

摇摆型棘齿热电子隧穿制冷*

罗小光 何济洲†

(南昌大学物理系,南昌 330031)

(2010年9月28日收到;2010年12月16日收到修改稿)

本文利用传输矩阵法数值模拟了电子在加入周期性正负偏压的双势垒(“摇摆”棘齿)异质结中的传输特性,获得了两电子库间的净电流以及所伴随的净热流的表达式.进一步分析了净电流、净热流和制冷系数等性能参数的特征,获得的结果对介观热电子器件的研制有一定的理论指导意义.

关键词: 热电子制冷机,“摇摆”棘齿,性能参数,传输矩阵法

PACS: 05.70.Ln, 44.15.+a, 73.23.-b, 73.50.Lw

1. 引言

近年来,热电装置由于其体积小、寿命长、无需制冷剂、无噪声、无污染等特点逐渐受到广泛的研发和利用^[1-3],范围涵盖日常生活、军事医疗、仪器仪表、航空航天等领域.电子制冷亦称半导体制冷,与压缩式制冷和吸收式制冷并称世界三大制冷方式,被广泛应用到制冷与电子器件散热中.

1999年, Linke 等人研究了一个类似于肌球蛋白-肌动蛋白系统导致肌肉收缩机理的隧穿棘齿,由于电子在各个方向的隧穿环境不一样(非对称),导致相应的透射谱存在差异,就一维透射而言,电子在正反两方向传输特性不同就可能产生净电流,同时也会伴随热量的流动^[4].随着纳米线、超晶格和量子点等纳米材料的出现,此理论得到进一步的发展^[5-9],并应用于量子热泵和量子 Brownian 热机等装置中^[10-12],发现在适当条件下,热电装置的效率可达到 Carnot 值.另一方面,热电材料的品质因子(衡量热电材料效率的量)的理论和实验研究也已深入开展^[13-14].

前人已研究过电子通过单个棘齿势传输的热电特性,其电子透射峰在势垒高度附近(12 meV)^[10,11],这样很难判断电子是否是通过隧穿效应传输的,并且电子的选择特性依赖于势垒高度.如果电子通过的是两个以上的棘齿势,其透射谱在

势垒高度以下会出现透射峰,即电子隧穿效应.本文中,我们将选用 GaAs/AlGaAs 双势垒异质结来构造一种热电子隧穿制冷机,如图 1 所示,其中电子的有效质量分别是 $0.067m$ (势阱)和 $0.1087m$ (势垒), m 是真空中自由电子的质量.在外加摇摆电压 V 的影响下,能带会发生倾斜,图 1(a)和(b)分别是 $V = \mp V_0$ ($V_0 > 0$)两种情况的能级示意图,为方便计算假设 $\mu_F = (\mu_L + \mu_R)/2$,根据 $\mu_R - \mu_L = eV$, 可以得到 $\mu_{L/R} = \mu_F \mp eV/2$.

由于两库电子隧穿传输,有可能存在电流.若外加偏压 V 采用方波型输入,则此异质结相当于一个“摇摆”棘齿,因为中间势阱的非对称性,外加正负偏压时电子的透射谱存在差异,导致 $I(V_0) \neq -I(-V_0)$,对时间取平均值可以得到净电流应为 $I^{net} = 0.5[I(V_0) + I(-V_0)]$. V_0 为摇摆电压 V 的大小,以下直接称其为偏压.

首先利用薛定谔方程导出的传输矩阵法^[15-16],分析异质结的结构参数与电子透射概率的关系;之后研究两库在相同温度下,净电流的特性;最后研究两库在不同温度下,制冷机的净热流和制冷系数的特征.

2. 透射概率

电子的透射概率可以用薛定谔方程解出,但是有些结构的计算非常复杂,因此出现了很多的近似

* 国家自然科学基金(批准号:10765004,11065008)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: hjzhou@ncu.edu.cn

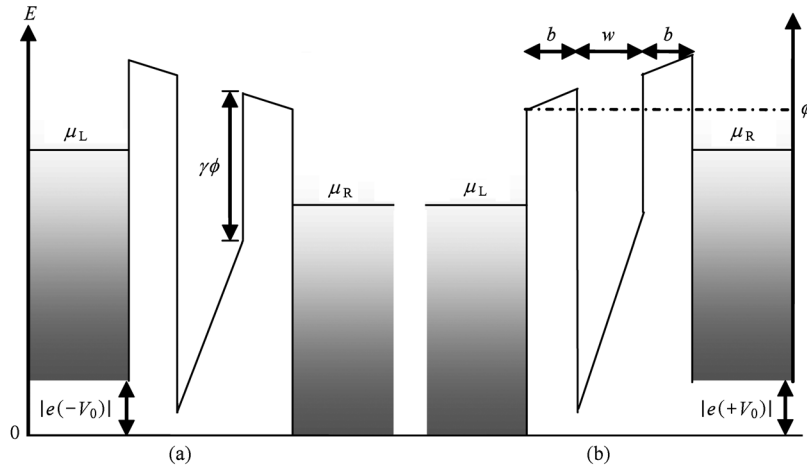


图1 (a)和(b)分别是偏压为负和正的情况,中间势阱为非对称, $\mu_{L/R}$ 为左右两库的化学势, ϕ 是势垒高度, $0 < \gamma < 1$, b 是势垒宽度, w 是势阱宽度

的计算方法,有 WKB 法、变分法、传输矩阵法、有限差分法和 Airy 函数近似法^[17]等,其中传输矩阵法能简单快速准确地得出一维任意形状势场中定态薛定谔方程的解^[18]. O’Dwyer 等人研究了势垒和势阱宽度对电子传输的影响的^[19], He 具体用到制冷机中,得出势垒宽度增大可提高效率,但势阱增大会减小效率^[20].

图1中整个异质结的宽度为 $L = 2b + w$, 根据薛定谔方程,异质结之外的波函数为^[15,16]

$$\psi(z) = \begin{cases} A_+ e^{ik_0 z} + A_- e^{-ik_0 z}, & z < 0, \\ B_+ e^{ik_0(z-L)} + B_- e^{-ik_0(z-L)}, & z > L, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $k_0^2 = 2m^* E/\hbar^2$ 和 $k^2 = 2m^* (E + eV_0)/\hbar^2$ 为异质结左右两边区域内波函数的波矢,取有效质量 $m^* = m$, z 为波传播方向的坐标. 考虑 $z = 0$ 和 $z = L$ 处波函数的连续性条件,(1)式可以写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中

$$M = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & -i/k \\ 1 & i/k \end{pmatrix} S(L,0) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_0 & -ik_0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

式中的 $S(L,0)$ 是异质结的传输矩阵,且 M 的矩阵元满足下列关系:

$$M_{22} = M_{11}^*, M_{21} = M_{12}^*. \quad (4)$$

假设电子从左边向右边传输,即 $B_- = 0$, 结合(3)式用传输矩阵 $S(L,0)$ 的矩阵元可以把透射概率表示为

$$t(E) = \frac{|B_+|^2 k}{|A_+|^2 k_0} = \frac{4k_0/k}{(S_{11} + k_0 S_{22}/k)^2 + (k_0 S_{12} - S_{21}/k)^2}. \quad (5)$$

将异质结分成 N 层,每一层都可用一个分立矩阵来表示,传输矩阵就可以表示出来,

$$S(L,0) = S_N S_{N-1} \cdots S_2 S_1. \quad (6)$$

当然, N 的取值越大,算出来的值越精确. 而在这些分层中,势垒的分立矩阵为

$$S_i = \begin{pmatrix} \cosh \kappa_i b_i & (\lambda/\kappa_i) \sinh \kappa_i b_i \\ (\kappa_i/\lambda) \sinh \kappa_i b_i & \cosh \kappa_i b_i \end{pmatrix}, \quad (7)$$

势阱的分立矩阵为

$$S_j = \begin{pmatrix} \cos k_j w_j & k_j^{-1} \sin k_j w_j \\ -k_j \sin k_j w_j & \cos k_j w_j \end{pmatrix}. \quad (8)$$

(7)和(8)两式中 b_i 和 w_j 分别为分层的宽度, k_i 和 k_j 分别为分层中的波矢, λ 是电子从一层到另一层的有效质量比. 将(7)和(8)式代入(6)式,算出矩阵元后,代入(5)式就可以算出透射概率. 只要确定势垒和势阱的形状,不同能量的电子的透射概率谱将唯一确定. 本文在计算中选定势垒和势阱的参数 $\phi = 12 \text{ meV}$, $\gamma = 0.5$.

为了更易观察,图2(a)中绘出了势垒与势阱宽度相同的情况下电子的透射概率的自然对数,很明显,异质结的尺度可以调节透射谱的透射峰数目及峰值所在位置,尺度越大,透射峰数目越多,且透射峰的能量跨度越小. 在 $b = w = 20 \text{ nm}$ 情况下, $E < \phi$ 范围内只存在一个透射峰,且 $V_0 = 0$ 时电子的隧穿透射谱在 $E = 6.135 \text{ meV}$ 处达峰值.

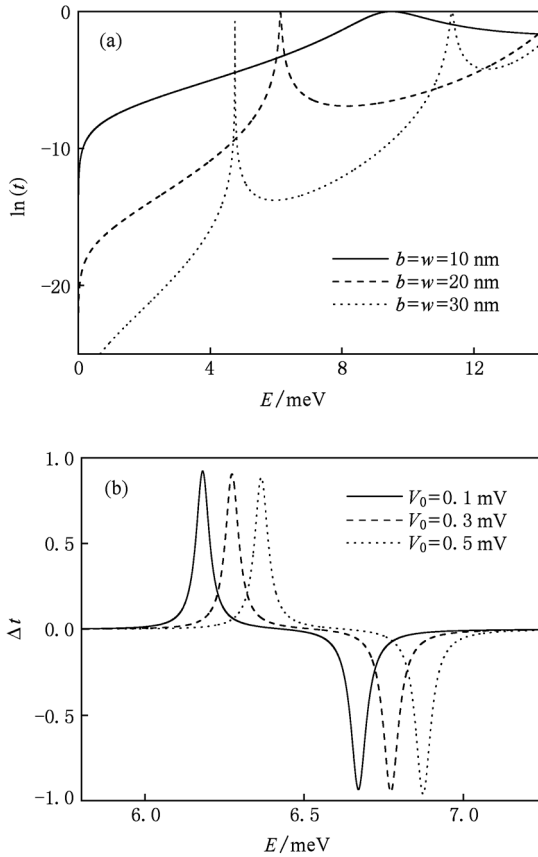


图2 (a) 在偏压为零,不同的势垒和势阱宽度时,电子透射概率的自然对数;(b) 当 $b = w = 20 \text{ nm}$ 时,不同偏压 V_0 下电子透射概率之差

如图2(b) 绘出了在两种偏压下电子的透射概率差 $\Delta t(E, V_0) = t(E, V_0) - t(E, -V_0)$, 可以看出 V_0 越大, 正峰值和负峰值同时向高能量偏移. 在 V_0 一定的情况下, 当在第一个正值透射峰附近与第一个负值透射峰附近传输的电子数不同时, 就会产生净电流.

3. 两库相同温度的情况

忽略声子散射, 并假设电子物质波长大于异质结尺寸但远小于电子库的尺寸, 则单位面积内一维 Boltzmann 传输方程为^[21]

$$I = \int e D t(E) v \Delta f dk, \quad (9)$$

积分范围是 $(0, \infty)$, 其中 e 为电子电量, $D = 1/(2\pi)$ 是一维电子库的态密度(DOS), $t(E)$ 是电子传输概率, $v = (1/\hbar)[\partial E(k)/\partial k]$ 是电子的速度, 两库电子费米分布差 $\Delta f = f_L - f_R$ 称作“费米

窗”, 只有在 $\Delta f \neq 0$ 的情况下(即“费米窗”内), 才有电子交换的情况发生, 且 $f_{L/R} = 1/\{1 + \exp[(E - \mu_{L/R})/k_B T]\}$. 再根据 $E = \hbar^2 k^2/2m^*$, 就可以得到流入 L 库的电流 I 关于能量 E 的表达式为

$$I = \frac{2e}{h} \int t(E) \Delta f dE. \quad (10)$$

可以看出, 当 $t(E)$ 和 Δf 两个量都不为零时, I 才可能不为零. 这就要求 $t(E)$ 的透射峰必须在“费米窗” Δf 不为零的能量区间内.

加入摇摆电压后, 电流可以写成

$$I(V) = \frac{2e}{h} \int t(E, V) \Delta f(E, V) dE, \quad (11)$$

$\Delta f(E, V)$ 依然是“费米窗”表达式, 其中

$f_{L/R}(E, V) = 1/\{1 + \exp[(E - \mu_F \pm eV/2)/k_B T]\}$, 可以得到流入 L 库净电流为

$$I^{net} = \frac{e}{h} \int [t(E, V_0) \Delta f(E, V_0) + t(E, -V_0) \Delta f(E, -V_0)] dE, \quad (12)$$

e 为电子电量 $-1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$, 注意到 $\Delta f(E, -V_0) = -\Delta f(E, V_0)$, 且 $\Delta t(E, V_0) = t(E, V_0) - t(E, -V_0)$, 因此, (12) 式可以简写成

$$I^{net} = \frac{e}{h} \int \Delta t(E, V_0) \Delta f(E, V_0) dE. \quad (13)$$

在电压 $V = +V_0$ 和 $V = -V_0$ 的两种情况下, 至少有一种情况为电子透射峰在“费米窗”内, 而且只有一个周期内两电子库流出的电子数不相等, 才能保证有净电流产生. 图3 表示了在一定参数下电子透射概率之差与费米窗的位置关系. 在确定参数 ϕ, γ, V_0, b 和 w 后, 电子在异质结中的透射谱唯一确定, 因此图3 中电子的透射谱差(粗线)是一定的.

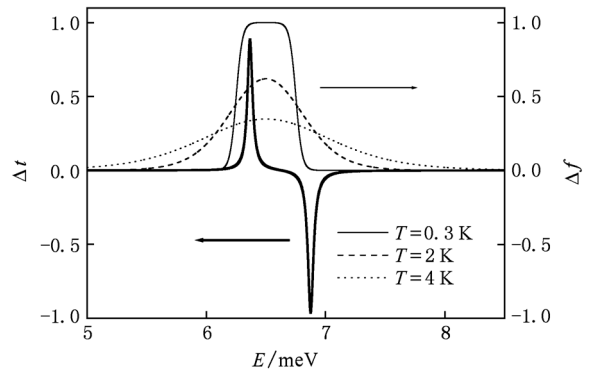


图3 细线为不同温度下“费米窗”图形, 粗线表示正负偏压情况下电子的透射谱之差. 取 $\mu_F = 6.5 \text{ meV}$, $V_0 = 0.5 \text{ meV}$.

图4 中绘出了在不同温度下, 净电流 I^{net} 与偏压

V_0 的关系曲线. 结果表明, 净电流是可正可负的. 温度越大, 净电流大小反而越小; 而随着 V_0 的增大, 净电流将先增加到正最大值, 再减小为负值.

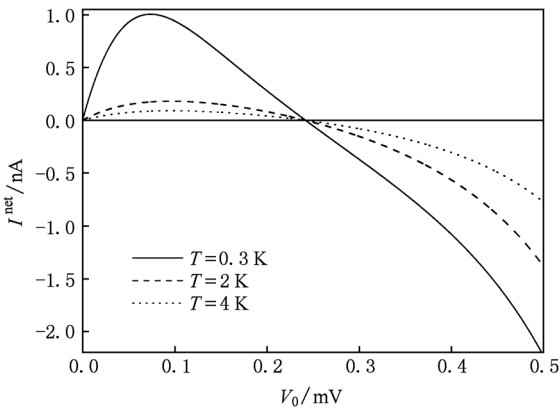


图4 在不同温度下, 流入 L 库的净电流和 V_0 的关系曲线

4. 两库不同温度的情况

当两库温度不同时, 流入 L 库的净电流表达式应改写为

$$I^{\text{net}} = \frac{e}{h} \int [t(E, V_0) \Delta f^{\prime}(E, V_0) + t(E, -V_0) \Delta f^{\prime}(E, -V_0)] dE, \quad (14)$$

其中

$$f_{L/R} = 1 / \{1 + \exp[(E - \mu_F \pm eV/2) / k_B T_{L/R}]\}.$$

另外, 在电子传输过程中, 当一个能量为 E 的电子离开化学势为 μ 的电子库时, 就会导致该电子库向外流出 $\Delta Q = E - \mu$ 的热量; 相反, 当能量为 E 的电子到达化学势为 μ 的电子库时, 就会导致电子库增加 $\Delta Q = E - \mu$ 的热量. 根据 (10) 式, 可以得到单位时间流出电子库的电子数为

$$\dot{N} = \frac{I}{e} = \frac{2}{h} \int t(E) \Delta f dE, \quad (15)$$

以及流出电子库的热流为

$$\dot{Q} = \frac{2}{h} \int \Delta Q t(E) \Delta f dE. \quad (16)$$

因此, 从两电子库流出的热流为

$$Q_{L/R}(V) = \frac{2}{h} \int (E - \mu_F \pm eV/2) \times t(E, V) \Delta f^{\prime}(E, V) dE. \quad (17)$$

对时间取平均值, 可以得到净热流的表达式为

$$Q_{L/R}^{\text{net}} = 0.5 [Q_{L/R}(V_0) + Q_{L/R}(-V_0)].$$

如果假设 $T_L < T_R$ 的话, 制冷系数(COP)为

$$\varepsilon = \frac{Q_L^{\text{net}}}{Q_L^{\text{net}} - Q_R^{\text{net}}}. \quad (18)$$

要达到制冷的目的, 至少要保证 $Q_L^{\text{net}} > 0$, 这就需要研究电子库能量变化量 ΔQ 、透射谱 $t(E, V)$ 和费米窗 $\Delta f^{\prime}(E, V)$ 之间的关系. 结合图 2(b) 和费米窗的表达式, 我们知道, 摇摆电压大小 V_0 制约了费米窗的位置和宽度, 并且决定了电子隧穿透射谱形状, 因此有必要固定一个 V_0 来研究, 因为取定 V_0 后透射谱和费米窗的宽度就确定了, 当化学势均值 μ_F 变化时, 就相当于费米窗参照于电子透射谱的变化.

图 5 画出了不同温度下净电流跟偏压 V_0 的关系曲线, 与图 4 相似.

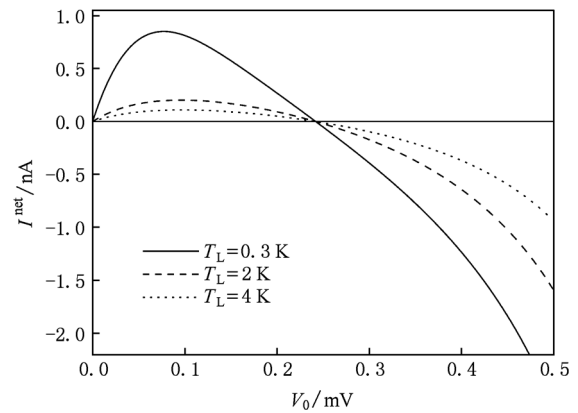


图5 在不同的 T_L 的情况下, 净电流 I^{net} 随偏压 V_0 的变化关系, $T_R = T_L + 1\text{K}$

图 6(a) 中分析了在一定偏压 V_0 的情况下, 制冷机在不同温度中流出 L 库的净热流 (即制冷率) 随化学势均值 μ_F 的变化, 当 T_L 增大时, 制冷区域增大, 而且制冷率最大值也增大. 由于制冷系数的 Carnot 值为 $\varepsilon_C = T_L / (T_R - T_L)$, 可以作出相应制冷区域内的相对制冷系数, 如图 6(b) 所示, 制冷率最大值越大, 相对制冷系数反而越小, 这种矛盾始终存在着.

5. 结 论

本文研究了“摇摆”型棘齿结构双势垒电子隧穿制冷机模型, 通过传输矩阵法数值模拟了电子的透射概率. 在两电子库温度相同的情况下, 净电流随偏压 V_0 逐渐变大, 达到最大值后, 逐渐变小, 并使净电流由正向负变化; 且温度越大, 净电流大小反而越小. 在两库温度不同的情况下, 在给定偏压 V_0

时,低温库温度 T_L 越大,制冷机的制冷区域就越宽,最大制冷率也越大,但是相对制冷系数反而越小。

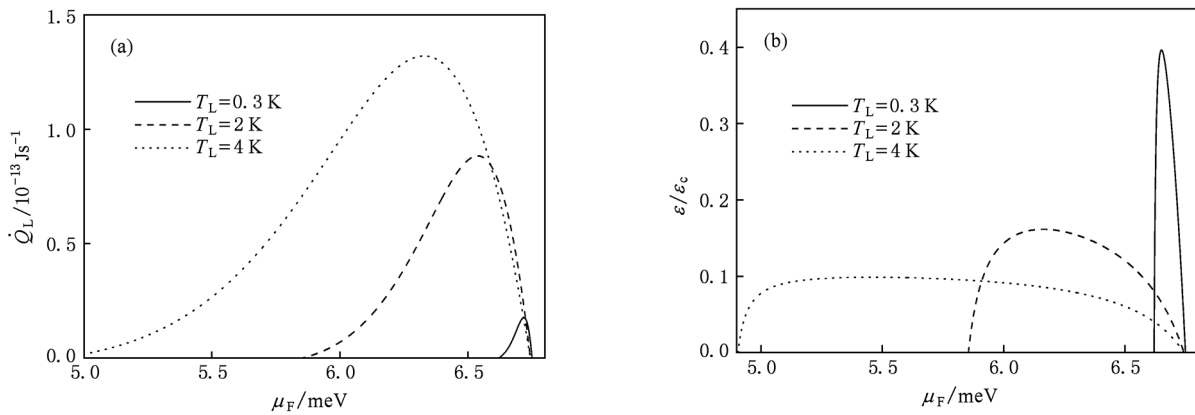


图6 (a) 流出 L 库的净热流随偏压 V_0 的变化曲线; (b) 相对制冷率随偏压 V_0 的变化曲线, 给定 $V_0 = 0.5 \text{ mV}$, $T_R = T_L + 1 \text{ K}$

[1] Pichanusakorn P, Bandaru P 2010 *Materials Science & Engineering R* **67** 19

[2] Poudel B, Hao Q, Ma Y, Lan Y, Minnich A, Yu B, Yan X, Wang D, Muto A, Vashaee D, Chen X, Liu J, Dresselhaus M D, Chen G, Ren Z 2008 *Science* **320** 634

[3] Hochbaum A I, Chen R, Delgado R D, Liang W, Garnett E C, Najarian M, Majumdar A, Yang P 2008 *Nature* **451** 163

[4] Linke H, Humphrey T E, Löfgren A, Sushkov A O, Newbury R, Taylor R P, Omling P 1999 *Science* **286** 2314

[5] Boukai A I, Bunimovich Y, Tahir-Kheli J, Yu J K, Goddard Iii W A, Heath J R 2008 *Nature* **451** 168

[6] Linke H, Sheng W, Löfgren A, Xu H Q, Omling P, Lindelof P E 1998 *Europhys. Lett.* **44** 341

[7] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597

[8] Wang X M, He J Z, Tang W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 984

[9] He J Z, Wang X M, Liang H N 2009 *Physica Scripta* **80** 035701

[10] Humphrey T E, Linke H, Newbury R 2001 *Physica E* **11** 281

[11] Linke H, Humphrey T E, Lindelof P E, Löfgren A, Newbury R, Omling P, Sushkov A O, Taylor R P, Xu H 2002 *Appl. Phys. A* **75** 237

[12] Humphrey T E, Newbury R, Taylor R P, Linke H 2002 *Phys. Rev. L* **89** 116801

[13] Zhang Y Q, Shi Y, Pu L, Zhang R, Zheng Y D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5197 (in Chinese) [张轶群, 施毅, 濮林, 张荣, 郑有焯 2008 物理学报 **57** 5197]

[14] Mu W D, Cheng H F, Chen Z H, Tang G P, Wu Z Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1212 (in Chinese) [穆武第, 程海峰, 陈朝辉, 唐耿平, 吴志桥 2009 物理学报 **58** 1212]

[15] Vassell M O, Johnson Lee, Lockwood H F 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 5206

[16] Hutchings D C 1989 *Appl. Phys. Lett.* **55** 1082

[17] Allen S S, Richardson S L 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11693

[18] Wang H M, Zhang Y F 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2226 (in Chinese) [王洪梅, 张亚非 2005 物理学报 **54** 2226]

[19] O'Dwyer M F, Humphrey T E, Linke H 2006 *Nanotechnology* **17** S338

[20] He B X, He J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3846 (in Chinese) [贺兵香, 何济洲 2010 物理学报 **59** 3846]

[21] O' Dwyer M F, Lewis R A, Zhang C, Humphrey T E 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205330

Rocked ratchet thermoelectric tunneling refrigerator^{*}

Luo Xiao-Guang He Ji-Zhou[†]

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

(Received 28 September 2010; revised manuscript received 16 December 2010)

Abstract

In this paper, the transport characteristics of the electrons in the double-barrier heterostructure under adding periodic positive and negative bias (“rocked” ratchet) are numerically simulated by the transfer matrix method. The expressions of net current and net heat flow between the two electronic reservoirs are obtained. Further, the performance characteristics of net current, net heat flow and coefficient of performance are analyzed. The results obtained here may provide some significant guidance for the design and manufacture of mecro-thermoelectric devices.

Keywords: thermoelectric tunneling refrigerator, rocked ratchet, performance parameters, transfer matrix method

PACS: 05.70.Ln, 44.15.+a, 73.23.-b, 73.50.Lw

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10765004, 11065008).

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