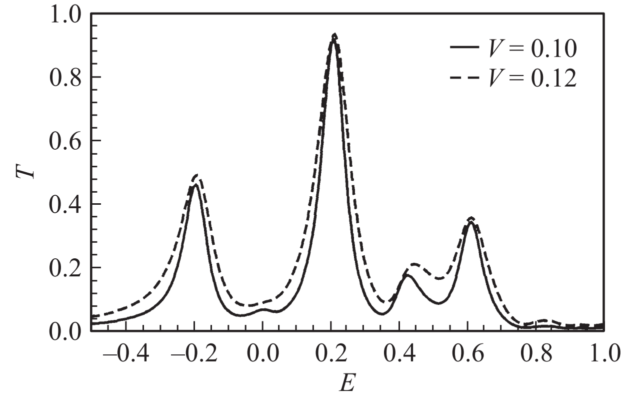

Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения T волнового пакета от средней энергии E. Начальное состояние задавалось в виде суперпозиции пакетов во всех каналах.

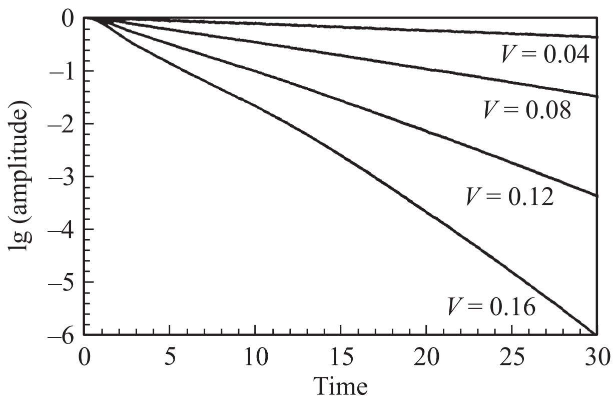

Рис. 4. Зависимость амплитуды вероятности нахождения электрона в КТ от времени при различных значениях параметра связи КТ и контактов.

ниями обозначены решения стационарной задачи для системы с аналогичными параметрами. Как видно из рисунков, кривые почти во всем диапазоне энергий совпадают, что говорит о корректности выбранного метода решения уравнений (11) и расчета коэффициента прохождения. Небольшие различия прозрачности вблизи максимумов объясняются тем, что в волновом пакете присутствуют гармоники с нерезонансной энергией, которые не проходят в правый контакт.

Можно задавать начальное состояние в виде суперпозиции состояний в различных каналах. При этом, чтобы средняя энергия волнового пакета была одинаковой в разных каналах, необходимо вычислять k_0 начального состояния для каждого канала согласно (10). На рис. 3 приведены зависимости коэффициента прохождения от средней энергии волнового пакета при двух значениях параметра связи КТ с контактами V (для простоты выбрано $V_i^R = V_i^L \equiv V$), начальное состояние задавалось во всех $N = 4$ каналах, другие параметры взяты следующими: $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i = 0.2$, $e^2/2C = 0.3$, $e\varphi = -1.5$. Наблюдаются резонансы, положение которых определяется энергиями двухчастичных состояний в КТ. При этом зависимость прозрачности от энергии не является суммой соответствующих зависимостей с начальными состояниями, заданными в отдельных каналах, поскольку происходит интерференция волновых пакетов из разных каналов. Прохождение через КТ определяется параметром V. Как видно из рисунка, при увеличении V увеличивается ширина резонансов. Положение резонансов определяется энергиями многочастичных состояний в квантовой точке.

Если в начальный момент времени оба электрона находятся в КТ, то решение временно́го уравнения Шредингера позволит изучить распад двухчастичного состояния. Исследования подобных явлений в одноэлектронном приближении [7] показывают, что амплитуда вероятности есть

$$A = \exp(iEt)\exp(-\Gamma t/2), \tag{16}$$

где E — энергия квазистационарного состояния, а Γ — ширина резонанса. На рис. 4 приведена временна́я зависимость амплитуды вероятности (в логарифмических координатах) нахождения электрона в КТ при различных значениях параметра связи КТ с контактами V. Как видно из рисунка, при малых значениях V логарифм амплитуды — линейная функция времени, ее производная определяет ширину резонанса, вблизи которого задано начальное состояние. При увеличении V наблюдается отклонение от линейного поведения, которое можно объяснить тем, что становится существенным перекрытие резонансов и происходит интерференция состояний, локализованных на близких квазиуровнях.

4. Заключение

В одноканальном приближении нестационарная задача туннелирования через КТ сводится к задаче о движении волнового пакета через двухбарьерную структуру, где наблюдается полное прохождение при энергиях, равных энергиям квазистационарных состояний между барьерами. В данной работе исследована динамика двухэлектронного волнового пакета в системе с КТ в многоканальном случае. С увеличением числа электронов в КТ M число уравнений системы (9) растет как N^M, что существенно осложняет расчет. Однако уже при минимальном заполнении КТ, $M = 1$, становятся видны основные особенности динамики волнового пакета. Происходит интерференция пакетов из разных энергетических каналов. Резонансы наблюдаются только при туннелировании из открытых каналов. Предлагаемый в работе метод решения уравнения Шредингера позволяет исследовать эволюцию произвольного начального состояния. Если в первый момент времени волновой пакет находится на КТ, то его дальнейшая эволюция описывает распад состояния. При увеличении параметра V зависимость логарифма плотности вероятности нахождения электронов в КТ становится нелинейной, что объясняется участием в распаде нескольких резонансов и их интерференцией.

Если в начальный момент времени пакет локализован на одном из узлов, то амплитуда в последующий момент времени представляет собой двухчастичную функцию Грина, которая определяет транспортные совйства системы. Это свойство может быть использовано для расчета вольт-амперной характеристики контактов со встроенной КТ. Расчет транспортных характеристик многоэлектронной системы с КТ методом функций Грина в одноканальном приближении рассматривается в работах [8,9]. Исследуемый в работе метод численного решения предполагается использовать для изучения ВАХ систем с КТ в условиях кулоновской блокады в многоканальном случае.

Список литературы

[1] A. Yacoby, R. Schuster, M. Heiblum. Phys. Rev. B, **53**, 9583 (1996).
[2] J. Göres, D. Goldhaber-Gordon, S. Heemeyer, M.A. Kastner, H. Shtrikman, D. Mahalu, U. Meirav. Phys. Rev. B, **62**, 2188 (2000).
[3] U.F. Keyser, S. Borck, R.J. Haug, M. Bichler, G. Abstreiter, W. Wegscheider. Semicond. Sci. Technol., **17**, L22 (2002).
[4] K. Kobayashi, H. Aikawa, A. Sano, S. Katsumoto, Y. Iye. Phys. Rev. B, **70**, 035 319 (2004).
[5] A. Vidan, R.M. Westervelt, M. Stopa, M. Hanson, A.C. Gossard. Appl. Phys. Lett., **85**, 3602 (2004).
[6] Shi-Jie Xiong, Ye Xiong. Phys. Rev. Lett., **83**, 1407 (1999).
[7] Н.С. Крылов, В.А. Фок. ЖЭТФ, **17**, 93 (1947).
[8] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, D. Saint-James. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **4**, 916 (1971).
[9] S. Hershfield, J.H. Davies, J.W. Wilkins. Phys. Rev. B, **46**, 7046 (1992).

Редактор Л.В. Шаронова

Dynamical tunneling of electrons through a quantum dots in Coulomb blockade regime

S.M. Kashin[+], A.M. Satanin[+,]*

[+] Physical-Technical Research Institute
N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 603950 Nizhny Novgorod, Russia
[*] Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Dynamical tunneling of electrons through a quantum dot in Coulomb blockade regime has been investigated. The time-dependent Schrodinger equation for a many-electron wave packet propagating through the quantum dot connected with two ohmic leads has been solved. Transmittance as a function of the average electron energy has displayed. The calculated results of the dynamical problem have been compared with the related solutions of the time-independent problem.

Окончание публикации материалов симпозиума