

纳米线异质结构对电子制冷机性能的影响*

贺兵香¹⁾ 何济洲^{1)†} 缪贵玲²⁾

1) (南昌大学物理系, 南昌 330031)

2) (江西鹰潭职业技术学院, 鹰潭 33500)

(2010年5月8日收到; 2010年7月14日收到修改稿)

研究了在具有不同温度和不同化学势的两个热库中电子通过一个三势垒纳米线异质结构进行传输的问题, 利用传输矩阵法得到了电子的传输概率, 进而算出了电子传输所产生的热流. 通过数值计算绘出了电子制冷机的性能特征曲线. 分析了偏压和异质结结构对制冷机性能的影响, 重点讨论了中间势垒高度和宽度对电子传输概率、制冷率和制冷系数的影响.

关键词: 电子制冷机, 三势垒纳米线, 性能参数, 传输矩阵法

PACS: 05.70.Ln, 73.23.Ad, 05.90.+m, 73.50.Lw

1. 引言

电子制冷技术是通过电子传输过程中携带热量来实现制冷的. 与传统的依靠介质的液态、气态变化或化学变化来实现制冷的技术相比, 电子制冷机具有高可靠性、长寿命、无运动部件和无污染性等优点. Shakouri 和 Bowers 提出了使用半导体异质结来降低势垒的高度^[1], Mahan 等人建议使用多层势垒来减少声子热漏^[2,3], Humphrey 等人发现在电子限制在非常窄的能量范围内传输的低维导体中, 电子能量转换的效率接近卡诺效率^[4-6]. Dwyer 等人研究了纳米线异质结材料中的势垒和势阱对电子传输导致的电流、热流及效率等参数的影响^[7-10], 从理论上预言: 在低温情况下, 含有双势垒共振隧穿过滤器结构的一维导体中热电子效率接近卡诺极限. 实验观察到: 在给定势垒和势阱宽度相等且约为 7 nm 的情况下, InAs/InP 双势垒纳米线异质结在低于 10 K 的低温情况下, 单个纳米线热电子能量转换器的效率接近卡诺效率, 这是因为在一维导体中电子被限制在很窄的能量范围 ($kT_c \approx 0.1$ meV) 内传输, 并且低温情况下电子和声子之间的热传导被抑制^[7]. 在纳米结构热电器件中电子的效率可以通过两种方法来提高, 一是减小电子能谱的宽度, 二是提高能谱的尖锐度, 但是前者会造成

热电器件功率的减小, 而后者则不会; 提高能谱的尖锐度可以通过构造多层窄势垒纳米结构来实现^[8]. 我们在这方面也做了一些理论研究^[11-14], 如在双势垒 InAs/InP 纳米线结构热电制冷机中, 势阱宽度一定势垒宽度变大时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, 制冷系数变大^[14]. 近年来, 纳米结构块体合金^[15]、100 nm 以下纳米线^[16] 等热电材料在实验上的成功, 纳米结构和超晶格热电材料的热电特性的理论研究^[17,18], 以及热电器件在热产生、制冷、制冷等领域应用越来越受到广泛关注^[19].

本文在前人工作基础上, 提出了一种可微调的三势垒纳米线结构对电子传输和电子制冷机性能所带来的影响, 其目的是为了优化纳米线结构. 图 1 为三势垒纳米线异质结热电子制冷机示意图, 它由两个具有不同温度和不同化学势的热库和中间的纳米线异质结组成. 热库中的电子通过纳米线异质结“能量过滤体”进行传输, 电子从低温热库吸收热量, 并释放热量到高温热库, 从而达到制冷目的. 中间的纳米线异质结由一个三势垒和两势阱异质结组成, 势阱宽度为 d_w , 势垒宽度为 d_b , 高度为 ϕ ; 中间势垒的宽度为 d_m , 高度为 ϕ_m , 中间势垒宽度和高度依赖于不同的材料而不同. 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 . 在左边低温热库加“+”电压, 右边高温热库加“-”电压, 电

* 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: hzhou@ncu.edu.cn

压大小为 V_{bias} , 下面在数值计算中 μ_C 取定一个值, μ_H 随偏压变化为 $\mu_H = \mu_{H0} + eV_{\text{bias}}$, μ_H 的初始值 $\mu_{H0} = 0.18 \text{ eV}$ (即偏压为 0 时).

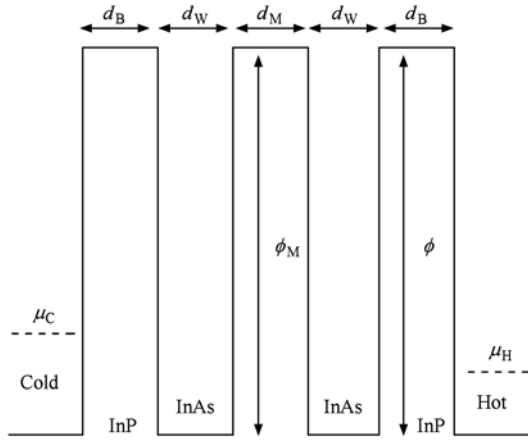


图1 三势垒纳米线异质结电子制冷机示意图 ($V_{\text{bias}} = 0$)

2. 电子传输特性

当单个电子在两个具有不同温度和不同化学势的热库之间传输时, 引起的热量改变为 $\Delta Q = E - \mu$, 其中 E 为电子在库中的能量, 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 $\Delta Q_H = (E - \mu_H)$. 由此引起的熵增为

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

令 $\Delta S = 0$, 得到

$$E_0 = \frac{\mu_C T_H - \mu_H T_C}{T_H - T_C}. \quad (2)$$

上式表明, 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. 电子在能量 $\mu_C < E < E_0$ 范围内的传输表现为制冷机的过程, 并且当电子能量 E 越靠近 E_0 , 制冷系数越接近卡诺制冷系数. 而电子在能量 $E_0 < E < \infty$ 范围内的传输表现为热机的过程^[4].

根据 Landauer 方程可以得到由于电子传输引起的电流为^[6]

$$I = \frac{2e}{h} \int (f_H - f_C) t(E) dE, \quad (3)$$

其中, 电子电量为 $e = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$, 电子总能

量为 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$, 电子有效质量为 m_e^* , 高低温热库电子的费米分布为 $f_{H/C} = 1 / \{ 1 + \exp[(E - \mu_{H/C}) / k_B T_{H/C}] \}$, 电子通过三势垒纳米线的传输概率为 $t(E)$, 可以用传输矩阵法得到^[20,21]. 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

$$\begin{aligned} \dot{Q}_H &= \frac{2}{h} \int_0^\infty t(E) (E - \mu_H) \left[\left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right)^{-1} \right] dE, \end{aligned} \quad (4)$$

和

$$\begin{aligned} \dot{Q}_C &= \frac{2}{h} \int_0^\infty t(E) (E - \mu_C) \left[\left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right)^{-1} \right] dE, \end{aligned} \quad (5)$$

引入一个与能量有关的变量 $F(E)$, 即

$$\begin{aligned} F(E) &= \frac{2}{h} (E - \mu_C) \left[\left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_C}{kT_C}\right) \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(1 + \exp\left(\frac{E - \mu_H}{kT_H}\right) \right)^{-1} \right], \end{aligned} \quad (6)$$

所以

$$\dot{Q}_C = \int_0^\infty t(E) F(E) dE. \quad (7)$$

由(4)和(5)式, 可以得到输入功率为

$$P_{\text{in}} = \dot{Q}_H - \dot{Q}_C, \quad (8)$$

制冷系数为

$$\varepsilon = \frac{\dot{Q}_C}{P_{\text{in}}}. \quad (9)$$

3. 制冷机的性能分析

本节数值计算中参数的选取为 $m_{\text{InAs}}^* = 0.023m_e^*$, $m_{\text{InP}}^* = 0.08m_e^*$, $T_H = 300 \text{ K}$, $T_C = 200 \text{ K}$, $\mu_C = 0.19 \text{ eV}$, $\mu_{H0} = 0.18 \text{ eV}$, $\mu_H = \mu_{H0} + eV_{\text{bias}}$. 当两边势垒高度 $\phi = 0.57 \text{ eV}$, 势垒宽度 $d_B = 7.0 \text{ nm}$, 势阱宽度 $d_W = 7.0 \text{ nm}$, 中间势垒高度 $\phi_M = 0.57 \text{ eV}$ 时, 利用传输矩阵法得到中间势垒宽度取不同值的情况下, 电子通过纳米线异质结共振隧穿的传输概率随能量的变化, 如图 2 所示. 由于异质结有两个势阱, 共振隧穿概率出现了两个透射峰, 电子的传输

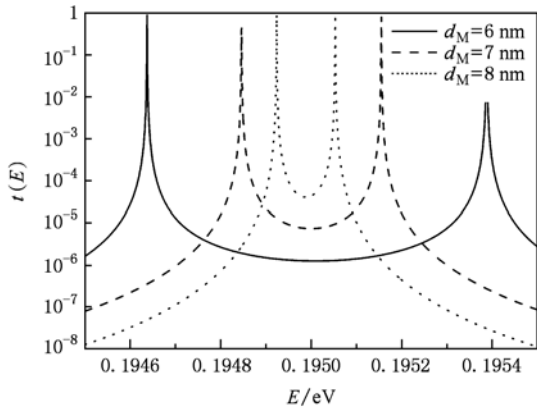


图2 电子共振隧穿的传输概率随能量的变化曲线, $d_W = 7.0 \text{ nm}$, $d_B = 7.0 \text{ nm}$, $\phi_M = 0.57 \text{ eV}$, $d_M = 8.0 \text{ nm}, 7.0 \text{ nm}, 6.0 \text{ nm}$

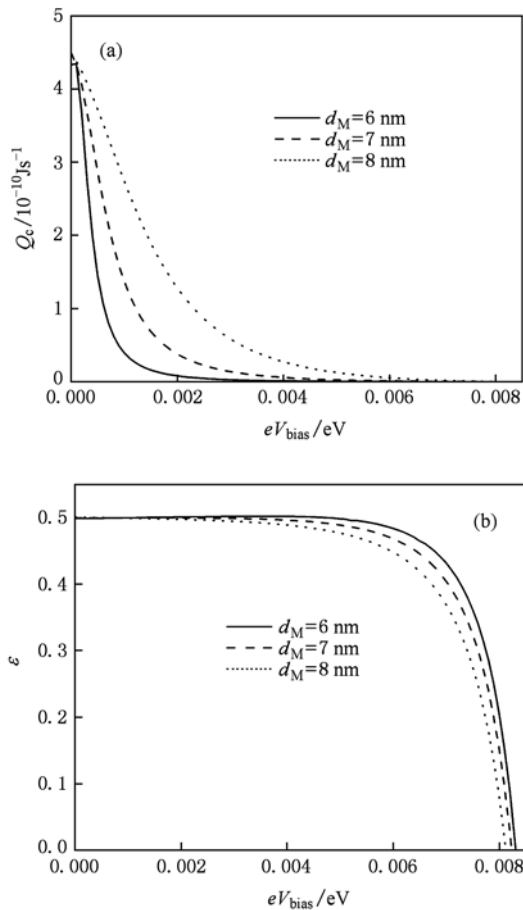


图3 $d_W = 7.0 \text{ nm}$, $d_B = 7.0 \text{ nm}$, $\phi_M = 0.57 \text{ eV}$, 中间势垒宽度分别取 $d_M = 8.0, 7.0, 6.0 \text{ nm}$ 时, 制冷率和制冷系数随偏压的变化曲线 (a) 制冷率; (b) 制冷系数

也称为双共振隧穿. 从图中可以看出, 中间势垒宽度 d_M 越小, 表示两个势阱相隔越近, 两个势阱之间的相互作用越强, 因此两个共振透射峰会裂开, 距

离变的越宽.

当 $d_W = 7.0 \text{ nm}$, $d_B = 7.0 \text{ nm}$, $\phi_M = 0.57 \text{ eV}$ 时, 中间势垒宽度 d_M 和偏压对制冷机制冷率和制冷系数的影响如图3所示. 可以发现随着偏压的增加制冷率不断减小, 制冷系数不断减小. 同一偏压时, 中间势垒宽度 d_M 越大对应的制冷率越小, 制冷系数越高. 因此, 中间势垒宽度 d_M 越大, 两个共振峰之间的距离越小, 制冷率越小, 制冷系数越大. 这和文献[31]所得到的结论一致, 即两个势垒位置相隔越宽, 制冷率越小和制冷系数越大. 因此, 要提高制冷机的性能应该选择合适的中间势垒宽度 d_M .

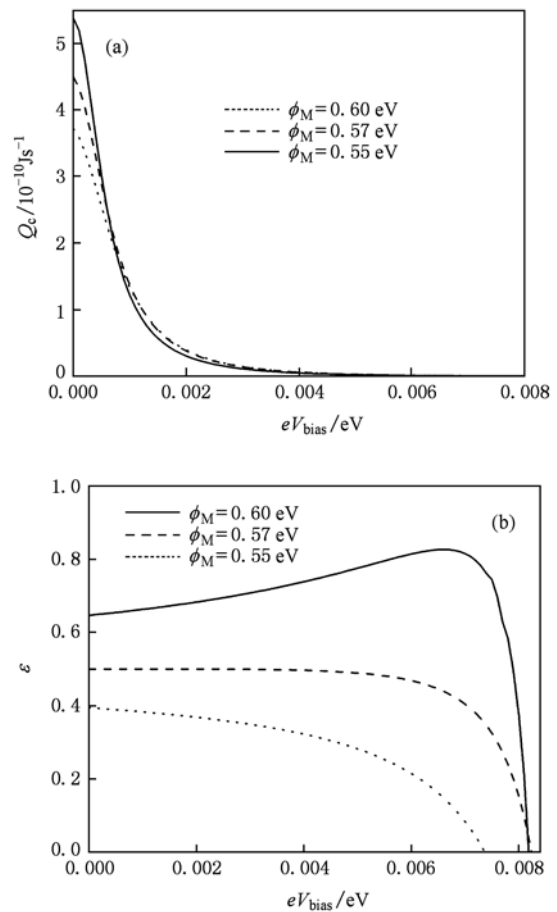


图4 $d_W = 7.0 \text{ nm}$, $d_B = 7.0 \text{ nm}$, $d_M = 7.0 \text{ nm}$, 中间势垒高度分别取 $\phi_M = 0.60, 0.57, 0.55 \text{ eV}$ 时, 制冷率和制冷系数随偏压的变化曲线 (a) 制冷率; (b) 制冷系数

中间势垒高度 ϕ_M 和偏压对制冷机制冷率和制冷系数的影响如图4所示. 可以发现, 随着偏压的增加, 制冷率不断减小. 当偏压较小时, 势垒 ϕ_M 越高同一偏压对应的制冷率越小; 而当偏压较大时, 势垒越高同一偏压对应的制冷率越大. 但是, 势垒越高同一偏压对应的制冷系数越大.

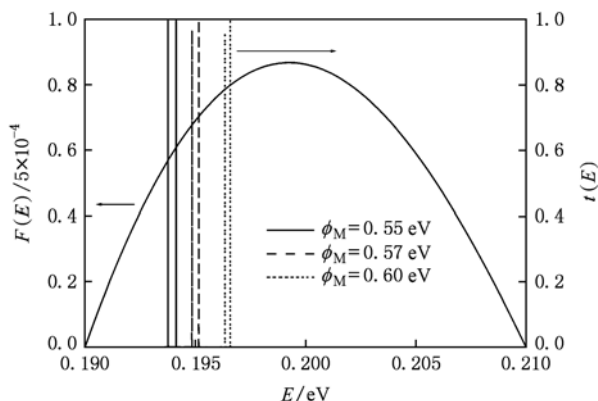


图5 $F(E)$ 随着能量 E 的变化曲线(抛物线状), $d_w = 7.0$ nm, $d_B = 7.0$ nm, $d_M = 7.0$ nm, 中间势垒高度 $\phi_M = 0.60, 0.57, 0.55$ eV时透射概率 $t(E)$ 随能量的变化曲线

为了解释图4中制冷率的变化曲线,我们根据(6)式可以得到 $F(E)$ 随能量的变化曲线(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 $t(E)$ (图5中的三条双共振透射谱). 根据(7)式,知道 \dot{Q}_c 由 $t(E)$ 和 $F(E)$ 的值决定,透射概率 $t(E)$ 只有在共振透射能量附近不为零,不在共振透射能量附近透射概率几乎为零. 另一方面,电子能量在某些值范围内 $F(E)$ 不为零,不在这个值范围 $F(E)$ 几乎为零. 所以,如果利用

纳米线异质结作为能量过滤体来设计制冷机,其热流将主要集中在共振透射能量附近,制冷机的制冷率和制冷效率将主要由共振透射能量决定.

4. 结 论

基于透射概率和狄拉克分布我们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由三个势垒两个势阱构成的纳米线异质结电子制冷机. 利用纳米线异质结材料来实现电子的双共振传输,使电子通过双共振从低温热库传输到高温热库. 根据传输矩阵法数值计算出电子的共振传输概率,并从 Landauer 方程得到两热库之间电子传输形成的电流,进而得到相应的热流. 分析了电子双共振透射概率,以及偏压和异质结结构对制冷机性能的影响,重点讨论了中间势垒高度和宽度对电子传输概率、制冷机制冷率和制冷系数的影响. 发现当两个势阱之间的势垒宽度增加,即势阱相隔越远时,两个势阱之间的相互作用越弱,两个共振透射峰之间的宽度越窄,制冷率越小,制冷系数越大. 与双势垒纳米线异质结电子制冷机相比较^[14],发现三个势垒纳米线异质结电子制冷机的制冷系数要小,制冷率也小. 但是如果考虑声子热漏的影响,三个势垒纳米线异质可以减少声子热漏.

[1] Shakouri A, Bowers J E 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1234
 [2] Mahan G D, Woods L M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4016
 [3] Mahan G D, Sofo J O, Bartkowiak M 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 4683
 [4] Humphrey T E, Newbury R, Taylor R P, Linke H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 116801
 [5] Humphrey T E, Linke H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 096601
 [6] Humphrey T E, Linke H, Newbury R 2001 *Physica E* **11** 281
 [7] O'Dwyer M F, Humphrey T E, Linke H 2006 *Nanotechnology* **17** S338
 [8] O'Dwyer M F, Lewis R A, Zhang C 2005 *Phys. Rev. B* **72** 205330
 [9] O'Dwyer M F, Humphrey T E, Lewis R A, Zhang C 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 4153
 [10] O'Dwyer M F, Lewis R A, Zhang C 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 1167
 [11] Wang X M, He J Z, Tang W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 984
 [12] He J Z, Wang X M, Liang H N 2009 *Physica Scripta* **80** 035701
 [13] He J Z, He B X 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 2345 (in Chinese)
 [何济洲、贺兵香 2010 物理学报 **59** 2345]
 [14] He B X, He J Z 2010 *Acta. Phys. Sin.* **59** 101 (in Chinese)
 [贺兵香、何济洲 2010 物理学报 **59** 101]
 [15] 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
 [16] Hochbaum A I, Chen R, Delgado R D, Liang W, Garnett E C, Najarian M, Majumdar A, Yang P 2008 *Nature* **451** 163
 [17] 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 2008 物理学报 **57** 5197]
 [18] 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]
 [19] Pichanusakorn P, Bandaru P 2010 *Materials Science & Engineering R* **67** 19
 [20] Miyamoto K, Yamamoto H 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 311
 [21] Krishnamurthy S, Chen A B, Sher A 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 5037

Influence of nanowire heterostructure on performance of electron refrigerator*

He Bing-Xiang¹⁾ He Ji-Zhou^{1)†} Miao Gui-Ling²⁾

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

2) (*Yingtian Vocational & Technical College, Yingtian 33500, China*)

(Received 8 May 2010; revised manuscript received 14 July 2010)

Abstract

In this paper, the electron transports through a three-barrier nanowire heterostructure between two reservoirs with different temperatures and chemical potentials are studied. The transport probability of electron is obtained by using the transfer matrix method, and the heat flow carried by the electrons transfer is calculated out. The performance characteristic curves of the refrigerator are plotted by numerical calculations. The influence of bias voltage and heterostructure on the performance of the refrigerator is analyzed. Especially, the effects of the height and the width of the middle barrier on transport probability, cooling rate, and colling coefficient are emphasized.

Keywords: electron refrigerator, three-barriers nanowire, performance parameters, transfer matrix method

PACS: 05.70.Ln, 73.23.Ad, 05.90.+m, 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