

周期耦合量子阱中的输运问题*

王海霞^{1)†} 殷 雯²⁾

1) 山西大学理论物理研究所, 太原 030006)

2) 中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(2007 年 8 月 17 日收到, 2007 年 10 月 30 日收到修改稿)

采用 Gurvitz 等人直接求解薛定谔方程的方法并结合数值计算, 分析了驱动频率对周期耦合量子阱体系的电流的影响. 结果表明: 当驱动频率小于耦合量子阱间的能级差时, 随着驱动频率的增大, 系统平衡时的电流增加, 当驱动频率大于耦合量子阱间能级差时, 随着驱动频率的增大, 平衡时的电流减小. 这样, 通过控制外场驱动频率来达到控制电流的目的.

关键词: 量子阱, 驱动频率, 电流

PACC: 0365, 0560

1. 引 言

从上世纪 80 年代开始, 随着半导体器件发展的微型化, 在短短的 20 多年里, 凝聚态物理这一门新兴学科——介观物理形成并迅速发展起来, 成为了凝聚态物理研究的一个新的热点, 而介观器件的研究更是炙手可热. 作为低维介观体系量子效应的典型代表——量子阱结构已经受到人们的广泛关注. 库仑阻力振荡, 量子隧穿^[1], 量子相干及由探测器产生的退相干机理^[2,3]等电子在量子阱中的运动都给予了不同方面的研究. 随着制造微观结构技术的进步, 电子在量子阱中的输运问题也成为理论和实验研究的热点^[4,5]. 单量子阱和多量子阱的常用研究方法有非平衡格林函数法, 概率形式分布法和直接求解薛定谔方程法^[6,7]. 除此之外, 一些特殊的量子阱模型也可以用其他方法^[8,9]. 本文基于 Gurvitz 等人直接求解薛定谔方程的方法^[6], 并结合数值计算分析了电子在周期驱动耦合量子阱中的输运问题.

2. 电子在耦合量子阱中的输运主方程

周期耦合双量子阱两边分别连接电子库(发射极和集电极), 即图 1. 其中 Ω_0 为周期耦合驱动振

幅, ω 为驱动频率, E_1, E_2 分别是阱中的孤立能级, T_L, T_R 为量子阱中能级与电子库的连接线宽, E_L, E_R 为两电子库的分立能级.

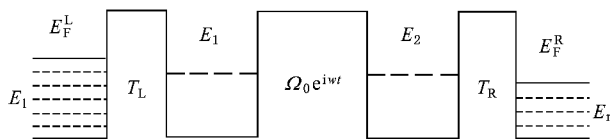


图 1 电子在周期耦合双量子阱中的隧穿模型

如果不考虑自旋和电子间的库仑力, 量子阱中最多只能有一个电子. 这样, 系统哈密顿量的二次量子化形式可表示为

$$H = \sum_l E_l a_l^\dagger a_l + E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 + \sum_r E_r a_r^\dagger a_r + \Omega_0 (a_1^\dagger a_2 e^{i\omega t} + a_2^\dagger a_1 e^{-i\omega t}) + \sum_l \Omega_l (a_l^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_l) + \sum_r \Omega_r (a_r^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_r), \quad (1)$$

Ω_l, Ω_r 分别是量子阱与所连接电子库的耦合系数, $a_i^\dagger, a_i (i, j = 1, 2, l, r)$ 是相应能级的产生、湮没算符. 为了方便起见, 考虑温度是零的情况, 初始时刻电子库中的电子填满至费米能级 E_F^L 和 E_F^R , 阱中均无电子, 这样的状态称为“真空态” $|0\rangle$. 假设在大偏

* 国家自然科学基金(批准号:10505029)资助的课题.

† 通讯联系人, E-mail: 13834518351@sohu.com

压下, 即 $E_F^L \gg E_{1,2} \gg E_F^R$, 系统是不稳定的, 电子将会从左边电子库隧穿到量子阱中, 又会从量子阱隧穿到右边电子库. 整个系统的状态演化函数写成

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle = & [b_0(t) + \sum_l b_{1l}(t) a_1^\dagger a_l \\
 & + \sum_{l,r} b_{lr}(t) a_r^\dagger a_l \\
 & + \sum_l b_{2l}(t) a_2^\dagger a_l \\
 & + \sum_{l'} b_{12l'}(t) a_1^\dagger a_2^\dagger a_l a_{l'} \\
 & + \sum_{l',r} b_{1l'r}(t) a_1^\dagger a_r^\dagger a_l a_{l'} + \dots] |0\rangle \quad (2)
 \end{aligned}$$

这里的 $b(t)$ 表示随时间变化的相应状态概率幅. 根据我们规定的初始条件知道: $b_0(0) = 1$, 其他的初始概率幅都为零.

下面采用 Gurvitz 等人的方法直接求解薛定谔方程. 首先, 把方程(1)和(2)代入薛定谔方程: $i|\dot{\psi}(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$, 比较系数, 对于每一个状态都可以列出一个方程, 这样, 就有无数个关于概率幅 $b(t)$ 的线性微分方程. 这些方程经过拉普拉斯变换 $\tilde{b}(E) = \int_0^\infty e^{iEt} b(t) dt$, 并考虑到初始条件, 就转化成了无数个关于 $\tilde{b}(E)$ 的代数方程:

$$E\tilde{b}_0(E) - \sum_l \Omega_l \tilde{b}_{1l}(E) = i, \quad (3a)$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l - E_1) \tilde{b}_{1l}(E) \\
 - \Omega_l \tilde{b}_0(E) - \Omega_0 \tilde{b}_{2l}(E + \omega) = 0, \quad (3b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l - E_2) \tilde{b}_{2l}(E) - \Omega_0 b_{1l}(E - \omega) \\
 - \sum_{l'} \Omega_{l'} \tilde{b}_{12l'}(E) - \sum_r \Omega_r \tilde{b}_{lr}(E) = 0, \quad (3c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l + E_r - E_1 - E_2) \tilde{b}_{12l'}(E) \\
 - \Omega_r \tilde{b}_{2l}(E) + \Omega_l \tilde{b}_{2r}(E) \\
 - \sum_r \Omega_r \tilde{b}_{1l'r}(E) = 0, \quad (3d)
 \end{aligned}$$

.....

接下来将(3)式中的求和转换成积分, 利用 $\sum_l \rightarrow$

$$\int_{-\infty}^{E_F^L} \rho_{Ll}(E_l) \lambda dE_l \text{ 和 } \sum_r \rightarrow \int_{E_F^R}^{\infty} \rho_{Rr}(E_r) \lambda dE_r, \text{ 其中}$$

$\rho_{lR}(E)$ 是左(右)端电子库的能态密度. 然后再求解积分, 为了能得到具体的表达式, 这里要有约束条件 $E_F^L - E_F^R$ 远远大于体系中的其他特征能量, 比如量子阱内的能级大小、能级之间的间隔、以及阱和电子库耦合的线宽等. 在这种假设下可以有 $E_F^L \rightarrow \infty$ 和 $E_F^R \rightarrow -\infty$, 这样上面的两个积分范围就是正、负无穷了, 从而有利于计算. 这里给出积分后的结果:

$$(E + i\Gamma_L/2) \tilde{b}_0(E) = i, \quad (4a)$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l - E_1) \tilde{b}_{1l}(E) - \Omega_l \tilde{b}_0(E) \\
 - \Omega_0 \tilde{b}_{2l}(E + \omega) = 0, \quad (4b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l - E_2 + i\Gamma_L/2 + i\Gamma_R/2) \tilde{b}_{2l}(E) \\
 - \Omega_0 b_{1l}(E - \omega) = 0, \quad (4c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (E + E_l + E_r - E_1 - E_2 + i\Gamma_R/2) \tilde{b}_{12l'}(E) \\
 - \Omega_r \tilde{b}_{2l}(E) + \Omega_l \tilde{b}_{2r}(E) = 0, \quad (4d)
 \end{aligned}$$

.....

式中

$$\Gamma_L = 2\pi\rho_L(E_1) |\Omega_l(E_1)|^2,$$

$$\Gamma_R = 2\pi\rho_R(E_2) |\Omega_l(E_2)|^2.$$

这里的方程有无穷多个是因为系统有无穷多个状态, 为了化简成有限个方程, 可以把所有的状态分为四类: 1) 两个阱中均无电子, 2) 能级是 E_1 的阱中有电子占据, 3) 能级是 E_2 的阱中有电子占据, 4) 两个阱中均有电子. 并分别用 σ_{aa} , σ_{bb} , σ_{cc} 和 σ_{dd} 表示相应状态的概率, σ_{bc} 表示状态 2) 和状态 3) 的相干性.

$$\begin{aligned}
 \sigma_{aa} = \sum_n \sigma_{aa}^{(n)} \equiv |b_0(t)|^2 \\
 + \sum_{l,r} |b_{lr}(t)|^2 + \dots, \quad (5a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{bb} = \sum_n \sigma_{bb}^{(n)} \equiv \sum_l |b_{1l}(t)|^2 \\
 + \sum_{l,r} |b_{1l'r}(t)|^2 + \dots, \quad (5b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{cc} = \sum_n \sigma_{cc}^{(n)} \equiv \sum_l |b_{2l}(t)|^2 \\
 + \sum_{l,r} |b_{2l'r}(t)|^2 + \dots, \quad (5c)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{dd} = \sum_n \sigma_{dd}^{(n)} \equiv \sum_{l'} |b_{12l'}(t)|^2 \\
 + \sum_{l'l'r'r'} |b_{12l'l'r'r'}(t)|^2 + \dots, \quad (5d)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \sigma_{bc} = \sum_n \sigma_{bc}^{(n)} \equiv \sum_l b_{1l}(t) b_{2l}^*(t) \\
 + \sum_{l'r} b_{1l'r}(t) b_{2l'r}^*(t) + \dots, \quad (5e)
 \end{aligned}$$

其中上标 n 表示隧穿到右边电子库的电子个数. 下面把方程(4)化为关于概率 $\sigma_{ij}^{(n)}$ 的方程. 例如, 将(4b)乘以 $\tilde{b}_{1l}^*(E')$ 得

$$\begin{aligned}
 (E + E_l - E_1) \tilde{b}_{1l}(E) \tilde{b}_{1l}^*(E') \\
 - \Omega_l \tilde{b}_0(E) \tilde{b}_{1l}^*(E') \\
 - \Omega_0 \tilde{b}_{2l}(E + \omega) \tilde{b}_{1l}^*(E') = 0, \quad (6)
 \end{aligned}$$

不难写出上式的共轭表达式并交换 $E \leftrightarrow E'$:

$$(E' + E_l - E_1) \tilde{b}_{1l}^*(E') \tilde{b}_{1l}(E)$$

$$\begin{aligned}
 & -\Omega_0 \tilde{b}_0^*(E') \tilde{b}_{1l}(E) \\
 & -\Omega_0 \tilde{b}_{2l}^*(E' + \omega) \tilde{b}_{1l}(E) = 0, \quad (7)
 \end{aligned}$$

然后将这两式相减：

$$\begin{aligned}
 & \sum_l (E - E') \tilde{b}_{1l}(E) \tilde{b}_{1l}^*(E) \\
 & - \sum_l \Omega_l [\tilde{b}_0(E) \tilde{b}_{1l}^*(E') - \tilde{b}_0^*(E') \tilde{b}_{1l}(E)] \\
 & - \Omega_0 \sum_l [\tilde{b}_{2l}(E + \omega) \tilde{b}_{1l}^*(E') \\
 & - \tilde{b}_{2l}^*(E' + \omega) \tilde{b}_{1l}(E)] = 0. \quad (8)
 \end{aligned}$$

由(4b)式得

$$\tilde{b}_{1l}(E) = \frac{\Omega_l \tilde{b}_0(E) + \Omega_0 \tilde{b}_{2l}(E + \omega)}{E + E_l - E_1},$$

代入(8)式的第二项,并将等式两边做拉普拉斯逆变换：

$$\begin{aligned}
 \sigma^{(n)} &= \sum_{l, \dots, r, \dots} \int \frac{dE dE'}{4\pi} \tilde{b}_{l, \dots, r, \dots}(E) \tilde{b}_{l, \dots, r, \dots}^*(E') \\
 & \times e^{i(E' - E)t},
 \end{aligned}$$

这样就可以得到概率密度矩阵元 $\sigma_{bb}^{(0)}$ 的方程表达式：

$$\dot{\sigma}_{bb}^{(0)}(t) = \Gamma_L \sigma_{aa}^{(0)} + i\Omega_0 (\sigma_{bc}^{(0)} e^{-i\omega t} - \sigma_{cb}^{(0)} e^{i\omega t}),$$

用同样的方法处理方程(4)中的其他项,就有以下方程：

$$\dot{\sigma}_{aa}^{(n)} = -T_L \sigma_{aa}^{(n)} + T_R \sigma_{cc}^{(n-1)}, \quad (9a)$$

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma}_{bb}^{(n)} &= T_L \sigma_{aa}^{(n)} + T_R \sigma_{dd}^{(n-1)} \\
 & + i\Omega_0 (\sigma_{bc}^{(n)} e^{-i\omega t} - \sigma_{cb}^{(n)} e^{i\omega t}), \quad (9b)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma}_{cc}^{(n)} &= -T_R \sigma_{cc}^{(n)} - T_L \sigma_{cc}^{(n)} \\
 & - i\Omega_0 (\sigma_{bc}^{(n)} e^{-i\omega t} - \sigma_{cb}^{(n)} e^{i\omega t}) \quad (9c)
 \end{aligned}$$

$$\dot{\sigma}_{dd}^{(n)} = -T_R \sigma_{dd}^{(n)} + T_L \sigma_{cc}^{(n)}, \quad (9d)$$

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma}_{bc}^{(n)} &= i\epsilon \sigma_{bc}^{(n)} + i\Omega_0 (\sigma_{bb}^{(n)} - \sigma_{cc}^{(n)}) e^{i\omega t} \\
 & - \frac{1}{2} (T_L + T_R) \sigma_{bc}^{(n)}. \quad (9e)
 \end{aligned}$$

再对等式两边所有的 n 求和,就可得到量子阱内能级占据状态的总概率密度矩阵

$$\begin{aligned}
 \dot{\sigma}_{aa} &= -T_L \sigma_{aa} + T_R \sigma_{cc}, \\
 \dot{\sigma}_{bb} &= T_L \sigma_{aa} + T_R \sigma_{dd} + i\Omega_0 (\sigma_{bc} e^{-i\omega t} - \sigma_{cb} e^{i\omega t}), \\
 \dot{\sigma}_{cc} &= -T_R \sigma_{cc} - T_L \sigma_{cc} - i\Omega_0 (\sigma_{bc} e^{-i\omega t} - \sigma_{cb} e^{i\omega t}), \\
 \dot{\sigma}_{dd} &= -T_R \sigma_{dd} + T_L \sigma_{cc}, \quad (10) \\
 \dot{\sigma}_{bc} &= i\epsilon \sigma_{bc} + i\Omega_0 (\sigma_{bb} - \sigma_{cc}) e^{i\omega t} \\
 & - \frac{1}{2} (T_L + T_R) \sigma_{bc},
 \end{aligned}$$

其中 $\epsilon = E_1 - E_2$, 同时它们满足条件

$$\sigma_{aa}(t) + \sigma_{bb}(t) + \sigma_{cc}(t) + \sigma_{dd}(t) = 1.$$

流过系统的总电流定义为右边电子库接收到的电子数随时间的变化：

$$\begin{aligned}
 I(t) e &= N(t) = \sum_n n [\dot{\sigma}_{aa}^{(n)}(t) + \dot{\sigma}_{bb}^{(n)}(t) \\
 & + \dot{\sigma}_{cc}^{(n)}(t) + \dot{\sigma}_{dd}^{(n)}(t)] \\
 & = \Gamma_R [\sigma_{cc}(t) + \sigma_{dd}(t)]. \quad (11)
 \end{aligned}$$

3. 电子输运性质的数值分析

在这里仅仅讨论平衡状态(即 $t \rightarrow \infty$)的情况,这时,电子布居数和系统电流都不再随时间变化。

从图 2 不难看出,无论是电子布居数还是体系电流在 $\omega = \epsilon$ 处都出现了极值,图像关于 $\omega = \epsilon$ 轴对称.这个现象可以这样理解:量子阱间的耦合由周期外场控制,当外场驱动频率 ω 等于量子阱间的能级差 ϵ ($\epsilon > 0$),位于第一个阱中的电子吸收一个能量为 $\hbar\omega$ ($\hbar = 1$) 的光子,电子隧穿得到加强,促进了电子在两个阱间的流动,此时,电流达到了最大值,电子占据概率 σ_{bb} 达到最小值.反之,当 $|\epsilon - \omega| \neq 0$ 时,电子在两个阱间的隧穿被削弱,随着 $|\epsilon - \omega|$ 的增大,隧穿难度增大,电子占据第一个量子点的概率增大,体系电流减小。

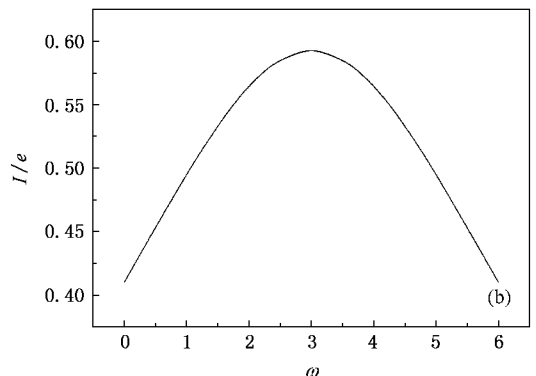
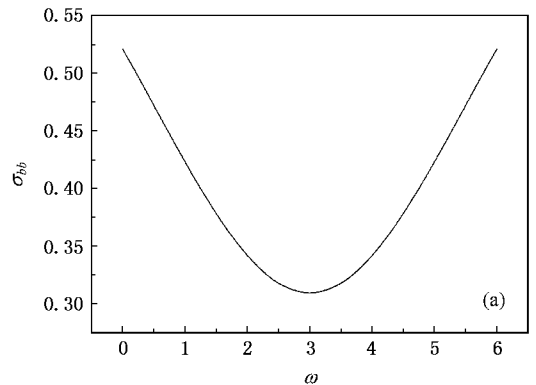


图 2 $T_L = 1, T_R = 2, \Omega_0 = 2, \epsilon = 3$ 时,电子布居数和系统电流随驱动频率的变化 (a) σ_{bb} 随频率的变化 (b) 系统电流随频率的变化

4. 体系的电流表达式

为了方便给出体系电流的解析解,首先通过么正变换把含时的哈密顿量(1)化为不含时的形式.例如,选择么正变换 $U = e^{-i\omega(a_2^\dagger a_2 + \sum_r a_r^\dagger a_r)} \chi^{[4]}$:

$$\begin{aligned} H' &= U^{-1} H U - i U^{-1} \frac{\partial U}{\partial t} \\ &= \sum_l E_l a_l^\dagger a_l + E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 \\ &\quad + \sum_r E_r a_r^\dagger a_r + \sum_l \Omega_l (a_l^\dagger a_1 + a_l^\dagger a_1) \\ &\quad + \Omega_0 (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \\ &\quad + \sum_r \Omega_r (a_r^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_r) \\ &\quad - \omega (a_2^\dagger a_2 + \sum_r a_r^\dagger a_r) \\ &= \sum_l E_l a_l^\dagger a_l + E_1 a_1^\dagger a_1 + (E_2 - \omega) a_2^\dagger a_2 \\ &\quad + \sum_r (E_r - \omega) a_r^\dagger a_r \\ &\quad + \sum_l \Omega_l (a_l^\dagger a_1 + a_l^\dagger a_1) \\ &\quad + \Omega_0 (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \\ &\quad + \sum_r \Omega_r (a_r^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_r), \end{aligned} \quad (12)$$

在上面的第二个等式中,利用了代数式 $e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2} [A, [A, B]] + \dots$ 和对易关系式 $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$.

接下来计算 $\omega = 0$ 情况下系统平衡时的电流. $t \rightarrow \infty$ 时,电子布居数不随时间变化,方程组(10)中等式左边均为0.通过简单的计算,不难算出体系的电流

$$I/e = \left(\frac{T_L T_R}{T_L + T_R} \right) \frac{\Omega_0^2}{\Omega_0^2 + T_L T_R / 4 + \epsilon^2 T_L T_R (T_L + T_R)}. \quad (13)$$

比较(12)式和 $\omega = 0$ 时的(1)式,考虑到本文的前提是大偏压 ($E_F^L \gg E_{1,2} \gg E_F^R$) 的情况,并且在第二部分假设 $E_F^L \rightarrow \infty$ 和 $E_F^R \rightarrow -\infty$,因此(12)式的第四项与(1)式的不同对计算结果不产生影响,产生影响的是第三项,它相当于降低了第二个阱中能级的能量,周期驱动下体系的电流只需将表达式(13)中的 ϵ 换成 $(\epsilon - \omega)$ 即可.这样,周期驱动下的体系电流就是

$$I/e = \left(\frac{T_L T_R}{T_L + T_R} \right) \times \frac{\Omega_0^2}{\Omega_0^2 + T_L T_R / 4 + (\epsilon - \omega)^2 T_L T_R (T_L + T_R)}. \quad (14)$$

这里得到的结果和前面数值计算的结果是一致的.

总之, $\omega < \epsilon$ 时,随着驱动频率 ω 的增大,体系的平衡电流增大, $\omega = \epsilon$ 时,体系的电流达到最大, $\omega > \epsilon$ 时,随着频率 ω 的增大,体系的电流减小.因此,可以通过控制周期驱动频率来控制电子在耦合量子阱中的隧穿,从而达到控制体系电流的目的.

5. 结 论

本文首先直接求解薛定谔方程,得到了电子在周期耦合双量子阱中的概率分布公式和系统的电流公式.然后通过数值计算分析了驱动频率对电子布居数和体系电流的影响.最后,通过简单的分析,给出周期驱动下耦合量子阱中电流的具体表达式,所得结果和数值分析的结果是一致的.因此,得出结论:可以通过调节外场驱动频率来达到控制系统电流的目的.

- [1] Zhu Y, Wang T H 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 677 (in Chinese) [竺云、王太宏 2003 物理学报 **52** 677]
- [2] Gurvitz S A 2005 *Phys. Rev. B* **72** 073303
- [3] Gurvitz S A 1997 *Phys. Rev. B* **56** 15215
- [4] Yu H, Liang J Q 2006 *Phys. Lett. A* **358** 39
- [5] Zhang P, Xue Q K, Xie X C 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 196602

- [6] Gurvitz S A, Ya. S. Prager 1996 *Phys. Rev. B* **53** 15932
- [7] Zhang Y P, Liang J Q 2004 *Phys. Lett. A* **329** 55
- [8] Yin W, Lai Y Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1862 (in Chinese) [殷雯、赖云忠 2003 物理学报 **52** 1862]
- [9] Zhang G F 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3693 (in Chinese) [张国锋 2007 物理学报 **56** 3693]

A periodic coupled quantum well transport ^{*}

Wang Hai-Xia^{1,2)†} Yin Wen²⁾

¹ *Institute of Theoretical Physics ,Shanxi University ,Taiyuan 030006 ,China)*

² *Institute of Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Beijing 100080 ,China)*

(Received 17 August 2007 ; revised manuscript received 30 October 2007)

Abstract

Using the method developed by Gurvitz S. A for solving Shrodinger equations and numerical calculation , we investigate the driving frequency dependence of the current of periodic coupled quantum wells. The results indicate that the stable current increases with the driving frequency on condition of the driving frequency being smaller than the energy difference between wells. Otherwise , the stable current will decrease with increasing driving frequency. Therefore ,the current of the system can be controlled by the driving frequency.

Keywords : quantum wells , driving frequency , current

PACC : 0365 , 0560

^{*} Project supported by the Major Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10505029).

[†] Corresponding author. E-mail : 13834518351@sohu.com