

横向能量及入射角度对多势垒结构共振传输的影响

骆 敏¹, 杨双波²

(1. 南京林业大学理学院, 江苏 南京 210037)

(2. 南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210046)

[摘要] 利用一维多势垒结构模型推导出透射系数的表达式, 并计算了一维四势垒结构在不同的横向能量及不同的入射角度下对共振传输的影响. 通过计算可以看出多势垒结构相当于过滤器, 对入射粒子可以起到一个过滤作用, 可以通过控制入射粒子的横向能量及入射角度使得只有具有一定能量的粒子通过, 从而可以选择出具有不同能量的粒子. 本文在对晶体电子散射及电子光谱学领域的分析具有一定的帮助.

[关键词] 横向能量, 入射角度, 共振透射系数, 多势垒结构

[中图分类号] O413.1 [文献标志码] A [文章编号] 1001-4616(2014)03-0058-04

Transverse Energy and Incidence Angle on Influence of the Multi-Barrier Structure of Resonant Transmission

Luo Min¹, Yang Shuangbo²

(1. College of Science, Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China)

(2. School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210046, China)

Abstract: The expression of transmission coefficient have been deduced for a one-dimensional multi-barrier structure, the effect of resonant transmission, with different transverse energy and different incident angles in four barrier structure, have been calculated. As can be seen by calculation that the multi-barrier structure is equivalent to a filter which has filtration function for incident particles. This structure can control the transverse energy and angles of incident particles so that only particles with certain energy pass. Hence, in this way, we can select out different particles with different energy. Meanwhile, this plays an important role in the area of analysis of crystal electron scattering and electron spectroscopy.

Key words: transverse energy, incidence angle, resonant transmission coefficient, multi-barriers structure

自从超晶格的概念^[1]被提出来,同时由于分子束外延(MBE)、金属氧化物沉积(MOCVD)^[2]等制备超晶格技术的不断完善,超晶格被越来越多地研究^[3-8].在这种超晶格材料中,人们可以任意改变薄膜的厚度,控制它的周期长度.一般来说,它的周期长度比各薄膜单晶的晶格常数大几倍或更长.超晶格是一种由两种材料交替生长而成具有周期性的半导体结构,窄带隙的材料构成势阱,宽带隙的材料构成势垒^[9].在势阱和势垒材料交替排列的周期性结构中,若势垒层厚度远大于波函数穿透深度,相邻势阱间的波函数的交叠(或者说相互作用)可以忽略,因而其大多数物理性质可用一组孤立势阱的相应性质来描述,甚至和单个孤立势阱的情况相似,只是为了便于观测某些物理效应,人们需要有多势阱效应的叠加.若势垒层厚度小于波函数穿透深度,这时,由于相邻势阱间波函数的交叠,即势阱间量子态的相互作用或耦合,导致势阱能级展宽成量子带,子带宽度决定于势阱间相互作用的强弱,尤其是和势垒层的厚度、高度及各层的电子有效质量有着密切的关系^[10-11].

一维多势垒结构由周期性的势垒势阱相互排列组成,在半导体超晶格研究中起着非常重要的作用,电子和空穴在多势垒结构中的性质和理论以及表现出的一些新物理现象,在某些情况下会有重要的技术应用,本文通过多势垒结构计算了在不同的横向能量的不同的入射角度下对共振传输的影响.

收稿日期:2013-07-25.

基金项目:南京林业大学实验室与基地建设处 2014 实验项目.

通讯联系人:骆敏,助理实验师,研究方向:超晶格. E-mail:luominnj@162.com

1 模型与理论

本文采用的多势垒结构如图 1 所示,其中, N 为势垒的个数, v_0 为势垒高度,势垒和势阱中电子的有效质量分别为 m_b^* 和 m_w^* ,势垒和势阱宽度分别为 a, b .

现在我们假定具有一定能量的粒子以与 x 方向成 θ 角度,由多势垒结构的最左边($x < 0$)向右方入射, x 方向的能量即纵向能量为 E_x ,横向能量 $E_t = E_y + E_z = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$,入射粒子的总能量为 E . 如果不考虑入射粒子在透射过程中的非弹性散射效应,其薛定谔方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(x, y, z) + u(x) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z).$$

由空间平移对称性可知, y, z 方向上粒子波函数可以用平面波表示,则总的波函数可以写成:

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} \varphi(x),$$

其中 $\varphi(x)$ 是与 x 坐标位置有关的一维薛定谔方程的解:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + u(x) \varphi(x) = E_x \varphi(x),$$

$$\text{其中 } E_x = E - E_t = E - (E_y + E_z) = E - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}.$$

我们首先考虑 $\theta = 0^\circ, E < v_0$ 的情况,在势垒和势阱区中直接求解一维薛定谔方程:

$$\text{在 1 区: } \varphi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x},$$

$$\text{在 2 区: } \varphi_2 = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x},$$

$$\text{在 3 区: } \varphi_3 = A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x},$$

$$\text{在 4 区: } \varphi_4 = A_4 e^{k_4 x} + B_4 e^{-k_4 x},$$

⋮

$$\text{在 } 2N \text{ 区: } \varphi_{2N} = A_{2N} e^{k_{2N} x} + B_{2N} e^{-k_{2N} x},$$

$$\text{在 } 2N+1 \text{ 区: } \varphi_{2N+1} = A_{2N+1} e^{ik_{2N+1} x} + B_{2N+1} e^{-ik_{2N+1} x}.$$

其中: $N \rightarrow$ 为势垒的个数

$$k_1 = k_3 = \cdots = k_{2N-1} = k_{2N+1} = \sqrt{\frac{2m_j^* (E - E_t)}{\hbar^2}}, \quad j = 1, 3, \cdots, 2N-1, 2N+1,$$

$$m_1^* = m_3^* = \cdots = m_{2N-1}^* = m_{2N+1}^*,$$

$$k_2 = k_4 = \cdots = k_{2N-2} = k_{2N} = \sqrt{\frac{2m_j^* [v_0 - (E - E_t)]}{\hbar^2}}, \quad j = 2, 4, \cdots, 2N-2, 2N.$$

$$m_2^* = m_4^* = \cdots = m_{2N-2}^* = m_{2N}^*$$

由在边界点 $x_1, x_2, x_3, x_4, \cdots, x_{2N-1}, x_{2N}$ 处波函数及其一阶导数连续 ($\psi_j = \psi_{j+1}, \frac{1}{m_j} \psi_j' = \frac{1}{m_{j+1}} \psi_{j+1}'$)^[12] 并由转移矩阵计算可得:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_1 x_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 x_1} \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i \frac{k_1}{m_1^*} & -i \frac{k_1}{m_1^*} \end{pmatrix}^{-1} \times M_2 \times M_3 \times \cdots \times M_{2N-1} \times M_{2N} \times \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i \frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*} & -i \frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{ik_{2N+1} x_{2N+1}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2N+1} x_{2N+1}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix},$$

其中:

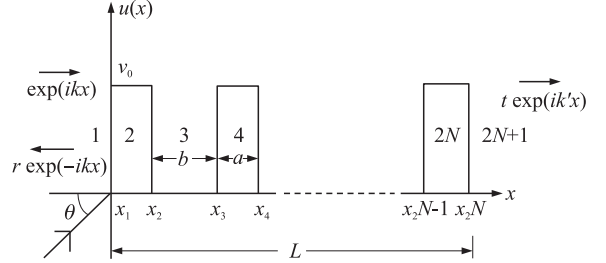


图 1 一维多势垒结构

Fig. 1 One dimensional multi-barrier structure

$$\begin{aligned}
M_2 &= \begin{pmatrix} \cosh[k_2(x_2-x_1)] & -\frac{1}{\frac{k_2}{m_2^*}} \sin[k_2(x_2-x_1)] \\ -\frac{k_2}{m_2^*} \sinh[k_2(x_2-x_1)] & \cosh[k_2(x_2-x_1)] \end{pmatrix}, \\
M_3 &= \begin{pmatrix} \cos[k_3(x_3-x_2)] & -\frac{1}{\frac{k_3}{m_3^*}} \sin[k_3(x_3-x_2)] \\ \frac{k_3}{m_3^*} \sin[k_3(x_3-x_2)] & \cos[k_3(x_3-x_2)] \end{pmatrix}, \\
&\vdots \\
M_{2N-1} &= \begin{pmatrix} \cos[k_{2N-1}(x_{2N-1}-x_{2N-2})] & -\frac{1}{\frac{k_{2N-1}}{m_{2N-1}^*}} \sin[k_{2N-1}(x_{2N-1}-x_{2N-2})] \\ \frac{k_{2N-1}}{m_{2N-1}^*} \sin[k_{2N-1}(x_{2N-1}-x_{2N-2})] & \cos[k_{2N-1}(x_{2N-1}-x_{2N-2})] \end{pmatrix}, \\
M_{2N} &= \begin{pmatrix} \cosh[k_{2N}(x_{2N}-x_{2N-1})] & -\frac{1}{\frac{k_{2N}}{m_{2N}^*}} \sinh[k_{2N}(x_{2N}-x_{2N-1})] \\ -\frac{k_{2N}}{m_{2N}^*} \sinh[k_{2N}(x_{2N}-x_{2N-1})] & \cosh[k_{2N}(x_{2N}-x_{2N-1})] \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

另 $M = M_2 \times M_3 \times \cdots \times M_{2N-1} \times M_{2N} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$ 则

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_1x_1} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1x_1} \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i\frac{k_1}{m_1^*} & -i\frac{k_1}{m_1^*} \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i\frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*} & -i\frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^{ik_{2N+1}x_{2N+1}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{2N+1}x_{2N+1}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix}.$$

由于我们假定具有一定能量的粒子由多势垒结构的最左边($x < 0$)向右方入射,则在1区有入射波和反射波,在 $2N+1$ 区中由于没有由右向左运动的粒子,因此只有透射波($A_{2N+1} \neq 0$),没有向左传播的波($B_{2N+1} = 0$)且我们根据透射系数^[13]定义可得:

$$T = \frac{J_T}{J} = \frac{\frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*}}{\frac{k_1}{m_1^*}} \left| \frac{A_{2N+1}}{A_1} \right|^2,$$

由 $k_{2N+1} = k_1, m_1^* = m_{2N+1}^*$ 可得:

$$T = \frac{4}{H_{11} + \left(\frac{k_{2N+1}}{m_{2N+1}^*} H_{12} \right)^2 + \left(\frac{1}{\frac{k_1}{m_1^*}} H_{21} \right)^2 + H_{22} + 2H_{11}H_{22} - 2H_{12}H_{21}}.$$

2 计算结果和分析

2.1 横向能量的影响

我们在计算过程中取横向能量^[14] $E_t = k_B T$, k_B 是玻尔兹曼常数, T 是温度.

由图2知:随着横向能量的增大,产生共振透射的共振能量向高能量方向移动.

2.2 入射角度的影响

由图3知:随着入射角度的增大,共振能量逐渐向高能量移动,并且共振能量的峰的个数也是逐渐减少.

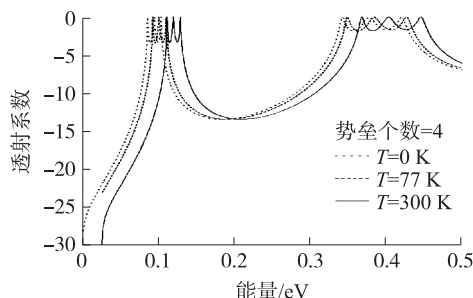


图2 四势垒结构的透射系数与能量的关系图. 横向能量为参数,有效质量($m_b^*=0.1085m_0$, $m_w^*=0.067m_0$)、势垒宽度($a=2$ nm)、势阱宽度($b=5$ nm)、势垒高度($v_0=0.5$ eV)保持不变

Fig. 2 Transmission coefficient as a function of incident electron energy for a four-barrier structure. The transverse energies as a parameter. The effective mass ($m_b^*=0.1085m_0$, $m_w^*=0.067m_0$), the barrier width ($a=2$ nm), the well width ($b=5$ nm), the barrier height ($v_0=0.5$ eV) remain unchanged

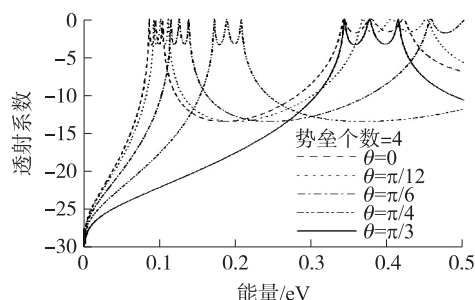


图3 四势垒结构的透射系数与能量的关系图. 入射角度为参数,有效质量($m_b^*=0.1085m_0$, $m_w^*=0.067m_0$)、势垒宽度($a=2$ nm)、势阱宽度($b=5$ nm)、势垒高度($v_0=0.5$ eV)保持不变

Fig. 3 Transmission coefficient as a function of incident electron energy for a four-barrier structure. Incident angle as a parameter. The effective mass ($m_b^*=0.1085m_0$, $m_w^*=0.067m_0$), the barrier width ($a=2$ nm), the well width ($b=5$ nm), the barrier height ($v_0=0.5$ eV) remain unchanged

3 结论

利用一维薛定谔方程和转移矩阵推导了多势垒结构在 $E < v_0$ 情况下的透射系数的表达式,采用 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 的参数,计算了无偏压情况下 4 个势垒结构的透射系数,并分析了横向能量及入射角度与共振能量之间的关系. 计算结果表明:(a)随着横向能量的增大,产生共振透射的共振能量向高能量方向移动.(b)随着入射角度的增大,共振能量逐渐向高能量移动,并且共振能量的峰的个数也是逐渐减少. 这些结果表明多势垒结构对入射粒子可以起到一个过滤作用,可以通过改变横向能量和入射角度使得只有具有一定能量的粒子通过,从而可以选择出具有不同能量的粒子. 同时这些结果也有利于我们对共振透射物理现象的理解,对实验和器件研究也具有一定的参考和指导作用.

[参考文献]

- [1] Esaki L, Tsu R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors[J]. IBM J Res Develop, 1970, 14(1): 61-65.
- [2] 黄和鸾. 半导体超晶格—材料与应用[M]. 沈阳: 辽宁大学出版社, 1992.
- [3] Tsu R, Esaki L. Tunneling in a finite superlattice[J]. Appl Phys Lett, 1973, 22(11): 562-564.
- [4] Chang L L, Esaki L, Tsu R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers[J]. Appl Phys Lett, 1974, 24(12): 593-595.
- [5] Kelly M J. Tunneling in quantum-well structures[J]. Electronics Letters, 1984, 20(19): 771-772.
- [6] Vasell M O, Johnson Lee, Lockwood H F. Multibarrier tunneling in heterostructures[J]. J Appl Phys, 1983, 54(9): 5 206-5 213.
- [7] Rauch C, Strasser G, Unterrainer K, et al. Transition between coherent and incoherent electron transport in superlattices[J]. Phys Rev Lett, 1998, 81(16): 3 495-3 498.
- [8] 徐进章, 许怀哲, 徐徐, 等. ABABA 型方形双势垒结构中随质量和入射角度变化的共振贯穿的研究[J]. 兰州大学学报: 自然科学版, 2005, 41(4): 82-84.
- [9] 夏建白, 朱邦芬. 半导体超晶格物理[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1995.
- [10] 骆敏, 杨双波. 多势垒结构共振透射系数的计算[J]. 南京师大学报: 自然科学版, 2012, 35(2): 50-55.
- [11] 骆敏, 杨双波. 外场中多势垒结构的共振传输[J]. 南京师大学报: 自然科学版, 2012, 35(4): 34-40.
- [12] Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation[J]. Phys Rev B, 1981, 24(10): 5 693-5 697.
- [13] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.
- [14] Vasell M O, Johnson Lee, Lockwood H F. Multibarrier tunneling in Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs heterostructures[J]. J Appl Phys, 1983, 54(9): 5 206-5 213.

[责任编辑: 顾晓天]