一类弯曲量子线的量子束缚态*

王传奎 江兆潭

(山东师范大学物理系,济南 250014) (1999年12月18日收到)

对电子在弯曲量子线中的弹道输运性质进行了理论研究.弯曲量子线由 T型量子线和单曲量子线组成.该有 限长的量子结构分别与两半无限长的量子通道相连,当施加一偏压时,量子通道分别可作为电子的发射极和收集 极.计算结果表明,当入射电子的能量小于量子结构横向上的第一个本征模时,电导存在两个峰.进一步指出,这些 峰来自于电子共振隧穿量子结构中的量子束缚态.并详尽地讨论了这些量子束缚态的性质.

关键词:量子束缚态,共振隧穿,电导,量子线 PACC:7215R,7220F,7335

1 引 言

在 GaAs/AlGaAs 异质结上可形成具有高迁移 率的两维电子气^{1]}. 当对该电子气施加进一步的限 制时,例如,利用分裂栅技术^[2],人们可制备出量子 线(一维电子气)和量子点(零维电子体系).在低温 下,电子的平均自由程可以大于实验室制备出的量 子线的长度,因此,电子在量子线中作弹道输运. Van Wees 等^{3]}和 Wharam 等^[4]独立地发现在量子 线中作弹道输运的电子的电导是量子化的,量子单 元为 $2e^2/h$.这一发现极大地引起了理论和实验工 作者对介观体系的兴趣^{5-8]}.

电导的量子化是由于电子横向能量的量子化. 可以证明⁹¹,在理想的情况下,每个能带对电导的 贡献为 2*e*²/*h*,这样一来,电导的值为几个量子化单 元 表明了电子占居了几个能带.因此,这一现象完 全是量子效应,即电子在量子线中的输运性质完全 由量子力学的基本原理来描述.

在这个充满活力的领域里,很多量子现象被发现^{10—12}.其中之一为在一些开放的量子结构中存 在着量子束缚态.Schult 等¹³计算了电子在两个交 叉的无限长的量子线中的能量及波函数,并且发现 了束缚态.利用量子力学的方法,Berggren和 J^{{14}]</sub> 研究了电子在有限长的具有十字形结构的量子线中 的输运性质,发现了电导的共振峰,并且证明了该共 振峰是共振隧穿结构中的量子束缚态的结果,从而 提出了一种利用电导的共振峰来探测量子束缚态的 方法.王等^[15]研究了电子在有限长的双曲量子线中 的输运性质,其理论结果较好地解释了吴等^[16]的实 验结果.最近,Carini等^[17]利用电磁场探测了弯曲 的波导中的束缚模.由于波导和量子线具有很多相 似的特点(量子线被称为电子波导),因此,Carini等 利用该方法间接地证实了弯曲量子线中束缚态的 存在.

本文研究了另一类有限长的量子结构,计算了 电子在此量子结构中的电导,从而得到了该量子结 构中量子束缚态的特点.在本文中,我们采用了单电 子近似模型,即多电子相互作用没有被考虑.这是由 于两方面的考虑,一方面,我们需要对单电子的性质 有一个基本的理解;另一方面,王等^[18]研究了电子 在量子结构中的弹道输运性质后,发现单电子近似 模型和多电子模型给出了相同的定性结果.

2 理论模型

图 1 给出了形成于 GaAs/AlGaAs 异质结上的 量子结构示意图.设电子被束缚于 y 方向上的方势 阱中,而在 x 方向上形成了电子的通道.由于 z 方 向上的势阱很窄,故在一般实验条件下,该方向上仅 有最低子能带被占据,因此在下面的工作中我们选 该子能带能量为能量零点,并忽略该方向的贡献.

^{*}山东省优秀中青年科学家奖励基金和国家教育部留学回国人员科研资助的课题.



图 1 有限长的量子结构示意图 量子结构和两个半 无限长的量子通道相连,并被分成 N 份,在每一份内, 电子的电势仅为 y 的函数

在单电子近似下,电子满足的有效质量方程为 $\left[-\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}}\left(\frac{\partial}{\partial x^{2}}+\frac{\partial}{\partial y^{2}}\right)+V(x_{\mathcal{V}})\right]\Psi(x_{\mathcal{V}})=E\Psi(x_{\mathcal{V}}),$ (1)

其中 m^* 为电子的有效质量.如图 1 所示 ,量子结构 沿 x 方向被分成 N 段 ,设势场在每段中仅为 y 的函

数 则
$$V_i(x, y) = V_i + V_i(y)$$
,并且令 $V_i \equiv 0$.

现以第 *i* 段与第 *i* +1 段为例进行讨论.在第 *i* 段中,电子的波函数按一套完备基矢展开

$$\Psi_{i}(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} (B_{i,n} e^{iq_{i,n}x} + C_{i,n} e^{-iq_{i,n}x}) \Phi_{i,n}(y),$$
(2)

其中 , $\Phi_{i,y}$ (y)满足的方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_i(y)\right]\Phi_{i,m}(y) = E_{i,m}\Phi_{i,m}(y),$$
(3)

并且有

$$q_{i,n} = \begin{cases} \sqrt{2m^{*}(E - E_{i,n})\hbar^{2}} & E > E_{i,n}; \\ i\sqrt{2m^{*}(E_{i,n} - E)\hbar^{2}} & E < E_{i,n}. \end{cases}$$
对于第 *i* + 1 段 我们亦有与上类似的表达式.

根据波函数的连续性条件,即波函数及其一阶 导数在边界 x;处连续,于是有

$$\sum_{n} (b_{i,n} e^{iq_{i,n}x_{i}} - c_{i,n} e^{-iq_{i,n}x_{i}})_{q_{i,n}} \Phi_{i,n}(y) = \sum_{n} (b_{i+1,n} e^{iq_{i+1,n}x_{i}} - c_{i+1,n} e^{-iq_{i+1,n}x_{i}})_{q_{i+1,n}} \Phi_{i+1,n}(y).$$
(5)
$$\Phi^{*} () = \sum_{n} (b_{i,n} e^{iq_{i,n}x_{i}} - c_{i,n} e^{-iq_{i,n}x_{i}})_{q_{i+1,n}} \Phi_{i+1,n}(y).$$
(5)

以 $\Phi_{i,m}^{*}(y)$ 和 $\Phi_{i+1,m}(y)$ 分别乘(4)和(5) 式两端并对 y 积分可得

$$b_{i m} e^{iq_{i m}x_{i}} + c_{i m} e^{-iq_{i m}x_{i}} = \sum_{n} (b_{i+1 n} e^{iq_{i+1 n}} + c_{i+1 n} e^{-iq_{i+1 n}x_{i}}) S_{m n} , \qquad (6)$$

$$\sum_{n} (b_{i,n} e^{iq_{i,n}x_{i}} - c_{i,n} e^{-iq_{i,n}x_{i}}) \eta_{i,n} \overline{S}_{m,n} = (b_{i+1,m} e^{iq_{i+1,m}x_{i}} - c_{i+1,m} e^{iq_{i+1,m}x_{i}}) \eta_{i+1,m}.$$
(7)

这里,我们分别利用了{ $\Phi_{i,n}(y)$ }和{ $\Phi_{i+1,n}(y)$)的 正交归一性,并且有

$$S_{m,m} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{i,m}^{*}(y) \Phi_{i+1,m}(y) dy,$$

$$\overline{S}_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{i+1,m}^{*}(y) \Phi_{i,n}(y) dy. \quad (8)$$

现把 6 和 7 武写成矩阵方程

$$A_{i} \begin{bmatrix} B_{i} \\ C_{i} \end{bmatrix} = A_{i+1} \begin{bmatrix} B_{i+1} \\ C_{i+1} \end{bmatrix}, \qquad (9)$$

式中 B_i , C_i , B_{i+1} 和 C_{i+1} 是展开系数矩阵,其矩阵 元分别为{ $b_{i,m}$ }, { $c_{i,n}$ }, { $b_{i+1,m}$ }和{ $c_{i+1,m}$ }, 而矩阵 A_i 和 A_{i+1} 可表示为

$$\begin{split} A_{i} &= \begin{pmatrix} P^{i} & P^{i} \\ Q^{i} &- Q^{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma^{i} & 0 \\ 0 & (\gamma^{i})^{-1} \end{pmatrix},\\ A_{i+1} &= \begin{pmatrix} P^{i+1} & P^{i+1} \\ Q^{i+1} &- Q^{i+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma^{i+1} & 0 \\ 0 & (\gamma^{i+1})^{-1} \end{pmatrix} (10) \end{split}$$
在上式中 γ^{i} 和 γ^{i+1} 分别是对角矩阵,其对角元分别

为(γ^{i})_{aa} = exp($iq_{i,\alpha}x_{i}$)和(γ^{i+1})_{aa} = exp($iq_{i+1,\alpha}x_{i}$),子 矩阵 P^{i} , Q^{i} , P^{i+1} 和 Q^{i+1} 则分别被定义为(P^{i})_{ab} = $\delta_{\alpha\beta}$ (Q^{i})_{ab} = $q_{i,\beta}\overline{S}_{\alpha\beta}$ (P^{i+1})_{ab} = $S_{\alpha\beta}$ 和(Q^{i+1})_{ab} = $q_{i+1,\alpha}\delta_{\alpha\beta}$.

如果以 A_i⁻¹ 左乘(9)式 则(9)式变为

$$\begin{bmatrix} B_i \\ C_i \end{bmatrix} = A_i^{-1} A_{i+1} \begin{bmatrix} B_{i+1} \\ C_{i+1} \end{bmatrix} = M_{i,i+1} \begin{bmatrix} B_{i+1} \\ C_{i+1} \end{bmatrix} (A = 1)$$

式中 $M_{i,i+1} = A_i^{-1}A_{i+1}$ 易见它把第 i 段和第 i + 1段波函数的展开系数连接起来.

设量子结构的左端和右端分别与一无限长的量 子线相连 则左端量子线的波函数可写为

$$\Psi_{0}(x,y) = \sum_{n} (e^{iq_{0,n}x} \delta_{n,l} + C_{0,n} e^{-iq_{0,n}x}) \Phi_{0,n}(y),$$
(12)

而右端量子线的波函数为

$$\Psi_{N+1}(x,y) = \sum_{n} B_{N+1,n} e^{iq_{N+1,n}x} \Phi_{N+1,n}(y). \quad (13)$$

由于我们研究电子自左到右的输运性质,故在右端 量子线中只有向右传播的波,同时为方便起见,我们 选择左端量子线波函数的入射波部分的振幅为1. 利用递推关系(11)式,我们有

$$\begin{bmatrix} B_0 \\ C_0 \end{bmatrix} = M_0 _{N+1} \begin{bmatrix} B_{N+1} \\ C_{N+1} \end{bmatrix} = \prod_{i=0}^N M_i _{i+1} \begin{bmatrix} B_{N+1} \\ C_{N+1} \end{bmatrix}, (14)$$

在(14)式中,子矩阵 B_0 的矩阵元 $\{B_0\}_n = \delta_{n,l}$,代表 着左端量子线第l个通道被开通,子矩阵 C_{N+1} 为零 矩阵.求解矩阵方程(12),我们可以得到展开系数 $\{c_{0,n}\}$ 和 $\{b_{N+1,n}\}$,然后利用递推关系(11)式可求 出任一段中波函数的展开系数.

对于以能量 E 入射的电子波,由任意一段的波 函数求得的穿过量子通道的电流为

$$j(k) = \frac{ie\hbar}{2m^*} \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[\Psi_i^*(x,y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_i(x,y) - \Psi_i(x,y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_i^*(x,y) \right] \\ = -\frac{e\hbar}{m^*} \left[\sum_{n}^{\text{Re}} q_{i,n}(b_{i,n} b_{i,n}^* - c_{i,n} c_{i,n}^*) + \sum_{n}^{\text{Im}} q_{i,n}(b_{i,n} c_{i,n}^* - c_{i,n} b_{i,n}^*) \right], \quad (15)$$

式中 Re(Im)表示对 $q_{i,n}$ 为实数(虚数)的 n 取和, 且 $k = \sqrt{2m^* E/\hbar^2}$.

考虑到线性输运,即对量子结构施加弱的偏压 V 根据泡利不相容原理,能量范围在($E_{\rm F}$ – eV, $E_{\rm F}$)的入射电子对电流有贡献,这样,在T = 0 K,我 们可以近似地给出量子给结构电导的表达式

$$G = -\frac{2em^* j(k)|_{|k|=k_{\rm F}}}{h^2}.$$
 (16)

需要指明的是,在上面的推导过程中,量子结构 中任一段的波函数按一套完备矢展开,很显然基矢 的个数是无限多的,然而在数值计算中,我们只能使 用有限个数的基矢.因此我们必须把无限多的基矢 截断成有限多,这种近似称为截断近似.根据我们的 经验和其他作者的工作^{14,151},如选取的基矢个数是 开通通道个数的8倍,可以得到收敛的结果.在计算 过程中,我们按照这个规则来截取基矢的个数.

3 数值结果与讨论

利用上一节建立的理论模型,我们计算了一类 量子结构的电导.图2给出了该类量子结构的示意 图,该结构可看作为T型和单曲量子线结构的混合 体.电子的有效质量 $m^* = 0.067 m_e$.在计算过程 中,我们保持连接于量子结构的左端和右端量子线 的宽度不变(即 W 不变),而改变入射电子的能量.

对应于图 2 所示的弯曲量子线,电导随能量的 变化曲线由图 3(b)给出相应的 T型和单曲量子结 构的结果由图 3(a)和图 3(c)给出.根据量子结构的 结构参量,我们计算出 I 区和 III 区的 y 方向上第一 个本征模为 $E_1 = 6.22$ meV,即只有 $E > E_1$ 时整个 通道才被开通.然而当 $E < E_1$ 时,从图 3(b)中可以



图 2 弯曲的量子线



图 3 电导随入射电子能量的变化曲线 W = 100 nm t= $t_0 = 30 \text{ nm}$ (a)为 T型量子线 (b)为对应图 2 的结构; (c)为单曲量子线

看到,在 E = 4.95 meV 和 E = 5.91 meV 时电导存 在着两个峰 $G_1 = 2e^2/h$ 和 $G_2 = 0.19(2e^2/h)$,根据 量子力学理论,这是共振隧穿的结果.即在量子结构 中存在着两个束缚态.由于该类结构对于经典粒子 来说是非束缚体系,因此称该束缚态为量子束缚态. 由以前的结果可知^{19 201},一个孤立的 T 型量子结 构和孤立的单曲量子结构(见图 3 中的插图)分别存 在着一个量子束缚态.因此,图 2 所示的结构中的两 个量子束缚态为耦合量子束缚态.设孤立的 T 型量 子结构的束缚态的能量和波函数分别为 $E_{
m T}^0$ 和 $\phi_{
m T}^0$, 而单曲量子结构则为 $E_{
m S}^0$ 和 $\phi_{
m S}^0$,利用非简并微扰理 论可得

$$E_{g} = E_{T}^{0} + E_{T}^{1} + |V_{TS}|^{2} (E_{T}^{0} - E_{S}^{0}),$$

$$E_{e} = E_{S}^{0} + E_{S}^{1} + |V_{TS}|^{2} (E_{S}^{0} - E_{T}^{0}),$$

$$\psi_{g} = \psi_{T}^{0} + V_{TS}^{\prime} \psi_{S}^{0} (E_{T}^{0} - E_{S}^{0}),$$

$$E_{e} = E_{S}^{0} - E_{S}^{0} (E_{T}^{0} - E_{S}^{0}),$$

 $\psi_{e} = \psi_{S}^{0} + V_{TS}^{\prime} \psi_{T}^{0} (E_{S}^{0} - E_{T}^{0}),$ (17) 式中 V_{TS}^{\prime} 为两态的相互作用矩阵元 , E_{T}^{1} 和 E_{S}^{1} 为相 应的一级能量修正. 由图 3 可见 , $E_{g} \approx E_{T}^{0}$ 和 $E_{e} \approx E_{S}^{0}$,因此,对于目前的结构参量,相互作用矩阵元是 非常小的.

图 4 给出了 E_g = 4.95 meV 和 E_e = 5.91 meV 两态的概率分布等高线.由图 4 可见,对应于 E_g = 4.95 meV 的量子束缚态基本上集中在结构的 T 型 处,而另一个束缚态主要集中在结构的单个弯曲处, 与(17)式是一致的.



图 4 图 3(b)所示电导共振峰对应的态的概率分布等高线 (a)为 *E*_g=4.95 meV (b)为 *E*_e=5.91 meV

量子束缚态的存在表明量子结构中存在着势 阱^{21]}因此 耦合量子束缚态来自于势阱的耦合.对 于本文研究的结构(即 T 型结构和单曲结构的混合体),这两个势阱是非对称的,并且,可以看到在 III 区 中电子有两个出口,分为上出口和下出口.当入射粒 子的能量等于 E_g 时,电子基本上隧穿第一个势阱 而从上出口流出,因此共振隧穿概率为 1,此时电导 取峰值 $G = 1 \times 2e^2/h$.当入射粒子的能量等于 E_e 时,电子主要隧穿两个非对称的势阱而从下出口流 出,因此,共振隧穿概率远小于 $1^{[22]}$,此时共振隧穿 概率为 0.19,即电导取峰值 $G = 0.19 \times 2e^2/h$.应当 指出的是,对于这种情况,利用该技术不能很好地给 出束缚态的波函数.

为了说明束缚态间的相互作用,我们改变 W 而保留其他参量不变.图 5 给出了电导随能量的变 化曲线.由图 5 可见,当 W 减小时,第一个共振峰 向能量低的方向移动,而第二个共振峰向能量高的 方向移动,即两个能级的间距变大,这说明了束缚态 的相互作用增强了.从结构上分析,当 W 减小时, 易见两束缚态的距离变短了,即束缚态的相互作用 增强了.





图 6 电导随入射电子能量的变化曲线 t = 30 nm; W = 100 nm (a)为 $t_0 = 40 \text{ nm}$ (b)为 $t_0 = 30 \text{ nm}$ (c)为 $t_0 = 20 \text{ nm}$

对于不同的势垒宽度 t₀,电导随能量的变化曲 线由图 6 给出.由图 6 可见,当 t₀ 增加时,电导共振 峰的位置不变,但共振峰变得越来越窄,即探测共振 峰所需的能量精度越来越高.因此,要想在实验上探 测到电导的共振峰,势垒的宽度 t₀ 应做的尽量窄.

利用数值方法,我们计算了一类弯曲量子结构 的电导.结果表明,在入射电子的能量小于结构的第 一个横向模的范围内,电导存在着两个共振峰.我们

- [1] M. J. Kelly, Low-Dimensional Semiconductors: Materials, Physics, Technology, Devices (Oxford University Press, Oxford, 1995), p. 2, 7, 41.
- [2] H. Z. Zheng ,H. P. Wei ,D. C. Tsui ,G. Weimann ,Phys. Rev. , B34 (1986) 5635.
- [3] B. J. van Wess, H. van Houten, J. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* 60(1988) 848.
- [4] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, G. A. C. Jones J. Phys. C21(1998) 209.
- [5] H. Chang, R. Grundbacher, T. Kawanura, J. P. Leburton, I. Adesida, Semicond. Sci. Technol. 9(1994) 210.
- [6] C. C. Eugester J. G. del Alamo , M. R. Melloch , M. J. Rooks , *Phys. Rev.* B46(1992),10146.
- [7] E.G. Haanappel ,D. van der Marel ,Phys. Rev. ,B39(1989), 5484.
- [8] G. Kirczenow "Solid State Commun. 68(1988),715.
- [9] C. K. Wang ,Electronic Structure and Transport in Nanofabricated Low-Dimensional Semiconductor Systems (Unitryck, Linkoping Sweden, 1997).
- [10] T.A.Fulton G.J. Doan , Phys. Rev. Lett. 59 (1987), 109.

进一步指出,电导的共振峰是由于电子共振隧穿结 构内的量子束缚态的结果.该量子束缚态为耦合束 缚态.我们的结果对应着 *T*=0K的情况.在有限温 度下,温度效应使电导的峰值变低和峰变宽^[15],从 而增加了实验探测的难度.对于我们的结果,在 *T* =0K时,对应能量高的束缚态的电导峰值比较低, 因此,在有限温度下,此峰是不易观测到的.

- [11] P. Delsing ,T. Claeson ,K. K. Linkharev ,L. S. Kuzmin , *Phys. Rev.* **B42** (1990),7439.
- [12] L. P. Kouwenhoven et al. , Phys. Rev. Lett. 67 (1991), 1626.
- [13] R. L. Schult ,D. G. Ravenhall ,H. W. Wyld , Phys. Rev. ,B39 (1989) 5476.
- [14] K.F.Berggren , Z.L.Ji , Phys. Rev. , B43 (1991) A360.
- [15] C. K. Wang, K. F. Berggren, Z. L. Ji, J. Appl. Phys., 77 (1995) 2564.
- [16] J.C. Wu ,M. N. Wybourne ,W. Yindeepol ,A. Weisshaar ,S. M. Goodnick ,Appl. Phys. Lett. 59 (1991),102.
- [17] John P. Carini , J. T. Londergan , D. P. Murdock , Phys. Rev. , B55(1997) 9852.
- [18] J. Wang, Y. J. Wang, H. Guo, J. Appl. Phys., 75(1994), 2721.
- [19] H. Wu ,D. W. L. Sprung J. Martorell S. Klarsfeld , Phys. Rev. , B44(1991), 6351.
- [20] A. Weisshaar et al. J. Appl. Phys. **70** (1991) 355.
- [21] H. Wu ,D. W. L. Sprung J. Martorell , Phys. Rev. , B45 (1992), 11960.
- [22] S. S. Yan ,Z. Z. Gan ,Mesoscopic Physics (Peking University Press ,Beijing ,1995),p. 257(in Chinese) 阎守胜、甘子钊,介 观物理(北京大学出版社,北京,1995),第 257页].

QUANTUM BOUND STATES OF ONE KIND OF BENT QUANTUM WIRES*

WANG CHUAN-KUI JIANG ZHAO-TAN

(Department of Physics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China) (Received 18 December 1999)

Abstract

The ballistic transport properties of electrons in bent quantum wires are studied. The bent quantum wire composed of T-typed and single-bent quantum wires has finite length and connects to two semi-infinite quantum channels, which serve as emitter and collector when a potential difference is applied. The numerical results show that the conductance have two peaks at the energy of electrons less than the eigenvalue of the first transverse mode. Furthermore, these peaks are due to the resonant tunneling via bound states in the quantum structure. The detailed studies of these quantum bound states are shown in the paper.

Keywords : quantum bound states , resonant tunneling , conductance , quantum wire **PACC** : 7215R , 7220F , 7335

^{*} Project supported by the Shandong Distinguished Middle-Young Scientist Foundation, China and by the Scientific Research Foundation of the State Education Ministry for Returned Overseas Chinese Schotar.