

К ТЕОРИИ КОГЕРЕНТНОГО РЕЗОНАНСНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

В. Ф. Елесин

*Московский государственный инженерно-физический институт
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 декабря 2000 г.

В рамках модели когерентного туннелирования взаимодействующих электронов найдены аналитические решения уравнения Шредингера для двухбарьерной структуры (резонансно-туннельного диода) с открытыми граничными условиями. Получены простые выражения для резонансного тока, позволяющие провести анализ вольт-амперной характеристики, условий появления гистерезиса и его особенностей в зависимости от параметров резонансно-туннельного диода. Показано, что гистерезис реализуется, если ток превышает некоторое критическое значение, пропорциональное квадрату ширины резонансного уровня.

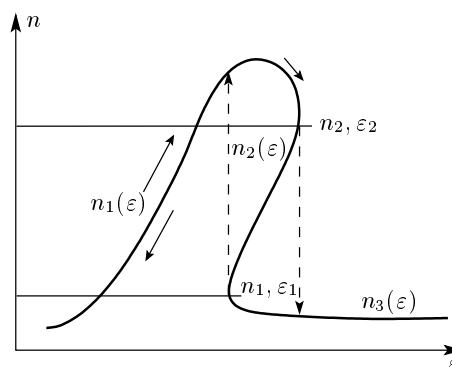
PACS: 85.30.Mn, 85.30.Vw, 87.56.Bu

1. ВВЕДЕНИЕ

Резонансное туннелирование через наноструктуры привлекает все возрастающее внимание в связи с применением его в сверхвысокочастотных устройствах. Резонансное туннелирование тесно связано с явлением квантовой интерференции электронов и возникновением резонансных уровней пространственного квантования.

В реальной ситуации появляется потребность учета влияния всегда присутствующего взаимодействия между электронами на процессы квантовой интерференции и резонансного туннелирования. Это тем более необходимо, что можно ожидать высокой чувствительности резонансного туннелирования к межэлектронному взаимодействию. Последнее следует из того, что сдвиг резонансного уровня за счет взаимодействия на величину малую по сравнению с энергией электрона ε_R , но сопоставимую с шириной резонансного уровня $\Gamma \ll \varepsilon_R$, резко изменяет резонансный ток.

Наиболее простая наноструктура, в которой проявляется резонансное туннелирование, — двухбарьерная квантовая яма, так называемый резонансно-туннельный диод. Его вольт-амперная характеристика (ВАХ) обладает спадающим участком с отрицательным дифференциальным сопротивлением [1]. Кроме того, как впервые было обнаружено в [2], в



Зависимость концентрации электронов туннельного диода от энергии электронов при токе, превышающем критический

ВАХ резонансно-туннельного диода иногда проявляется гистерезис (см. рисунок). Зависимость тока от напряжения имеет три ветви и переходы между ними осуществляются скачками.

Существуют, по крайней мере, две интерпретации явления гистерезиса. Согласно одной [2, 3], гистерезис возникает за счет накопления заряда или межэлектронного взаимодействия. Вторая интерпретация [4] основывается на влиянии внешних цепей на ток в резонансно-туннельном диоде, которому присуща отрицательная дифференциальная

проводимость. В настоящее время нет единого мнения о механизме гистерезиса (см., например, [5, 6]).

Теория влияния накопления заряда и межэлектронного взаимодействия на ВАХ резонансно-туннельного диода рассматривалась в ряде работ, выполненных в основном численными методами. Впервые феноменологическая модель была изучена в [3]. В предположении некогерентного туннелирования была найдена ВАХ, демонстрирующая гистерезис за счет накопления заряда.

Более строгая модель рассматривалась в [6], где в рамках приближения некогерентного туннелирования с помощью техники Келдыша были получены выражения для тока и уравнения для концентрации электронов в квантовой яме. Использовалось приближение Хартри с локальным межэлектронным потенциалом. Уравнение решалось численно для типичных параметров квантовой ямы и двух значений ширины $\Gamma = 2$ мэВ и $\Gamma = 5$ мэВ. Была обнаружена зависимость области гистерезиса от ширины Γ .

Следует отметить, что обе работы [3, 6] выполнены в рамках модели некогерентного туннелирования, которая по существу является полуфеноменологической. Действительно, в ней предполагается существование резонансного уровня и не рассматривается явно квантовая интерференция. Кроме того, вместо открытых граничных условий по существу используется теория возмущений для вероятности туннельных переходов из контактов в квантовую яму (так называемый метод туннельного гамильтониана).

Поэтому представляется полезным изучить влияние межэлектронного взаимодействия в рамках модели когерентного туннелирования. В этой модели квантовая интерференция и резонансные уровни пространственного квантования возникают автоматически, а открытые граничные условия обеспечивают строгую постановку задачи. Можно ожидать, что такой подход поможет внести дополнительные аргументы в упомянутую выше дискуссию (см. [5, 6]).

Цель настоящей работы — построение последовательной модели когерентного туннелирования взаимодействующих электронов. В работе в рамках самосогласованного приближения Хартри–Фока удалось найти аналитические решения уравнения Шредингера с открытыми граничными условиями. Получены простые выражения для резонансного тока, позволяющие провести анализ условий появления гистерезиса и его особенностей в зависимости от параметров резонансно-туннельного диода.

Впервые показано, что гистерезис реализуется, если ток превышает некоторое критическое значе-

ние J_c . Найдены зависимости J_c , а также области гистерезиса от параметров структуры и, в частности, от ширины резонансного уровня.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 дана постановка задачи и выведены основные уравнения. Раздел 3 посвящен решению уравнения Шредингера и получению общего выражения для тока и уравнения для концентрации электронов в квантовой яме. В разд. 4, 5 анализируется зависимость тока от энергии электронов, условия появления гистерезиса и его особенности.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Изучим следующую модель когерентного туннелирования взаимодействующих электронов (см. [7]). К одномерной квантовой яме с δ -функциональными барьерами в точках $x = 0$ и $x = a$ слева ($x = -\infty$) подводится стационарный поток электронов, пропорциональный q^2 , с энергией ε , примерно равной ε_R . Предполагается, что внутри квантовой ямы электроны взаимодействуют друг с другом.

В приближении Хартри–Фока уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha [\delta(x) + \delta(x-a)]\psi + U(x)\psi = \varepsilon\psi, \quad (1)$$

$$U(x) = \int dx' |\psi(x')|^2 V(x-x'), \quad (2)$$

где $U(x)$ — самосогласованный потенциал, $V(x)$ — энергия взаимодействия между электронами, α — мощность барьера. Здесь и далее $\hbar = 2m = 1$. Потенциал $U(x)$ может описывать и эффект накопления заряда (см. [6]). Для простоты будем считать межэлектронное взаимодействие локальным (как и в [6]):

$$V(x-x') = g\delta(x-x'). \quad (3)$$

Тогда уравнение (1) принимает окончательный вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \varepsilon\psi - g\psi|\psi|^2 - \alpha [\delta(x) + \delta(x-a)]\psi = 0. \quad (4)$$

Мы используем граничные условия (см., например, [7])

$$\begin{aligned} \psi(0) \left(1 - \frac{\alpha}{ip}\right) + \frac{1}{ip} \frac{d\psi(0)}{dx} &= q, \\ \psi(a) \left(1 - \frac{\alpha}{ip}\right) - \frac{1}{ip} \frac{d\psi(a)}{dx} &= 0, \quad \varepsilon = p^2, \end{aligned} \quad (5)$$

описывающие поток электронов слева, их отражение и уход в область $x > a$.

Резонансный ток $J(\varepsilon)$ через квантовую яму находим из обычного выражения:

$$J(\varepsilon) = -ie \left[\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right]. \quad (6)$$

В отсутствие взаимодействия резонансный ток дается известным выражением (см., например, [7])

$$J(\varepsilon) = \frac{Q\Gamma^2}{2[(\varepsilon - \varepsilon_R)^2 + \Gamma^2]}, \quad (7)$$

$$\Gamma = \frac{4p^3}{\alpha^2 a}, \quad Q = q^2 p,$$

a — размер квантовой ямы.

Отметим, что формула (7) получена для наиболее интересного случая квантовой ямы с «сильными барьерами», когда $\Gamma \ll \varepsilon_R$. Именно в этом пределе наиболее эффективно реализуются резонансные свойства квантовой ямы.

3. ОБЩЕЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ РЕЗОНАНСНОГО ТОКА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Аналитическое решение уравнения (4) с открытыми граничными условиями (5) в общем случае представляет определенные трудности. Однако нахождение решения можно упростить, если учесть уже отмеченную выше высокую чувствительность резонансного тока к сдвигу резонансного уровня за счет межэлектронного взаимодействия.

Можно ожидать (и это подтверждается ниже), что уже малый по сравнению с ε_R сдвиг энергии $\Delta\varepsilon \sim \Gamma$ будет существенно изменять ток $J(\varepsilon)$. Поэтому нелинейное слагаемое в (4) можно считать малым и для нахождения решения (4) воспользоваться методами, изложенными, например, в [8]. Будем искать решение (4) в виде

$$\psi(x) = A(x)e^{ipx} + B(x)e^{-ipx}, \quad (8)$$

где $A(x)$ и $B(x)$ — медленноменяющиеся комплексные функции x . При этом скорость изменения функций $A(x)$ и $B(x)$ пропорциональна малости нелинейного слагаемого.

Если подставить решение (8) в уравнение (4) и провести усреднение по быстроменяющимся функциям $\exp(\pm ipx)$ (см. подробнее в [8]), то приходим к следующим уравнениям для $A(x)$ и $B(x)$:

$$\frac{dA}{dx} = \frac{gA}{2ip} \left[|A(x)|^2 + 2|B(x)|^2 \right], \quad (9)$$

$$\frac{dB}{dx} = -\frac{gB}{2ip} \left[|B(x)|^2 + 2|A(x)|^2 \right].$$

Нетрудно показать, что величины $|A|^2$ и $|B|^2$ не зависят от координаты:

$$\frac{d}{dx}|A|^2 = \frac{d}{dx}|B|^2 = 0. \quad (10)$$

Учитывая это обстоятельство, находим решение системы (9):

$$A(x) = A_0 \exp \left\{ -\frac{ixg}{2p} (|A_0|^2 + 2|B_0|^2) \right\}, \quad (11)$$

$$B(x) = B_0 \exp \left\{ \frac{ixg}{2p} (|B_0|^2 + 2|A_0|^2) \right\},$$

где A_0 и B_0 — постоянные, которые можно найти из граничных условия (5).

После некоторых вычислений получаем выражения для A_0 , B_0 и определителя Δ_0 :

$$A_0 = \frac{q}{\Delta_0} \left(2 - \frac{\alpha}{ip} - g_B \right), \quad (12)$$

$$B_0 = \frac{q}{\Delta_0} \left(\frac{\alpha}{ip} - g_A \right) \exp(2ipa - ipa\tilde{g}), \quad (13)$$

$$\Delta_0 = \left(2 - \frac{\alpha}{ip} - g_A \right) \left(2 - \frac{\alpha}{ip} - g_B \right) - \left(\frac{\alpha}{ip} - g_A \right) \left(\frac{\alpha}{ip} - g_B \right) \exp(2ipa - ipa\tilde{g}), \quad (14)$$

где

$$g_A = \frac{g}{2p^2} (|A_0|^2 + 2|B_0|^2),$$

$$g_B = \frac{g}{2p^2} (|B_0|^2 + 2|A_0|^2), \quad (15)$$

$$\tilde{g} = \frac{3g}{2p^2} n_0, \quad n_0 = |A_0|^2 + |B_0|^2.$$

Вообще говоря, величины g_A , g_B и \tilde{g} сами зависят от A_0 , B_0 . Поэтому система (12)–(15) является самосогласованной.

Подставляя решения (8) и (11) в (6), найдем ток

$$J(\varepsilon) = e \left[|A_0|^2 - |B_0|^2 \right] \times \left\{ 2p + \frac{gn_0}{p} + \frac{ig}{2p} (A_0 B_0^* e^{2ipx} - \text{с.с.}) \right\}. \quad (16)$$

4. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Как мы увидим, величиной, определяющей поведение тока (16), является резонансный знаменатель

Δ_0 . В наиболее интересном случае «сильных барьеров», когда $p/\alpha \ll 1$, $\Gamma/\varepsilon_R \ll 1$, $\varepsilon \approx \varepsilon_R$, выражение (14) для Δ_0 можно представить в виде

$$|\Delta_0|^2 = \frac{16}{\Gamma^2} [(\varepsilon - \varepsilon_R - p^2\tilde{g})^2 + \Gamma^2], \quad (17)$$

$$\varepsilon_R \approx \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \left(1 - \frac{4}{\alpha a} - \frac{12}{\alpha^2 a^2}\right).$$

При выводе также предполагалось, что сдвиг резонансного уровня

$$\Delta\varepsilon = p^2\tilde{g} = \frac{3}{2}gn_0 \quad (18)$$

мал по сравнению с ε_R . В то же время из (17) следует, что сдвиг $\Delta\varepsilon$, соизмеримый с Γ , сильно меняет резонансный знаменатель и, следовательно, ток $J(\varepsilon)$ (16). Таким образом, наше исходное предположение о возможности считать нелинейный член в (4) небольшим оказывается оправданным. Малость параметра $\Delta\varepsilon/\varepsilon_R$ позволяет упростить выражения для A_0 , B_0 и $J(\varepsilon)$, опуская соответствующие малые поправки. В результате приходим к выражению для тока

$$J(\varepsilon) = \frac{eQ\Gamma^2}{2 \left[\left(\varepsilon - \varepsilon_R - \frac{3}{2}gn_0 \right)^2 + \Gamma^2 \right]} \quad (19)$$

и самосогласованному уравнению для концентрации

$$n_0(\varepsilon) = \frac{Q\Gamma}{2a \left[\left(\varepsilon - \varepsilon_R - \frac{3}{2}gn_0 \right)^2 + \Gamma^2 \right]}. \quad (20)$$

Нетрудно видеть из (19) и (20), что ток $J(\varepsilon)$ и концентрация $n_0(\varepsilon)$ связаны соотношением

$$J(\varepsilon) = en_0(\varepsilon)a\Gamma. \quad (21)$$

Таким образом, ток выражается через концентрацию электронов $n_0(\varepsilon)$ в квантовой яме, которую следует найти из уравнения (20).

5. АНАЛИЗ РЕЗОНАНСНОГО ТОКА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Удобно привести уравнение (20) к безразмерному виду:

$$n = f / [1 + (x - n)^2], \quad (22)$$

$$n = \frac{3gn_0}{2\Gamma}, \quad x = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R}{\Gamma}, \quad f = \frac{3Qg}{4a\Gamma^2}. \quad (23)$$

Уравнение типа (22) хорошо известно в теории нелинейных колебаний (см., например, [8, 9]). В нашем случае уравнение описывает зависимость концентрации электронов n от тока «накачки» f и «растройки» x . Выражение (22) представляет собой кубическое уравнение

$$n^3 - 2xn^2 + n(1 + x^2) - f = 0 \quad (24)$$

относительно n с детерминантом

$$D = \frac{x^2(2 + x^2)}{27} + \frac{1}{27} + \frac{f^2}{4} - \frac{fx}{3} \left(1 + \frac{x^2}{9}\right). \quad (25)$$

При малых f , соответствующих малому сдвигу уровня, концентрация n является симметричной функцией x . С увеличением f кривая $n(x)$ деформируется. При значении f , большем некоторой критической величины f_c , появляются три решения $n(x)$ (см. рисунок), соответствующие одному и тому же значению x . Поскольку возрастающее с увеличением x решение $n_2(x)$ неустойчиво (см. [8]), имеет место гистерезис. Действительно, с ростом x концентрация при $x > x_2$ скачком падает и описывается третьим решением $n_3(x)$. При обратном уменьшении x концентрация скачком увеличивается до $n_1(x)$, когда x становится меньше x_1 .

Прежде всего найдем f_c из условия слияния минимумов $x(n_1, n_2)$:

$$\frac{dx}{dn} = 3n^2 - 4xn + x^2 + 1 = 0. \quad (26)$$

Решение этого уравнения

$$n_{1,2} = \frac{2x}{3} \pm \sqrt{\frac{x^2}{9} - \frac{1}{3}} \quad (27)$$

дает два значения n в экстремумах, которые сливаются при условии

$$x_c = \sqrt{3}, \quad n_c = 2/\sqrt{3}. \quad (28)$$

Подставляя эти величины в (22), находим критическое значение

$$f_c = 8/3\sqrt{3}. \quad (29)$$

Этот результат согласуется с требованием появления трех действительных решений кубического уравнения (24). Как известно, оно состоит в равенстве нулю детерминанта $D(x)$ (25). Нетрудно проверить, что, подставляя x_c и f_c в (25), получаем $D(x_c, f_c) = 0$. Кроме того, обращается в нуль и производная $\partial D/\partial x = 0$, так как D достигает минимума при $x = x_c$.

Итак, три решения (т. е. трехзначность $n(x)$), а следовательно, и гистерезис, появляются только при выполнении условия

$$Q > Q_c, \quad Q_c = \frac{4a\Gamma^2}{3g} f_c = \frac{32a\Gamma^2}{9\sqrt{3}g}. \quad (30)$$

В противном случае гистерезис отсутствует. Это объясняет, почему гистерезисы не всегда наблюдаются экспериментально.

Второй важный вывод состоит в том, что критическое значение Q_c пропорционально квадрату ширины уровня Γ^2 . Это связано с тем, что чем меньше Γ , тем меньшее значение концентрации требуется для заметного изменения резонансного тока. Например, в модели [2], где $\Gamma = 0$, имеем $Q_c = 0$.

Область гистерезиса, т. е. значения n_2 и n_1 (x_2 и x_1) в экстремумах (см. рисунок), найдем из условия $dx/dn = 0$. В свою очередь, функцию $x(n)$ определим из уравнения (22), записанного в форме

$$x^2 - 2xn + n^2 + 1 - f/n = 0. \quad (31)$$

Решение уравнения (31) имеет вид

$$x = n + \sqrt{f/n - 1}.$$

Отсюда, беря производную

$$\frac{dx}{dn} = 1 - \frac{f}{2n^2\sqrt{f/n - 1}} = 0,$$

приходим к уравнению

$$n^3 f - n^4 = \frac{f^2}{4}, \quad n \leq f. \quad (32)$$

Если перейти к более удобным переменным

$$n = \frac{2N}{\sqrt{3}}, \quad f = \frac{8}{3\sqrt{3}} F, \quad F_c = 1, \quad (33)$$

то вместо (32) имеем

$$4N^3 F - 3N^4 = F^2, \quad N < \frac{4}{3} F. \quad (34)$$

Найдем решение уравнения (34) в предельных случаях $F \gg 1$ и $F \geq 1$. В первом случае

$$N_1 \approx \left(\frac{F}{4}\right)^{1/3}, \quad N_2 \approx \frac{4}{3} F, \quad (35)$$

$$x_1 \approx \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{F}{4}\right)^{1/3}, \quad x_2 \approx \frac{8F}{3\sqrt{3}}.$$

Отсюда видно, что область гистерезиса $x_2 - x_1$ возрастает пропорционально F , причем x_2 увеличивается гораздо быстрее, чем x_1 .

Если перейти к размерным величинам, то получим

$$\varepsilon_2 - \varepsilon_R = \frac{3Qg}{4a\Gamma},$$

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_R = (Q\Gamma)^{1/3} \left(\frac{3g}{16a}\right)^{1/3}.$$

Таким образом, с увеличением Γ значение ε_2 быстро убывает, а ε_1 медленно возрастает, так что область гистерезиса уменьшается.

Во втором предельном случае $F \geq 1$ (т. е. вблизи порога) имеем

$$N_{2,1} \approx F \pm \sqrt{\frac{F-1}{3}}, \quad (36)$$

$$x_{2,1} \approx \sqrt{3} + \frac{8(F-1)}{3\sqrt{3}} \pm \frac{16}{3}(F-1)^{3/2}. \quad (37)$$

Видно, что область гистерезиса

$$x_2 - x_1 = \frac{32}{3}(F-1)^{3/2} \quad (38)$$

медленно возрастает с увеличением F .

В то же время экстремальные значения концентрации расходятся с очень большой скоростью:

$$\frac{\partial}{\partial F}(N_2 - N_1) = \frac{1}{\sqrt{3(F-1)}} \rightarrow \infty, \quad F \rightarrow 1. \quad (39)$$

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Согласно полученным выше результатам, модель когерентного туннелирования взаимодействующих электронов предсказывает появление особенностей ВАХ, в частности гистерезиса, наблюдаемых экспериментально и качественно согласующихся с результатами модели некогерентного туннелирования [3, 6].

В то же время получены существенно новые результаты. Во-первых, это предсказание критического значения тока через резонансно-туннельный диод, ниже которого гистерезис отсутствует. Во-вторых, показано, что величина критического тока определяется шириной резонансного уровня (пропорциональна Γ^2 согласно (30)). Отсюда следует важный вывод, что гистерезис наблюдается при выполнении определенных условий (см. (30)). Это дает возможность проверить справедливость обсуждаемых выше интерпретаций.

Отметим, что, согласно упрощенной модели [3], в которой предполагалось, что $\Gamma = 0$, критический ток равен нулю и гистерезис должен наблюдаться

всегда. В более строгой модели некогерентного туннелирования [6] была отмечена зависимость ширины гистерезиса от ширины уровня Γ , но вывода о существовании критического тока не было сделано. Вольт-амперная характеристика рассчитывалась численно только для двух значений Γ .

Аналитическое решение системы (11)–(15) позволяет сделать полный анализ зависимости ВАХ от параметров резонансно-туннельного диода и величины тока.

Автор благодарен Ю. В. Копаеву за полезное обсуждение работы. Работа выполнена в рамках программы «Физика твердотельных наноструктур» Российского министерства Науки и технологии (проект 99-1140) и Российской Федеральной программы «Интеграция» (проект АО 133).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Esaki and R. Tsu, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973).
2. V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. E. Gunningham, Phys. Rev. Lett. **58**, 1257 (1987); **59**, 1263 (1987).
3. F. W. Sheard and G. A. Toombs, Appl. Phys. Lett. **52**, 1228 (1988).
4. T. Sollner, Phys. Rev. Lett. **59**, 1662 (1987).
5. K. L. Jensen and F. A. Buot, Phys. Rev. Lett. **66**, 1078 (1991).
6. Jun Zang and J. L. Birman, Phys. Rev. B **46**, 5020 (1992).
7. В. Ф. Елесин, ЖЭТФ **116**, 704 (1999).
8. Н. Н. Боголюбов, Ю. А. Митропольский, *Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний*, Физматгиз, Москва (1963).
9. Л. Д. Ландау, И. М. Лифшиц, *Механика*, Физматгиз, Москва (1958).