

考虑透射概率的能量选择性电子热泵*

何济洲[†] 贺兵香

(南昌大学物理系, 南昌 330031)

(2009 年 3 月 16 日收到; 2009 年 8 月 13 日收到修改稿)

研究了具有不同温度和不同化学势的两个热库中的电子通过一个能量透射谱进行传输的问题, 得到电子通过能量透射谱传输所产生的热流. 进一步考虑了两个热库之间的辐射热漏流, 数值计算出电子热泵的性能参数, 绘出了热泵的性能特征曲线. 分析了热漏、共振中心能级位置和能级宽度等参数对热泵工作性能的影响. 当共振能级宽度无限小时, 热泵系数可以达到 Carnot 值.

关键词: 透射谱, 态密度, 辐射热漏, 电子热泵

PACC: 0570L, 7210, 7980, 0720

1. 引 言

传统的制冷、制热技术是以机械或化学技术为基础和依靠介质的液态、气态变化或化学变化来实现的, 而高能电子热泵制冷和制热技术是通过电子携带能量迁移来实现的. 后者由于其高效能和无污染性的优点引起了科学家的极大兴趣. 近年来许多科研工作者在这方面做了很多的研究, 并取得了一些非常有意义的成果. 早期 Mahan 就提出利用热电子技术代替污染严重的氟里昂压缩机^[1,2]. Linke 等人结合理论和实验得到了电子在量子点中的传输性质^[3], 随后又通过数值模型分析提出了弹道量子锯齿中净粒子流反转的物理过程^[4], 为后继的相关研究提供了理论基础. Humphrey 等在分析可逆量子布朗电子热机时指出, 任意温度和化学势的两个热库在电子 Fermi 分布相等的地方它们之间的电子交换是可逆的, 如果选择理想“能量过滤器”并且忽略热漏, 电子热机的效率将接近 Carnot 效率^[5]. 经过比较固态热离子制冷机和热电子制冷机的特性, Ulrich 等^[6]认为, 对于目前已经知道的材料来说, 单势垒中热电子制冷要比热离子制冷效率高. 近期 Wang 等^[7]考虑了通过理想能量过滤器传输的能量选择性电子热机和制冷机. Wu 等^[8]通过二极管中热场电子发射研究了低温制冷. 由于现代技术的发展, 越

来越多的材料被研制出来, 随之也出现了像金属超晶格^[9-12]、纳米材料^[13-16]和半导体异质结^[17-22]中电子和热电子的传输^[23,24]等问题的研究.

Humphrey 等^[5]研究了一维系统中不考虑热漏时, 电子选择性热机和制冷机的性能特征. 在此基础上 Wang 等^[7]研究了三维情况. 经比较我们发现考虑一维和三维系统时得到的性能曲线没有本质上的差别. 为了更进一步接近实际, 本文分析了一维纳米结构系统中两个热库之间的电子通过一个 Lorentz 型函数的能量透射谱 $t(\varepsilon)$ 进行传输, 并考虑热库之间的辐射热漏. 电子热泵以两个具有不同温度和化学势的热库组成, 两个库中的电子作为工作物质. 当电子在外界作用下从低温库流入高温库时就形成了电子热泵, 电子热泵如图 1 所示.

两个高低温热库的温度分别为 T_H 和 T_C , 相应的化学势为 μ_H 和 μ_C , 中间为一个 Lorentz 函数形式的“能量过滤器”, 电子以一定的概率在两个热库之间传输. 在低温库加一偏压 eV_0 使其化学势大于高温库的化学势 $\mu_C > \mu_H$. 由于电子的传输引起的热量改变为 $\Delta Q = \varepsilon - \mu$, 其中 ε 为电子在库中的能量, μ 为热库的化学势. 当电子在两个库中传输时, 低温库的热量改变量为 $-\Delta Q_C = -(\varepsilon - \mu_C)$, 负号表示流出热量, 高温库的热量改变量为 $\Delta Q_H = (\varepsilon - \mu_H) Q_{\text{Rad}}$ 为单位时间的辐射热漏流, $\dot{Q}_{\text{Rad}} = k_R (T_H^4 - T_C^4)$, k_R 是辐射热漏系数.

* 国家自然科学基金(批准号:10765004)资助的课题.

[†] E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn

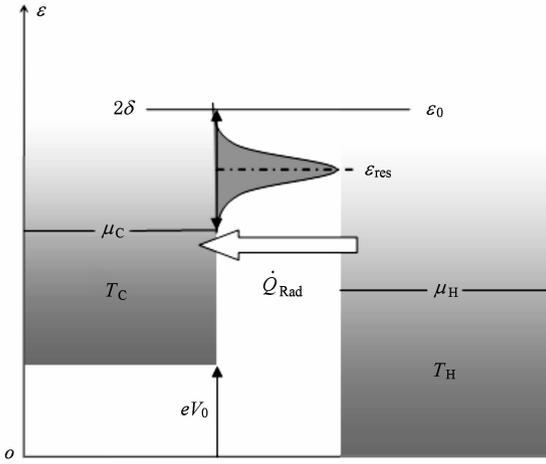


图 1 能量选择性电子热泵示意图

2. 电子传输特性

电子在两个库之间传输系统的熵增为^[5]

$$\begin{aligned} \Delta S &= \frac{\Delta Q_C}{T_C} + \frac{\Delta Q_H}{T_H} \\ &= -\frac{(\varepsilon - \mu_C)}{T_C} + \frac{(\varepsilon - \mu_H)}{T_H}. \end{aligned} \quad (1)$$

令 $\Delta S = 0$, 得到 $\varepsilon_0 = \frac{(\mu_C T_H - \mu_H T_C)}{(T_H - T_C)}$. 在这个能量处两个库的电子 Fermi 分布相等 $f_C(\varepsilon_0) = f_H(\varepsilon_0)$, $f_H(\varepsilon_0)$ 和 $f_C(\varepsilon_0)$ 为两个库中电子在能量为 ε_0 点的 Fermi-Dirac 分布函数,

$$\begin{aligned} f_H(\varepsilon_0) &= 1 / \{ 1 + \exp[(\varepsilon_0 - \mu_H) / k_B T_H] \} \\ f_C(\varepsilon_0) &= 1 / \{ 1 + \exp[(\varepsilon_0 - \mu_C) / k_B T_C] \}, \end{aligned}$$

其中 k_B 为 Boltzmann 常数. 在能量 $\mu_C < \varepsilon < \varepsilon_0$ 范围内电子的传输表现为热泵的过程.

借助态密度和能量透射谱可以得到流入每个库的热流, 流入每个库的热流包括两个部分: 电子传输引起的热流和从高温热库到低温热库的辐射热漏流. 辐射热漏流可以写为

$$\dot{Q}_{\text{Rad}} = k_R (T_H^4 - T_C^4). \quad (2)$$

根据等温等压下开系的热力学定律

$$\dot{U}_{H/C} = \dot{Q}_{H/C} + \mu_{H/C} \dot{N}, \quad (3)$$

其中, $\dot{U}_{H/C} = \varepsilon \dot{N}$ 分别为高低温热库的内能变化, $\dot{U}_H = \varepsilon \dot{N}$ 为高温热库的内能变化. 可以得到能量为 ε 的电子流 \dot{N} 传输时引起的流入高低温热库的热流为

$$\dot{Q}_{H/C} = (\varepsilon - \mu_{H/C}) \dot{N}. \quad (4)$$

根据统计力学, 长度为 L 的一维电子库在动量 $P - P + dP$ 范围内的电子态数为

$$dn = \frac{L}{2\pi\hbar} dP, \quad (5)$$

其中 \hbar 为 Dirac 常数. 利用电子的能量动量关系 $\varepsilon = \frac{P^2}{2m}$, 则(5)式写成

$$dn = \frac{2L}{h} \left(\frac{m}{2\varepsilon} \right)^{1/2} d\varepsilon. \quad (6)$$

在 $\varepsilon - \varepsilon + d\varepsilon$ 的能量范围内, 单位长度中一维电子库的电子态密度为

$$D(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2}{h} \left(\frac{m}{2\varepsilon} \right)^{1/2} d\varepsilon, \quad (7)$$

其中 h 为 Planck 常数.

从低温库到高温库的电子流为

$$\begin{aligned} \dot{N}(\varepsilon)_{C \rightarrow H} &= \frac{2}{h} \left(\frac{m}{2\varepsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{2\varepsilon}{m} \right)^{1/2} t(\varepsilon) f_C(\varepsilon, \mu_C, T_C) d\varepsilon \\ &= \frac{2}{h} t(\varepsilon) \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_C}{k_B T_C}\right) \right)^{-1} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (8)$$

同理, 在 $\varepsilon - \varepsilon + d\varepsilon$ 的能量范围内从高温库到低温库的电子流为

$$\begin{aligned} \dot{N}(\varepsilon)_{H \rightarrow C} &= \frac{2}{h} \left(\frac{m}{2\varepsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{2\varepsilon}{m} \right)^{1/2} t(\varepsilon) f_H(\varepsilon, \mu_H, T_H) d\varepsilon \\ &= \frac{2}{h} t(\varepsilon) \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_H}{k_B T_H}\right) \right)^{-1} d\varepsilon, \end{aligned} \quad (9)$$

其中, $t(\varepsilon)$ 为电子的透射概率, 是一个 Lorentz 型函数 $t(\varepsilon) = \left[1 + \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{res}}}{\delta} \right)^2 \right]^{-1}$, ε_{res} 为共振中心的能级, 2δ 为共振能级宽度^[5].

由于 $\varepsilon < \varepsilon_0$, 净电子流 \dot{N} 的方向应该从低温热库流向高温热库, 利用(8)和(9)式, 可以得到

$$\begin{aligned} \dot{N}(\varepsilon) &= \frac{2}{h} t(\varepsilon) \left(\left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_C}{k_B T_C}\right) \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_H}{k_B T_H}\right) \right)^{-1} \right) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (10)$$

进而, 可以得到单位时间内由于电子传输引起的净流入高温热库的热量和从低温热库净流出的热量分别为

$$\begin{aligned} \dot{Q}_H(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) &= \frac{2}{h} \int_0^\infty t(\varepsilon) (\varepsilon - \mu_H) \\ &\quad \times \left(\left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_C}{k_B T_C}\right) \right)^{-1} \right. \end{aligned}$$

$$- \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_H}{k_B T_H}\right) \right)^{-1} d\varepsilon, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_C(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) &= \frac{2}{h} \int_0^\infty t(\varepsilon) (\varepsilon - \mu_C) \\ &\times \left(\left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_C}{k_B T_C}\right) \right)^{-1} \right. \\ &\left. - \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_H}{k_B T_H}\right) \right)^{-1} \right) d\varepsilon. \quad (12) \end{aligned}$$

由(11)和(12)式,可以得到输入功率为

$$P(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) = \dot{Q}_H(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) - \dot{Q}_C(\varepsilon_{\text{res}}, \delta). \quad (13)$$

考虑辐射热漏后,单位时间内电子选择性热泵的总泵热量为

$$\dot{Q}_H^*(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) = \dot{Q}_H(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) - \dot{Q}_{\text{Rad}}, \quad (14)$$

泵热系数为

$$\phi = \frac{\dot{Q}_H^*(\varepsilon_{\text{res}}, \delta)}{P(\varepsilon_{\text{res}}, \delta)} = \frac{\dot{Q}_H(\varepsilon_{\text{res}}, \delta) - \dot{Q}_{\text{Rad}}}{P(\varepsilon_{\text{res}}, \delta)}. \quad (15)$$

3. 电子选择性热泵的性能分析

为了适合低温电子热泵的工作特性,在本节的数值计算中我们选取参数 $T_C = 1 \text{ K}$, $T_H = 2 \text{ K}$, $\mu_C/k_B = 12 \text{ K}$, $\mu_H/k_B = 10 \text{ K}$. 但是温度的选取以及温差范围并不影响最终的结论. 由公式 $\varepsilon_0 = (\mu_C T_H - \mu_H T_C)/(T_H - T_C)$, 可以得到 $\varepsilon_0/k_B = 14 \text{ K}$. 根据(14)式,可以得到在 δ 一定的情况下,泵热量 $\dot{Q}_H^*(\varepsilon_{\text{res}}, \delta)$ 随 ε_{res} 的变化曲线,如图2所示. 随着热漏的增加,泵热量有所减少,曲线呈单调递减的变化趋势,在 $\varepsilon_{\text{res}}/k_B = \mu_C/k_B = 12 \text{ K}$ 时,泵热量达到最大值. 在能量点 $\varepsilon_0/k_B = 14 \text{ K}$ 时,由于净电子流为零,所以此时的泵热量非常小.

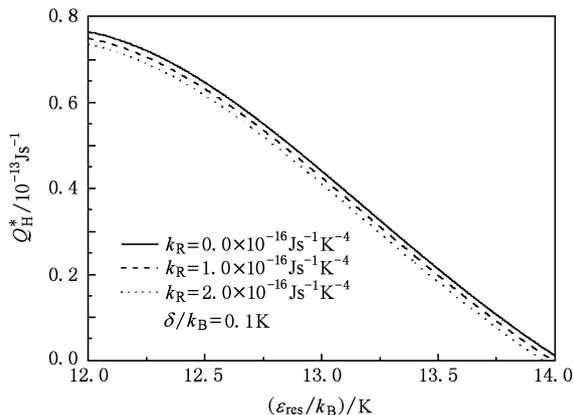


图2 在不同热漏系数时,泵热量随共振中心能级位置的变化曲线

根据(15)式,在不同的 k_R 和 δ 下, ϕ 随共振中心能级 ε_{res} 变化曲线,如图3和图4所示. 图3为给定 δ 情况下,得到的一组抛物线状曲线,当 ε_{res} 取到一个特定的值时, ϕ 达到最大值,并且最大值 ϕ_{max} 是随着热漏的增加而减小.

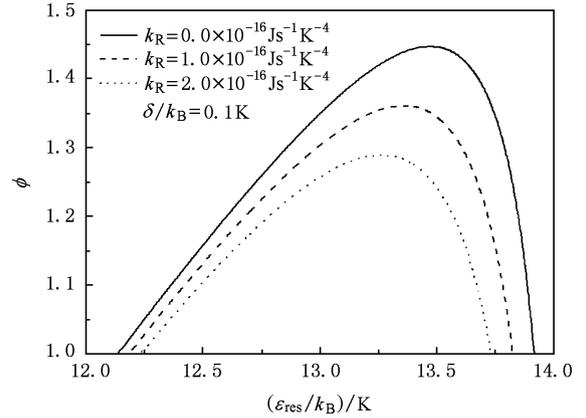


图3 在不同热漏系数时,泵热系数随共振中心能级位置的变化曲线

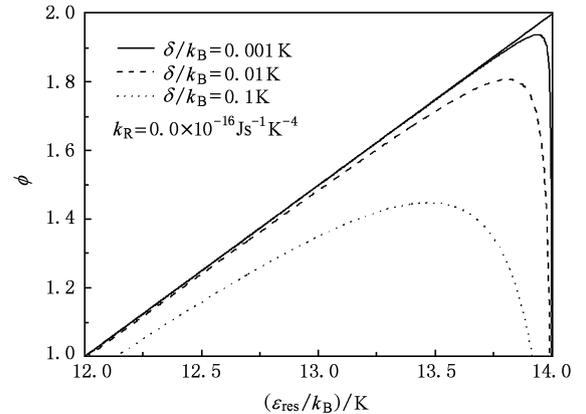


图4 在热漏为零和不同共振能级宽度时,泵热系数随共振中心能级位置的变化曲线

图4是给定热漏为零的情况下, ϕ 随共振中心能级位置的变化曲线,同样, ϕ 的最大值 ϕ_{max} 随着 δ 的增加而减小. 观察图4这组曲线的变化趋势,可以推测出这组变化曲线在 $\delta \rightarrow 0$ 的极限情况. 其极限形状应该是一条直线. 此时, ϕ 最大可以接近2,即近似等于对应的 Carnot 热泵的 ϕ ($\phi_{\text{Carnot}} = \frac{T_H}{T_H - T_C} = 2$).

根据(14)和(15)式,可以画出在不同的 k_R 时,泵热量 \dot{Q}_H^* 随 ϕ 的变化曲线,如图5所示. 泵热量的

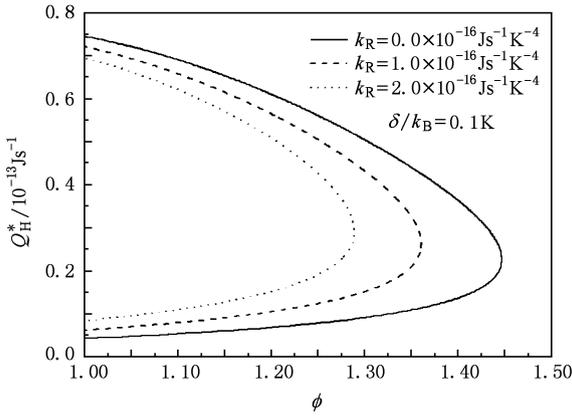


图 5 在不同热漏系数时, 泵热量随泵热系数的变化曲线

最大值 $\dot{Q}_{H\max}^*$ 和最小值 $\dot{Q}_{H\min}^*$ 都是处于 $\phi = 1.0$ 处. 一个 ϕ 对应着两个不同的泵热量, 只有当 ϕ 达到最大值 ϕ_{\max} 时对应着一个泵热量. 对于给定的一个 ϕ , 希望泵热量越大越好. 所以, 电子热泵的优化运行区域为图中曲线的负斜率区域. 进一步, 可以看到对于同一个泵热量, 热漏越大, 相应的 ϕ 越小.

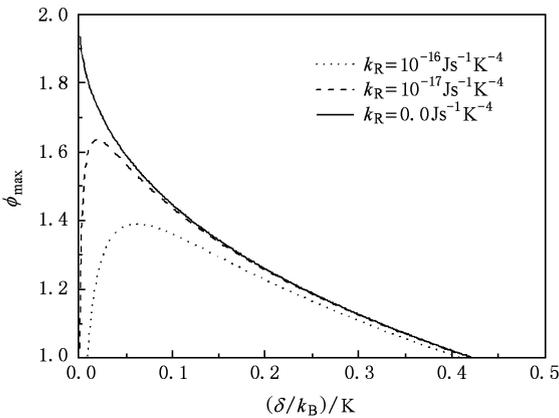


图 6 在热漏不同时, 泵热系数的最大值随共振能级宽度的变化曲线

从图 4 可知, 对于不同的 δ , ϕ 随 ϵ_{res} 的位置变化会出现一个最大值, 通过数值解可以获得在 ϵ_{res} 的所有取值范围内 ϕ 的最大值, 从而得到了 ϕ 的最大值 ϕ_{\max} 随 δ 的变化, 如图 6 所示. 从图中可以看出, 在不考虑热漏的情况下 (实线), ϕ_{\max} 随着能级宽度的增大而变小. 当 $\delta \rightarrow 0$, 其值达到 Carnot 值 2, 和图

4 中的分析结果一致. 然而, 在考虑热漏的情况下 (对应图中虚线和点划线), 开始时 ϕ_{\max} 随着 δ 的减小而增大, 这和图 3 得到的结果一致. 但是, 当 δ 非常小时, ϕ_{\max} 随着 δ 的继续减小而变小. 主要原因是, 当 δ 相对来说比较大时, 热漏对 ϕ_{\max} 的值影响比较小. 而当 δ 非常小时, 热漏对它的影响相对就比较明显. 因此, 当热漏一定, 能级宽度继续无限变小时, ϕ_{\max} 的值反而也跟着变小.

类似的数值计算方法, 让 δ 在所有取值范围内变化, 找出不同的共振能级中心 ϵ_{res} 对应的 ϕ_{\max} , 从而得到了 ϕ_{\max} 随共振能级中心 ϵ_{res} 的变化, 如图 7 所示. 在不考虑热漏情况下, 曲线为单调增加的直线. 可以看到, 当 ϵ_{res} 增加, ϕ_{\max} 也跟着增加.

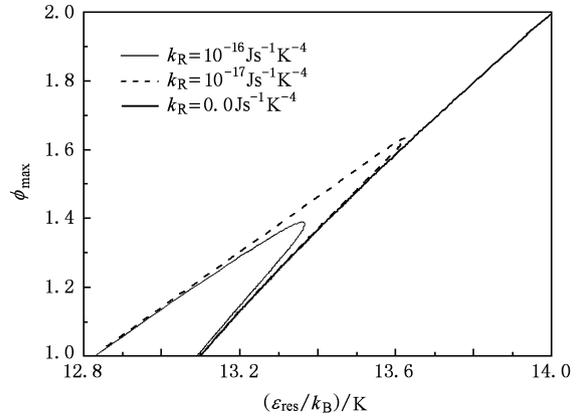


图 7 在热漏不同时, 泵热系数的最大值随共振能级中心位置的变化曲线

4. 结 论

通过态密度和 Fermi-Dirac 分布分析了电子通过一个 Lorentz 型的能量透射谱在两个热库之间的传输性质, 数值计算得到能量选择性热泵的性能参数曲线. 讨论了热漏和能级宽度对热泵工作性能的影响. 当 δ 比较大时, ϕ_{\max} 会随着 δ 的变小而增大; 而当 δ 无限小时, 热漏的影响会变得比较明显, ϕ_{\max} 会随着 δ 的继续减小而变小. 进一步分析了在热漏为零, δ 无限小时, ϕ 随共振能级中心位置变化曲线的极限情况, 此时 ϕ 可以达到 Carnot 值.

- [1] Mahan G D 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 4362
- [2] Mahan G D, Woods L M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4016
- [3] Linke H, Sheng W, Löfgren A, Xu H G, Omling P, Lindelof P E 1998 *Europhys. Lett.* **44** 341
- [4] Linke H, Humphrey T E, Löfgren A, Sushkov A O, Newbury R, Taylor R P, Omling P 1999 *Science* **286** 2314
- [5] Humphrey T E, Newbury R, Taylor R P, Linke H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 116801
- [6] Ulrich M D, Barnes P A 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 1625
- [7] Wang X M, He J Z, Wang J H 2008 *Acta Electro. Sin.* **36** 2178 (in Chinese) [王小敏、何济洲、王建辉 2008 电子学报 **36** 2178]
- [8] Wu L, Ang L K 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 084506
- [9] Radtke R J, Ehrenreich H, Grein C H 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 3195
- [10] Bulusu A, Walker D G 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 073713
- [11] Vashaee D, Shakouri A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 106103
- [12] Zhang X, Zhang D L 2007 *Chin. Phys.* **16** 2656
- [13] O'Dwyer M F, Humphrey T E, Linke H 2006 *Nanotechnology* **17** S338
- [14] Humphrey T E, Linke H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 096601
- [15] O'Dwyer M F, Lewis R A, Zhang C 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205330
- [16] Mei L W, Zhang Z H, Ding K H 2009 *Acta. Phys. Sin.* **58** 1971 (in Chinese) [梅龙伟、张振华、丁开和 2009 物理学报 **58** 1971]
- [17] Vashaee D, Shakouri A 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 1233
- [18] Tang X F, Xie W J, Li H, Zhao W Y, Zhang Q J, Niino M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 012102
- [19] Li X S, Peng Y Q, Yang Q S, Xing H W, Lu F P 2007 *Acta. Phys. Sin.* **56** 5441 (in Chinese) [李训栓、彭应全、杨青森、刑宏伟、路飞平 2007 物理学报 **56** 5441]
- [20] Vining C B, Mahan G D 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 6852
- [21] Chao K A, Larsson M, Mal'shukov A G 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 022103
- [22] Wang X M, He J Z, Tang W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 98
- [23] Hu Y, Rao H B 2009 *Acta. Phys. Sin.* **58** 3474 (in Chinese) [胡 玥、饶海波 2009 物理学报 **58** 3474]
- [24] Niu X M, Qi Y H 2008 *Acta. Phys. Sin.* **57** 6926 (in Chinese) [牛秀明、齐元华 2008 物理学报 **57** 6926]

Energy selective electron heat pump with transmission probability *

He Ji-Zhou[†] He Bing-Xiang

(Department of Physics, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

(Received 16 March 2009; revised manuscript received 13 August 2009)

Abstract

The electron transport through an energy transmission spectrum between two reservoirs with different temperatures and chemical potentials is studied. The heat flow carried by the electrons is obtained. Taking into account the radiative heat leaks between the two electron reservoirs, the performance parameters of the heat pump are derived by numerical calculation. The performance characteristic curves of the heat pump are plotted. The influence of the heat leaks, the position of resonance energy level and the width of the level on the operation performance of the heat pump is analyzed. When the width of resonance energy level is infinitely small, the coefficient of performance may reach the value of Carnot heat pump.

Keywords: transmission spectrum, density of state, radiative heat leaks, electron heat pump

PACC: 0570L, 7210, 7980, 0720

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10765004).

[†] E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn