Физика низких температур, 1997, т. 23, № 4, с. 428–433

Нелинейное резонансное туннелирование через двукратно вырожденное состояние квантовой ямы

В.Н. Ермаков, Е. А. Понежа

Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Украина, 252143, г. Киев, ул. Метрологическая, 14б
E-mail: vloktev@gluk.apc.org

Статья поступила в редакцию 4 октября 1996 г.

В приближении малопрозрачных барьеров рассмотрено туннелирование электронов через двухбарьерную систему с учетом их кулоновского взаимодействия в межбарьерном пространстве (квантовой яме). Состояние электронов в квантовой яме предполагается двукратно вырожденным. Показано, что зависимость туннельного тока от напряжения имеет ступенчатый вид при низких температурах, а в области малых напряжений имеется пороговое значение. Рассмотренная система обладает также бистабильными свойствами.

В наближенні малопрозорих бар'єрів розглянуто тунелювання електронів крізь систему з двома бар'єрами з урахуванням кулонівської взаємодії в міжбар'єрному просторі (квантовій ямі). Стан електронів у квантовій ямі вважається двічі виродженим. Показано, що залежність тунельного струму від напруги має сходинковий вигляд при низьких температурах, а в області малих напруг є порогове значення. Розглянута система має також бістабільні властивості.

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Ty

Введение

Нелинейное резонансное туннелирование частиц через систему двух потенциальных барьеров предполагает их накопление в межбарьерном пространстве (квантовой яме) [1–3]. Для электронов это наблюдается, когда квантовая яма содержит достаточно большое количество состояний. Фактически такое условие требует макроскопических размеров системы, при которых может быть введено понятие электрической емкости [4]. Однако ситуация кардинально изменяется в случае вырожденных или близко расположенных энергетических уровней квантовой ямы. В этом случае, как будет показано в настоящей работе, даже микросистема может обладать нелинейными свойствами туннелирования. В дальнейшем ограничимся рассмотрением туннелирования электронов через систему двух барьеров с дважды вырожденным состоянием квантовой ямы, в которой возможно аккумулирование до четырех электронов. Учет взаимодействия между ними может приводить к ряду закономерностей, характерных для нелинейного туннелирования, например, появлению ступенчатого вида вольт-амперных зависимостей, бистабильности туннелирования и др. Существенной особенностью такой системы является то, что эти явления возможны также в одномерном случае, поскольку флуктуации практически подавлены. Последнее характерно для двухуровневых систем [5].

1. Гамильтониан системы

В качестве модели двухбарьерной туннельной системы будем рассматривать структуру с энергетическим профилем, представленным на рис. 1. Гамильтониан, описывающий прохождение электронов через такую систему, может быть выбран в виде

$$H = H_0 + H_W + H_T \,. \qquad (1)$$

Первый член этого гамильтониана

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_L(k) a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} \varepsilon_R(p) a^+_{p\sigma} a_{p\sigma} \qquad (2)$$

описывает электроны в левом (1-е слагаемое) и правом (2-е слагаемое) электродах (области *1* и *3* на рис. 1). Здесь $a^+_{k\sigma}(a_{k\sigma})$ и $a^+_{p\sigma}(a_{p\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) электронов в левом и правом электродах соответственно; $\varepsilon_L(k) = \varepsilon_L + \hbar^2 k^2/2m_L$ — энергия электронов в левом электроде; $\hbar k$ и m_L — их квазиимпульс и эффективная масса соответственно; σ — спин электрона. Для правого электрода с учетом внешнего потенциала

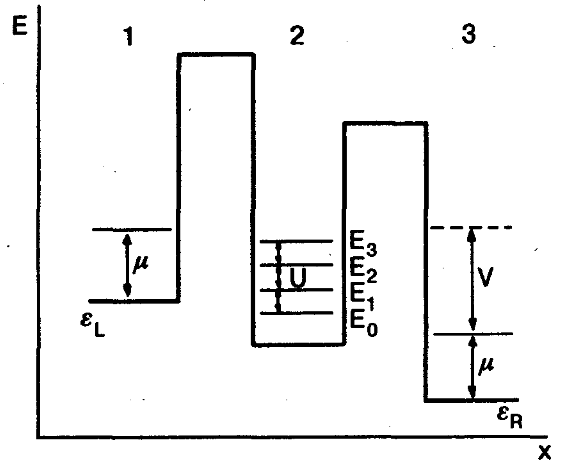

Рис. 1. Энергетический профиль двухбарьерной системы с приложенным внешним напряжением V.

V, приложенного к системе, $\varepsilon_R(k) = \hbar k/2m_R + \varepsilon_R - V$, $\hbar p$ — квазиимпульс, m_R — эффективная масса.

Гамильтониан H_W описывает состояния электронов в квантовой яме (область *2* на рис. 1). Будем рассматривать случай, когда в квантовой яме имеется двукратно вырожденное состояние. Тогда H_W может быть записан в виде

$$H_W = \sum_{\alpha} E_\sigma a_\alpha^+ a_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} V_{\alpha_1 \alpha_2} a_{\alpha_1}^+ a_{\alpha_2}^+ a_{\alpha_2} a_{\alpha_1} , \quad (3)$$

где $\alpha = (n, \sigma)$, σ — спиновое число; n — номер квантового состояния, принимающий значений 1 или 2. Энергия вырожденного состояния в яме с учетом приложенного напряжения записывается в виде $E_0 = \varepsilon_0 - \gamma V$, где ε_0 — энергия резонансного состояния в квантовой яме; γ — коэффициент, зависящий от профиля потенциальных барьеров (для одинаковых барьеров $\gamma = 0{,}5$); V_{α_1,α_2} — матричный элемент межэлектронного взаимодействия в межбарьерном пространстве. С целью упрощения будем аппроксимировать его постоянным положительным значением $V_{\alpha_1,\alpha_2} = U$, что соответствует отталкиванию.

Гамильтониан H_T, описывающий туннельный переход электронов через барьеры, имеет обычный вид [6]:

$$H_T = \sum_{k\alpha\sigma} T_{k\alpha} a_{k\sigma}^+ a_\alpha + \sum_{\alpha p\sigma} T_{p\alpha} a_{p\sigma}^+ a_\alpha + \text{c.c.} , \quad (4)$$

где $T_{k\alpha}$ и $T_{p\alpha}$ — матричные элементы туннелирования через левый и правый барьеры соответственно. В общем случае они зависят от приложенного напряжения.

2. Плотность состояний

Плотность состояний $\rho(E)$ в квантовой яме может быть определена с помощью запаздывающей функции Грина $G(\alpha, \alpha, E)$:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} \mathrm{Im}\, G(\alpha, \alpha, E) , \quad (5)$$

где $G(\alpha, \alpha, E)$ — фурье-образ запаздывающей функции Грина

$$G(\alpha, \alpha, t) = -i\Theta(t)\langle [a_\alpha^+(t), a_\alpha(0)] \rangle , \quad (6)$$

а $\Theta(t)$ — единичная функция Хевисайда.

Используя гамильтониан (3), функцию Грина можно вычислить точно. Например, для состояния $n = 1$ получим

$$G(1\sigma, 1\sigma, E) = \frac{1}{(E' - E_0)} \left\{ 1 + U \frac{n_{1\sigma} + n_{2\sigma} + n_{2-\sigma}}{E' - E_0 - U} + 2U^2 \frac{n_{2\sigma} n_{1-\sigma} + n_{2-\sigma} n_{2\sigma} + n_{1-\sigma} n_{2\sigma}}{(E' - E_0 - 2U)(E' - E_0 - U)} + \right.$$
$$\left. + \frac{6U^3 n_{1-\sigma} n_{2\sigma} n_{2-\sigma}}{(E' - E_0 - U)(E' - E_0 - 2U)(E' - E_0 - 3U)} \right\} , \quad (7)$$

$E' = E + i\eta$ при $\eta \to +0$. Здесь $n_\alpha = \langle a_\alpha^+ a_\alpha \rangle$ — средние значения чисел заполнения состояния α. Функция Грина имеет полюса при $E_m = E_0 + mU$, где $m = 0, 1, 2, 3$. Таким образом, межэлектронное взаимодействие приводит к расщеплению состояния в квантовой яме. Новые состояния отстоят друг от друга на величину U. Путем циклических перестановок индексов в формуле (7) получим функции Грина $G(\alpha, \alpha, E)$ для всех состояний квантовой ямы. Используя (7), можно вычислить плотность состояний в межбарьерном пространстве. Она зависит от чисел заполнения состояний n_α, являющихся функцией приложенного напряжения, и, следовательно, будет зависеть от последнего. Это обстоятельство является причиной нелинейности туннелирования.

3. Числа заполнения квантовых состояний в яме

Если приложить к системе постоянное внешнее напряжение, в ней установится неравновесное стационарное распределение электронов. Функции распределения электронов в электродах в силу их больших объемов будем предполагать равновесными, но с измененными химическими потенциалами. Последние связаны соотношением $\mu_L - \mu_R = V$ (где μ_L и μ_R — химические потенциалы левого и правого электродов соответственно). Функция распределения электронов в квантовой яме $g(E)$ существенно неравновесная. Она может быть найдена из условия равенства туннельного тока через левый и правый барьеры [6,7] и имеет вид

$$g(E) = \frac{1}{\Gamma(E)} \left[\Gamma_L(E)\, f_L(E) + \Gamma_R(E)\, f_R(E)\right], \qquad (8)$$

где

$$\Gamma(E) = \Gamma_L(E) + \Gamma_R(E)\,;$$
$$\Gamma_L(E) = \sum_k |T_{k\alpha}|^2\, \delta\left[E - \varepsilon_L(k)\right]\;; \qquad (9)$$
$$\Gamma_R(E) = \sum_p |T_{p\alpha}|^2\, \delta\left[E - \varepsilon_R(k)\right];$$

$f_L(E)$ и $f_R(E)$ — функции распределения электронов в левом и правом электродах соответственно. Степень заполнения состояний в квантовой яме может быть найдена с помощью выражения [8]:

$$n_\alpha = -\frac{1}{\pi}\int dEg(E)\, \mathrm{Im}\, G(\alpha, \alpha, E)\,. \qquad (10)$$

Как следует из (7), выражение для n_α не зависит от индекса α. Поэтому средние значения чисел заполнения также не зависят от номера квантового состояния, и мы можем полагать $n_\alpha = n$. Таким образом, окончательно получаем

$$n = \sum_{m=0}^{3} C_3^m g_m (1-n)^{3-m} n^m\,,\;\; C_3^m = \frac{3!}{m!(3-m)!}\,. \qquad (11)$$

Функции $g_m = g(E_m)$ определяют заселенность новых состояний. В общем случае уравнение (11) в интервале $0 < n < 1$ допускает три решения. Анализ показывает, что это возможно при $g_0 = g_1 = 0$, т.е., когда два нижних состояния не заполнены. Эти решения имеют вид

$$n_1 = 0\,,$$
$$n_{2,3} = -\frac{3}{2}\frac{g_2}{g_3 - 3g_2} \pm \left[\frac{9g_2^2 + 4(g_3 - 3g_2)}{4(g_3 - 3g_2)^2}\right]^{1/2}. \qquad (12)$$

Согласно условию $0 < n < 1$, из (12) следует

$$0 < \frac{3g_2}{3g_2 - g_3} < 2\,,$$
$$9g_2^2 - 4(3g_2 - g_3) > 0\,. \qquad (13)$$

Неравенства (13) совместимы, когда

$$g_2 \geq \frac{2}{3}\left(1 + \sqrt{1 - g_3}\,\right),\; g_3 > 3/4\,. \qquad (14)$$

Таким образом, уравнение (11) имеет три решения, когда g_2 и g_3 близки к единице. Два решения n_1 и n_3 являются устойчивыми, третье n_2 — неустойчиво. Устойчивые состояния соответствуют случаям, когда в яме либо нет электронов, либо есть два электрона, занимающих два верхних уровня. Последнее возможно, поскольку система является существенно неравновесной.

В одномерном случае, когда матричные элементы туннелирования не зависят от импульса, функции $\Gamma_L(E)$ и $\Gamma_R(E)$ могут быть аппроксимированы значениями [9]:

$$\Gamma_{L,R} = \alpha_{L,R}\sqrt{E - \varepsilon_{L,R}(0)}\,. \qquad (15)$$

Здесь α_L и α_R — коэффициенты пропорциональности для левого и правого электродов соответственно. Подставляя (15) в (8) и учитывая, что

$$f_{L,R} = \left[\exp\left(\frac{E - \mu_{L,R}}{k_B T}\right) + 1\right]^{-1}, \qquad (16)$$

где k_B — постоянная Больцмана, а T — температура, получаем выражение для функции распределения электронов g_m. Зависимость для g_0 от приложенного напряжения при различных значениях отношения α_L/α_R и $k_B T/\mu = 0{,}001$ показана на рис. 2. Функции g_m имеют такой же вид, но смещены по энергии на величину mU.

Полученный в результате решения уравнения (11) график зависимости заселенности квантовой ямы от приложенного напряжения (V/μ_L) при низкой температуре $(k_B T/\mu = 0{,}01)$ и значениях параметров $\alpha_L/\alpha_R = 33{,}3$; $\gamma = 0{,}5$; $\varepsilon_0/\mu_L = 1{,}2$; $U = 0{,}2$ представлен на рис. 3. Как видно из рисунка, с увеличением приложенного напряжения заселенность квантовой ямы возрастает ступенчатым

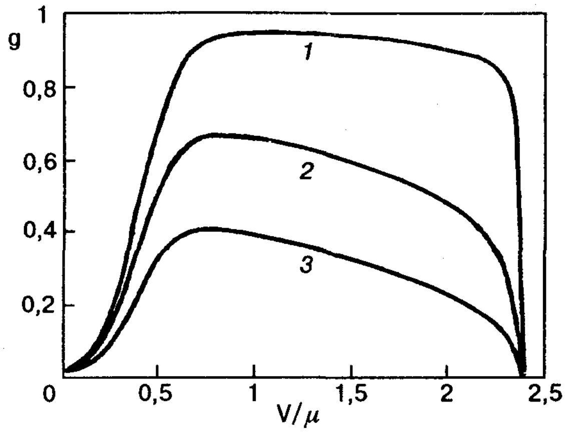

Рис. 2. Зависимость функции распределения электронов g в квантовой яме по энергии от приложенного напряжения V при различных значениях отношения α_L/α_R : 30 (*1*); 3 (*2*); 1 (*3*).

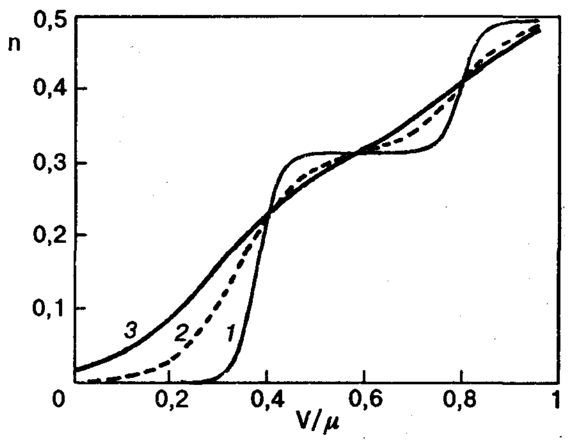

Рис. 4. Зависимость заселенности квантовой ямы n от приложенного напряжения V при различных температурах kT/μ: 0,01 (*1*); 0,03 (*2*); 0,05 (*3*).

образом, что обусловлено последовательным заполнением расщепленных состояний. При достижении некоторого критического значения напряжения V_{cr} происходит резкий спад населенности до нуля, что обусловлено выходом состояний в квантовой яме из резонанса. При уменьшении напряжения (от достигнутого ранее) скачок заселенности будет наблюдаться уже при меньшем значении напряжения V_{1cr} . Таким образом, в области напряжений от V_{1cr} до V_{cr} имеет место область бистабильности, что связано с удалением электронов с нижних уровней и зависанием их на верхних расщепленных состояниях. В области малых значений приложенного напряжения при низких температурах заполнение квантовой ямы начинается с некоторого порогового значения напряжения. На рис. 4 показана зависимость заселенности квантовой ямы n от напряжения в области порогового значения при различных значениях температуры. Форма ступеньки очень чувствительна к температуре и с ростом последней сильно сглаживается, что обусловлено размытием уровня Ферми. Менее чувствительной к температуре оказывается бистабильность туннелирования. Последнее обусловлено температурным разбросом электронов у дна электронной зоны, но этот эффект существен, когда k_BT порядка ширины зоны.

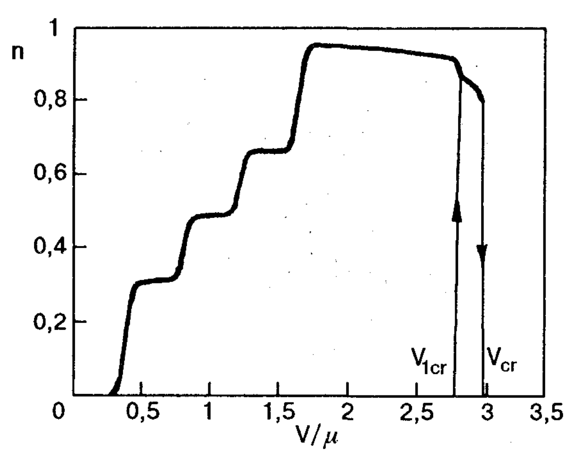

Рис. 3. Зависимость заселенности квантовой ямы n от приложенного напряжения V при $k_BT/\mu = 0{,}01$.

4. Туннельный ток

При постоянном приложенном напряжении туннельный ток через двухбарьерную структуру может быть вычислен различными способами (см., например, [7,9]). Для него получено простое выражение

$$J_{cd} = \frac{e}{\hbar} \int dE \, \frac{\Gamma_L(E)\Gamma_R(E)}{\Gamma(E)} \left[f_L(E) - f_R(E)\right]\rho(E) \, , \tag{17}$$

где e — заряд электрона. При малой прозрачности барьеров ($\Gamma \ll U$) для вычисления плотности состояний можно использовать выражение (5). Тогда, учитывая (8), (11) и (15), формулу (17) можно преобразовать к виду

$$J_{cd} = \frac{e}{\hbar} \sum_{m=0}^{3} \frac{\Gamma_R(E_m)\,\Gamma_L(E_m)}{\Gamma(E_m)} \times$$

$$\times \left\{f_L(E_m) - f_R(E_m)\right\}\left(1 - n\right)^{3-m} n^m C_3^m \, . \tag{18}$$

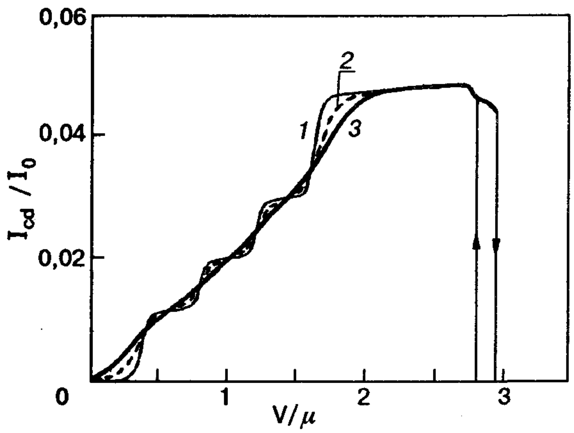

Рис. 5. Зависимость туннельного тока J_{cd}/J_0 ($J_0 = e/\hbar$) от приложенного напряжения V при различных температурах kT/μ: 0,01 (*1*); 0,03 (*2*); 0,05 (*3*).

Численный расчет J_{cd} при тех же параметрах, которые использовались для построения зависимостей на рис. 3, для различных значений температуры приведен на рис. 5. Ступенчатая зависимость тока от приложенного напряжения обусловлена расщеплением вырожденного уровня. При высоких напряжениях наблюдается область бистабильности, которая обусловлена зависанием двух электронов в верхних энергетических уровнях.

Заключение

Учет взаимодействия электронов в квантовой яме оказывает существенное влияние на резонансное туннелирование, приводя к качественно новым закономерностям. Ступенчатая структура вольт-амперной характеристики и ее пороговый характер имеют некоторую аналогию с эффектом одноэлектронного туннелирования [9]. Такая аналогия еще более усиливается, если моделировать квантовую яму сферой радиусом b, а матричный элемент взаимодействия U — усредненным кулоновским потенциалом

$$U = \frac{3}{2}\frac{e^2}{\epsilon_0 b}. \qquad (19)$$

Здесь ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость сферы. Если воспользоваться классическим определением электрической емкости для сферы $C = \epsilon_0 b$, то (19) можно представить в виде

$$U = \frac{3}{2}\frac{e^2}{C}. \qquad (20)$$

Это выражение, определяющее величину шага ступеньки тока, хорошо известно в теории одноэлектронного туннелирования. Однако в нашем подходе (20) трактуется как емкость ямы, а не как суммарная емкость на барьерах.

Важной особенностью рассматриваемой нами модели является ее устойчивость к флуктуациям. Действительно, простое рассмотрение флуктуаций чисел заполнения состояния ямы приводит к

$$\langle \delta n^2 \rangle = \langle (\hat{n} - n)^2 \rangle = n(1 - n). \qquad (21)$$

В области бистабильности n принимает значения близкие к единице или нулю. При этих значениях $\sqrt{\langle \delta n^2 \rangle} \ll n$. Однако в области ступенек тока флуктуации сравнимы с величиной заряда. Этот вывод подтверждается экспериментом [10]. С увеличением температуры ступеньки быстро размываются, что связано с размытием уровня Ферми. Их область существования ограничена температурой $kT \ll U$. Температурная зависимость бистабильности обусловлена изменениями функций g_m. Последние менее чувствительны к температуре. Бистабильность исчезает, когда $\max g(E) \le 3/4$. Это достигается уже при достаточно высоких температурах, сравнимых с μ. В области этих температур зависимостью от спина можно пренебречь, и ситуация становится аналогичной рассмотренной в работе [2].

1. B. Ricco and M. Ya. Azbel, *Phys. Rev.* **B29**, 1970 (1984).
2. A. S. Davydov and V. N. Ermakov, *Physica* **D28**, 168 (1987).
3. A. S. Davydov and V. N. Ermakov, *Nonlinear Bioenergetics and Nonlinear Tunneling in Molecular Systems* in: *Molecular Electronics and Molecular Electronic* Devices. vol. 2, CRC Press, Boca Raton (1990).
4. V. J. Goldman, D. C. Tsui, and J. Cunningham, *Phys. Rev. Lett.* 58, 1256 (1987).
5. J. H. Davis, P. Hydgaard, S. Hershfield, and J. W.. Wilkins, *Phys. Rev.* **B46**, 9620 (1992).
6. E. Runge and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.* **B45**, 9145 (1992).
7. L. Y. Chen and C. S. Ting, *Phys. Rev.* **B43**, 2097 (1991).
8. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1975).
9. D. V. Averin, A. N. Korotkov, and K. K. Likharev, *Phys. Rev.* **B44**, 6199 (1991).
10. Bo Su, V. J. Goldman, and J. E. Cunningham, *Phys. Rev.* **B46**, 7644 (1992).

Nonlinear resonant tunneling through double degenerate state of quantum well

V. N. Ermakov and E. A. Ponezha

Tunneling of electrons through a double-barrier system is considered in the approximation of low-transparence barriers taking into account their Coulomb interaction in the interbarrier space (a quantum well). The state of the electrons in the quantum well is supposed to be two-fold degenerated. It is shown that the dependence of the tunneling current on the applied voltage is of a steplike character at low temperatures; in the region of small applied bias there is a threshold value. The considered system also has bistability properties.