

双势垒 InAs/InP 纳米线异质结热电子制冷机*

贺兵香 何济洲[†]

(南昌大学物理系, 南昌 330031)

(2009 年 9 月 7 日收到; 2009 年 11 月 20 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电子通过一个双势垒 InAs/InP 纳米线异质结进行的传输. 利用传输矩阵法得到了电子的传输概率, 进而计算得到电子传输所产生的热流. 通过数值计算给出了热电子制冷机的性能特征曲线. 进一步分析了势垒宽度和势阱宽度对制冷机工作性能的影响. 研究发现, 当势阱宽度一定时, 随着势垒宽度变大共振中心能级的位置变大, 共振能级宽度变小, 同一偏压对应的制冷率变小, 相对制冷系数变大. 当势垒宽度一定时, 随着势阱宽度变大, 同一偏压对应的相对制冷系数变小. 当势垒和势阱宽度同时变化时, 得到的曲线与势垒宽度一定势阱宽度变化时得到的曲线基本相似. 这表明制冷率和相对制冷系数主要受势阱宽度变化的影响.

关键词: 热电子制冷机, 双势垒纳米线, 性能参数, 传输矩阵法

PACC: 0570L, 7210, 4490, 7220P

1. 引 言

近年来, 纳米材料在制造业、信息技术、能源、环境、医疗保健、生物技术和国家安全等领域中发挥着越来越大的作用, 其中纳米线由于其在纳米电子学和纳微机电系统中具有广阔的应用前景也受到关注. 无论是从基础研究还是从应用开发的角度, 理论和实验工作者都对纳米材料进行了深入的探索^[1-3]. 把不同结构异质结纳米线材料应用到热电子装置中, 研究电子在异质结中传输所带来的热效应有着非常重要的意义, 人们在这方面也做了大量的理论研究工作^[4-7], 其中最关键的工作之一就是求解电子的传输概率. 目前理论上对传输概率的求解方法主要有传输矩阵法、艾里函数法^[8]或者差分方程法^[9]. 有研究发现, 与其他材料相比, 纳米尺度热电材料在一维和二维系统中的应用性较高^[10-12], 理论上主要是因为低维系统中电子态密度变化比较快, 提高了热效率^[13-15], 并且纳米材料的高界面密度减少了由于声子热导引起的热损失^[16].

在前人工作的基础上, 本文研究了纳米线异质

结对电子传输所带来的热效应的影响, 主要模型如图 1 所示. 从图 1 可知, 两个一维热库中的电子通过一个双势垒 InAs/InP 纳米线异质结“能量过滤体”进行传输, 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 , 中间为一个双势垒 InAs/InP 纳米线异质结“能量过滤器”, 势垒的宽度为 b , 势阱宽度为 w , 高度为 ϕ . 这里在左边低温热库加正电压, 右边高温热库加负电压, 电压大小为 V_{bias} . 本文数值计算中 μ_C 取为一个定值, 而 μ_H 随偏压变化, $\mu_H = \mu_{H0} + eV_{bias}$, μ_H 的初始值 $\mu_{H0} = 0.18 \text{ eV}$ (即偏压 $V_{bias} = 0$ 时).

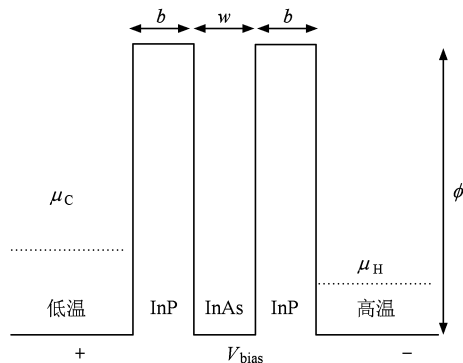


图 1 双势垒纳米线异质结热电子制冷机原理示意图 ($V_{bias} = 0$)

* 国家自然科学基金 (批准号: 10765004) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn

2. 电子传输特性

根据 Landauer 方程可以得到由于电子传输引起的电流为^[17]

$$I = \frac{2e}{h} \int (f_H - f_C) t(E) dE. \quad (1)$$

这里 e 为电子的电量, $e = -1.602 \times 10^{-19}$ C, E 为电子的能量,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*},$$

其中 m_e^* 为电子的有效质量; $f_{H,C}$ 为高低温热库电子的费米分布,

$$f_{H,C} = 1 / \{ 1 + \exp[(E - \mu_{H,C}) / (k_B T_{H,C})] \};$$

$t(E)$ 为电子通过双势垒纳米线的传输概率, 用传输矩阵法得到.

电子通过势垒传输, 电子的传输引起的热量改变为 $\Delta Q = E - \mu$, 其中 μ 为热库的化学势. 低温库的热量改变量为 $-\Delta Q_C = -(E - \mu_C)$, 负号表示流出热量; 高温库的热量改变量为 $\Delta Q_H = -(E - \mu_H)$. 进而得到了单位时间内由于电子传输引起的净流入高温热库的热量 \dot{Q}_H 和从低温热库净流出的热量 \dot{Q}_C 分别为

$$\dot{Q}_H = \frac{2}{h} \int_0^\infty t(E) (E - \mu_H) \left(\left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right]^{-1} - \left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right]^{-1} \right) dE, \quad (2)$$

$$\dot{Q}_C = \frac{2}{h} \int_0^\infty t(E) (E - \mu_C) \left(\left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right]^{-1} - \left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right]^{-1} \right) dE. \quad (3)$$

这里引入一个与能量有关的变量 $F(E)$, 即

$$F(E) = \frac{2}{h} (E - \mu_C) \left(\left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right]^{-1} - \left[1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right]^{-1} \right). \quad (4)$$

将(4)式代入(3)式得到

$$\dot{Q}_C = \int_0^\infty t(E) F(E) dE. \quad (5)$$

由(2), (3)式可以得到输入功率为

$$P_{in} = \dot{Q}_H - \dot{Q}_C. \quad (6)$$

制冷机的制冷系数为

$$\varepsilon = \frac{\dot{Q}_C}{P_{in}}. \quad (7)$$

电子在两个库之间传输过程中系统的熵增为

$$\begin{aligned} \Delta S &= \frac{\Delta Q_C}{T_C} + \frac{\Delta Q_H}{T_H} \\ &= -\frac{(E - \mu_C)}{T_C} + \frac{(E - \mu_H)}{T_H}. \end{aligned} \quad (8)$$

令 $\Delta S = 0$, 得到

$$E_0 = \frac{\mu_C T_H - \mu_H T_C}{T_H - T_C}. \quad (9)$$

如果电子仅仅在能量 $E = E_0$ 处传输, 这时传输过程为可逆过程, 制冷系数为卡诺制冷系数 $\varepsilon_C = T_C / (T_H - T_C)$, 制冷率为零. 在能量 $\mu_C < E < E_0$ 范围内电子的交换表现为制冷机的过程, 并且当电子能量 E 越靠近 E_0 , 制冷系数就越接近卡诺制冷系数^[18].

3. 制冷机的性能分析

利用公式(2), (3)和(7)并给出相关的参数, 可以得到制冷机的性能曲线, 其中传输概率 $t(E)$ 用传输矩阵法得到, 热流由(3)式计算得到. 在本文的数值计算中选取参数如下: $\phi = 0.57$ eV, $m_{InAs}^* = 0.023m_e^*$, $m_{InP}^* = 0.08m_e^*$, $T_H = 300$ K, $T_C = 200$ K, $\mu_C = 0.19$ eV, $\mu_{H0} = 0.18$ eV, $\mu_H = \mu_{H0} + eV_{bias}$. 势阱宽度取定而势垒宽度取不同值时制冷率和相对制冷系数如图2所示, 电子的传输概率如图3所示. 从图2(a)可以看出, 随着偏压的增加, 制冷率不断变小; 势垒的宽度越大制冷率变化越缓慢, 相同偏压值对应的制冷率越小.

图2(b)为相对制冷系数, 在合适的偏压范围内, 偏压增大相对制冷系数也变大. 势垒宽度越大, 同一偏压值对应的相对制冷系数越大. 这可以从图3得到解释. 从图3可以看出, 当势垒宽度变大, 共振能级的中心位置也变大, 并且共振能级的宽度变窄. 这和文献[19]中所得到的结论“共振能级的宽度越窄制冷系数越大”是一致的. 随着偏压的增大, 相对制冷系数变大, 当偏压 $V_{bias} = 0$ 时, 已经达到制冷的目的. 偏压增大意味着提高了高温电子库的化学势, 同时缩短了两个电子库化学势 μ_C 和 μ_H 之间的差距, 增大电压即增加 μ_H 可以提高制冷系数. 当偏压 $eV_{bias} \approx 0.01$ eV 时, 制冷率趋于零而制冷系数达到卡诺值(当偏压 $eV_{bias} > 0.01$ eV 时, 制冷率为负值).

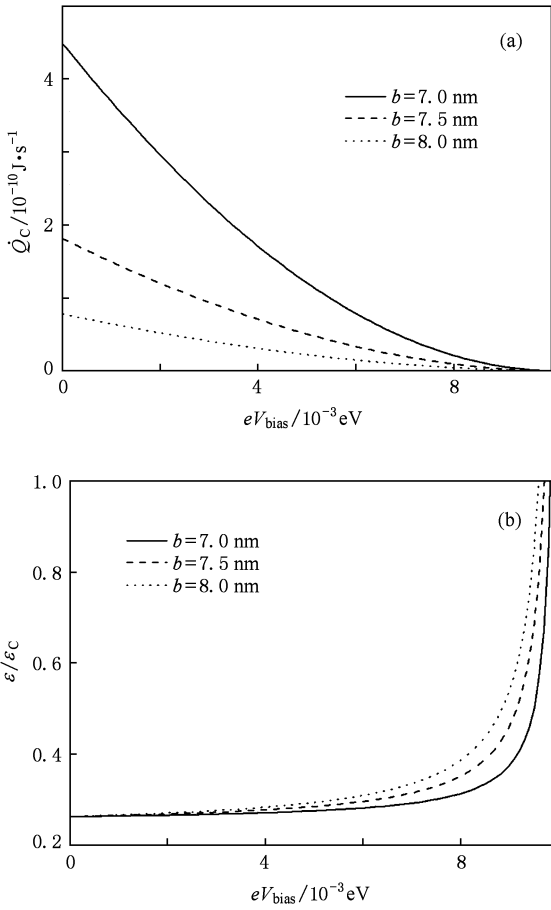


图 2 当 $w = 7.0 \text{ nm}$, $b = 7.0, 7.5, 8.0 \text{ nm}$ 时, 制冷率和相对制冷系数随偏压的变化 (a) 制冷率随偏压的变化, (b) 相对制冷系数随偏压的变化

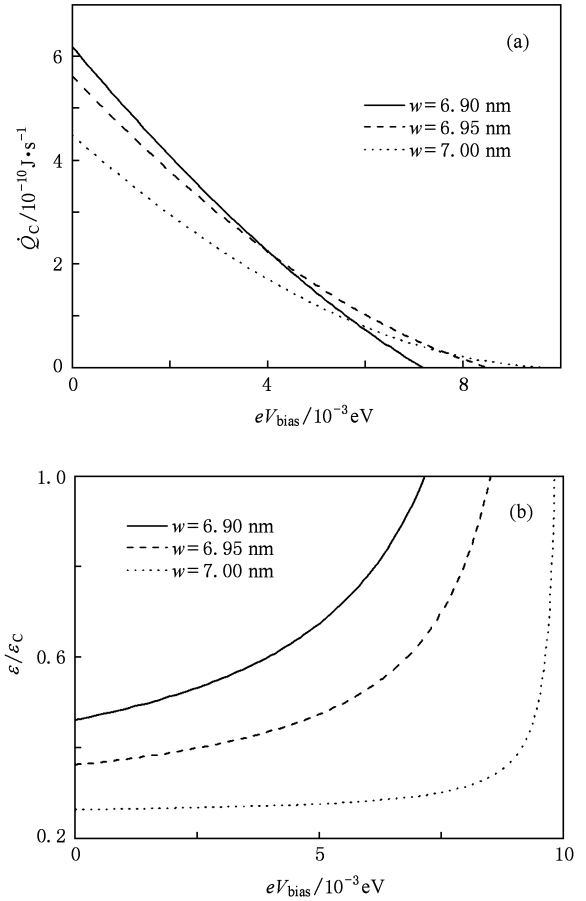


图 4 当 $b = 7.0 \text{ nm}$, $w = 6.90, 6.95, 7.00 \text{ nm}$ 时制冷率和相对制冷系数随偏压的变化 (a) 制冷率随偏压的变化, (b) 相对制冷系数随偏压的变化

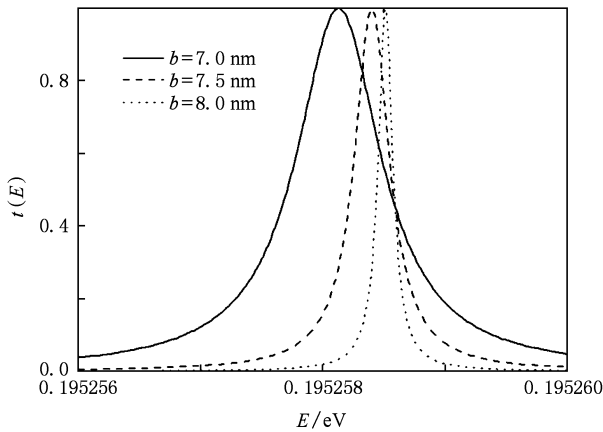


图 3 当 $w = 7.0 \text{ nm}$, $b = 7.0, 7.5, 8.0 \text{ nm}$, $V_{\text{bias}} = 0.0 \text{ eV}$ 时电子的传输概率

出, 随着偏压增加制冷率不断减小, 并且势阱宽度越大, 制冷率减小越缓慢, 最后制冷率趋近于零. 从

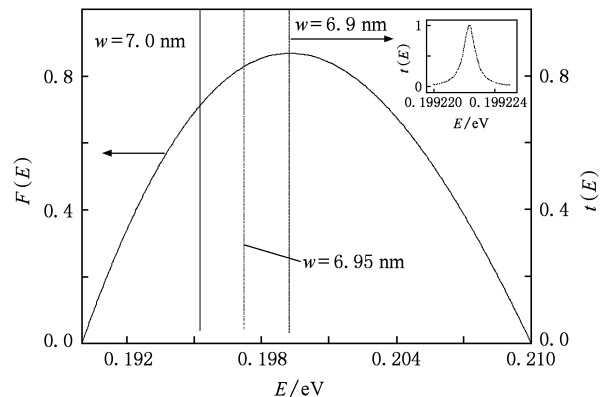


图 5 $F(E)$ 随能量 E 的变化以及势垒宽度 $b = 7.0 \text{ nm}$ 时传输概率 $t(E)$ 随能量的变化 内插图为势阱宽度 $w = 6.90 \text{ nm}$ 时传输概率曲线的局部放大, $w = 6.95 \text{ nm}$ 和 $w = 7.0 \text{ nm}$ 时传输概率曲线的放大形状类似

图 4 为势垒宽度一定 ($b = 7.0 \text{ nm}$), 势阱宽度取不同值时 ($w = 6.90, 6.95, 7.00 \text{ nm}$) 的制冷率和相对制冷系数随偏压的变化曲线. 从图 4 (a) 可以看

图 4(b)可以看出, 势阱越宽, 同一偏压值对应的相对制冷系数越小, 随着偏压的增加相对制冷系数不断增大, 最后会达到卡诺值. 同时还可以看出, 当制冷率接近零时制冷系数达到卡诺值.

为了解释图 4(a) 制冷率的变化曲线, 根据(4)式可以得到 $F(E)$ 随能量的变化曲线(如图 5 中的抛物线), 以及利用传输矩阵法可以得到势阱宽度取不同值时对应的传输概率 $t(E)$ (如图 5 中的三条“竖线”所示). 根据(5)式可知, 制冷率应该是 $F(E)$ 与传输概率 $t(E)$ 的乘积在能量范围内的积

分, 从图 5 可以看出, 随着势阱宽度变大, $F(E)$ 与传输概率 $t(E)$ 的乘积在变小, 所以在同一偏压时制冷率也在变小.

势阱和势垒相同并且同时变化时制冷率和制冷系数的曲线如图 6 所示, 当势阱和势垒相同并同时变化时得到的制冷率和相对制冷系数曲线与图 4 中势阱宽度不变而势垒变化得到的曲线几乎是一样的. 由此可以说明, 制冷率和相对制冷系数曲线主要是受势阱宽度变化的影响, 而势垒宽度的影响几乎可以忽略.

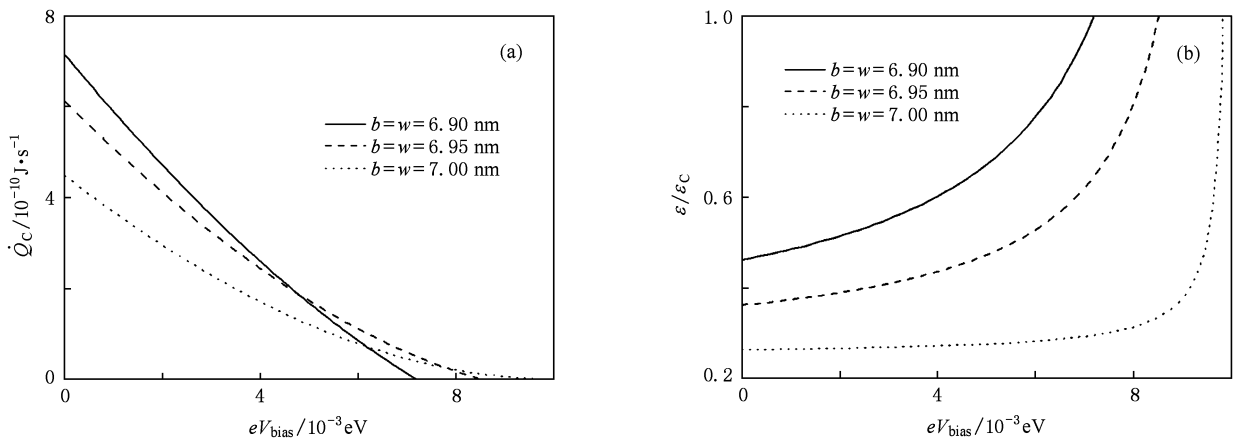


图 6 当 $b=w=6.90, 6.95, 7.00 \text{ nm}$ 时制冷率和相对制冷系数随偏压的变化 (a) 制冷率随偏压的变化, (b) 相对制冷系数随偏压的变化

4. 结 论

本文利用态密度和狄拉克分布研究了两个具有不同温度和不同化学势的热库中的电子通过一个双势垒 InAs/InP 纳米线异质结进行的传输. 利用传输矩阵法得到了电子的传输概率, 进而计算得到电子传输所产生的热流. 通过数值计算给出了热电子制冷机的性能特征曲线. 分析了势垒宽度和势阱宽度对制冷机工作性能的影响, 当势阱宽度一定时, 随着势垒宽度变大, 共振中

心能级的位置变大, 而共振能级宽度变小, 同一偏压对应的制冷率变小, 相对制冷系数变大, 而且随着偏压的增加制冷率变小, 势垒宽度越大, 制冷率变化越缓慢. 同一偏压值对应的相对制冷系数随着势垒的宽度变大而变大, 而随着势阱的宽度变大而变小. 当势垒宽度一定时, 随着势阱宽度变大, 同一偏压对应的相对制冷系数变小. 当势垒和势阱宽度同时变化时得到的曲线与势垒宽度一定势阱宽度变化时得到的曲线基本相似, 从而可知制冷率和相对制冷系数主要受势阱宽度变化的影响.

[1] Björk M T, Ohlsson B J, Thelander C, Persson A I, Deppert K, Wallenberg L R, Samuelson L 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 4458
 [2] Thelander C, Mårtensson T, Björk M T, Ohlsson B J, Larsson M W, Wallenberg L R, Samuelson L 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2052

[3] Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Tang Y, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4347 (in Chinese) [张凯旺、孟利军、李俊、刘文亮、唐翌、钟建新 2008 物理学报 **57** 4347]
 [4] Tsu R, Esaki L 1973 *Appl. Phys. Lett.* **22** 562
 [5] O'Dwyer M F, Humphrey T E, Linke H 2006 *Nanotechnology* **17**

S338

- [6] Lin Y M, Dresselhaus M S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 075304
- [7] 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]
- [8] Miyamoto K, Yamamoto H 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 311
- [9] Krishnamurthy S, Chen A B, Sher A 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 5037
- [10] Harman T C, Taylor P J, Walsh M P, LaForge B E 2002 *Science* **297** 2229
- [11] Lin Y M, Rabin O, Cronin S B, Ying J Y, Dresselhaus M S 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 2403
- [12] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597
- [13] Bile D, Mahanti S D, Hsu K F, Quarez E, Pcionek R, Kanatzidis M G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 146403
- [14] Hicks L D, Dresselhaus M S 1993 *Phys. Rev. B* **47** 12727
- [15] Hicks L D, Dresselhaus M S 1993 *Phys. Rev. B* **47** 16631
- [16] Cahill D G, Ford W K, Goodson K E, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Merlin R, Phillpot S R 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 793
- [17] Humphrey T E, Linke H, Newbury R 2001 *Physica E* **11** 281
- [18] Humphrey T E, Newbury R, Taylor R P, Linke H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 116801
- [19] Wang X M, He J Z, Tang W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 984

Thermoelectric refrigerator of a double-barrier InAs/InP nanowire heterostructure*

He Bing-Xiang He Ji-Zhou[†]

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

(Received 7 September 2009; revised manuscript received 20 November 2009)

Abstract

In this paper, the electron transport through a double-barrier InAs /InP nanowire heterostructure between two reservoirs at different temperatures and chemical potentials is studied. The transport probability of electron is obtained by using transfer matrix method, and the heat flow carried by the electrons transfer is derived. The performance characteristic curves of the refrigerator are plotted by numerical calculation. The influence of the barrier width and well width on the operation performance of the refrigerator is analyzed. It is found that when the well width is fixed, the position of resonance energy level increases while the width of resonance energy level decreases as the barrier width increases, and for the same bias the larger the barrier width, the smaller the cooling rate, while the larger the relative coefficient of performance. When the barrier width is fixed, for the same bias, the relative coefficient of performance will decrease as the well width increases. The curve obtained when both the well width and barrier width vary, is similar to the curve obtained when the well width varies and barrier width is fixed. Thus we can see that cooling rate and the relative cooling factor are mainly affected by the well width.

Keywords: thermoelectric refrigerator, double-barriers nanowire, performance parameters, transfer matrix method

PACC: 0570L, 7210, 4490, 7220P

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

[†] Corresponding author. E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn