

Calculation of Conductance for Multi-Barrier Structure in a Constant Electric Field

Min Luo, Shuangbo Yang

School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing
Email: yangshuangbo@njnu.edu.cn

Received: Jan. 14th, 2012; revised: Feb. 11th, 2012; accepted: Feb. 16th, 2012

Abstract: In this paper, the current density expression and the unit area conductance for one-dimensional multi-barrier structure in the presence of a constant electric field were derived. For a selected range of parameters of semiconductor materials (GaAs/Ga_xAl_{1-x}As), through the numerical calculation the characteristics of unit area conductance versus the applied voltage to the structure was studied. This paper also studied how the characteristics of the conductance-voltage changes with the temperature and the width of the barrier.

Keywords: Multi-Barrier Structure; Conductance

外场中多势垒结构的电导的计算

骆 敏, 杨双波

南京师范大学物理科学与技术学院, 南京
Email: yangshuangbo@njnu.edu.cn

收稿日期: 2012 年 1 月 14 日; 修回日期: 2012 年 2 月 11 日; 录用日期: 2012 年 2 月 16 日

摘 要: 本文对外电场中一维多势垒结构推导了电流密度表达式, 进而得出单位面积的电导。在半导体材料 (GaAs/Ga_xAl_{1-x}As) 的参数范围内, 通过数值计算进一步研究了一维多势垒结构的单位面积电导与电压特性曲线及温度和势垒宽度对电导 - 电压曲线的影响。

关键词: 多势垒结构; 电导

1. 引言

自从超晶格的概念^[1]被提出来, 同时由于分子束外延(MBE)、金属有机化合物化学气相沉积(MOCVD)^[2]等制备超晶格技术的不断完善, 超晶格及其在电场中的性质被越来越多的研究^[3-12]。近年来还研究了基于石墨烯为基底的双势垒结构的共振传输现象^[13], 计算了透射系数与电子能量及入射角度之间的关系, 电导率与费米能级的变化关系。T. Noda 和 N. Koguchi 研究了嵌入砷化镓量子环的双势垒共振隧穿二极管的伏安特性^[14]。Guan Sun 等人研究了 GaN/AlN 非对称耦合量子阱在深紫外光区域的光致发光的发射机理^[15]。

由于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^[16], 可通过选择不同的材料、生长不同的厚度、控制掺杂, 改变势阱的形状等方式来控制材料的性质。

利用多势垒结构的量子效应理论, 制造出了各种新的物理器件, 比如量子阱级联激光器(QCL); 基于量子阱子能带之间及子能带和连续态之间跃迁理论的量子阱红外光电探测器(QWIP)^[17]; 基于量子约束斯塔克效应的光调制器^[18]和光双稳器件^[19](又叫自电光效应器件 - SEED 器件); 基于共振隧穿理论的共振隧穿二极管(RTD)和共振隧穿三极管(RTT)。

本文通过电子在一定能量和波矢下入射多势垒结构的透射系数来计算电流密度^[20-22], 然后进一步推导出单位面积的电导, 研究了电导与电压特性曲线及温度和势垒宽度对它的影响, 其中计算透射系数采用了转移矩阵方法^[23,24].

2. 模型与理论

本文采用的模型如图 1 所示, 其中, N 为势垒的个数, v_0 为势垒的高度, 势垒和势阱中电子的有效质量分别为 m_b^* 和 m_w^* , 势垒和势阱的宽度分别为 a, b , v_B 是对势垒结构所加的外电压。

现考虑将 GaAs/Ga_{0.5}Al_{0.5}As 导带简化成多势垒

结构, GaAs 形成势阱, GaAlAs 形成势垒, 如图 1(a) 所示, 且假定该多势垒结构中势垒和势阱不含杂质, 对该势垒结构从右向左施加一个正向电压 v_B , 势垒结构发生倾斜如图 1(b) 所示, 电子从左向右入射, 形成透射电流。

2.1. 电流密度

由于电子 x 方向运动与 yz 平面运动相互独立, 且势能只依赖 x 坐标, 则电子通过多势垒结构的透射系数 $T(k)$ 与电子在 yz 平面的能量分量 E_{yz} 无关, 而只依赖于 E_x , 即 $T = T(k_x)$, 又知: 从左边入射电子的电流密度由费米 - 狄拉克分布函数和透射系数决定, 即:

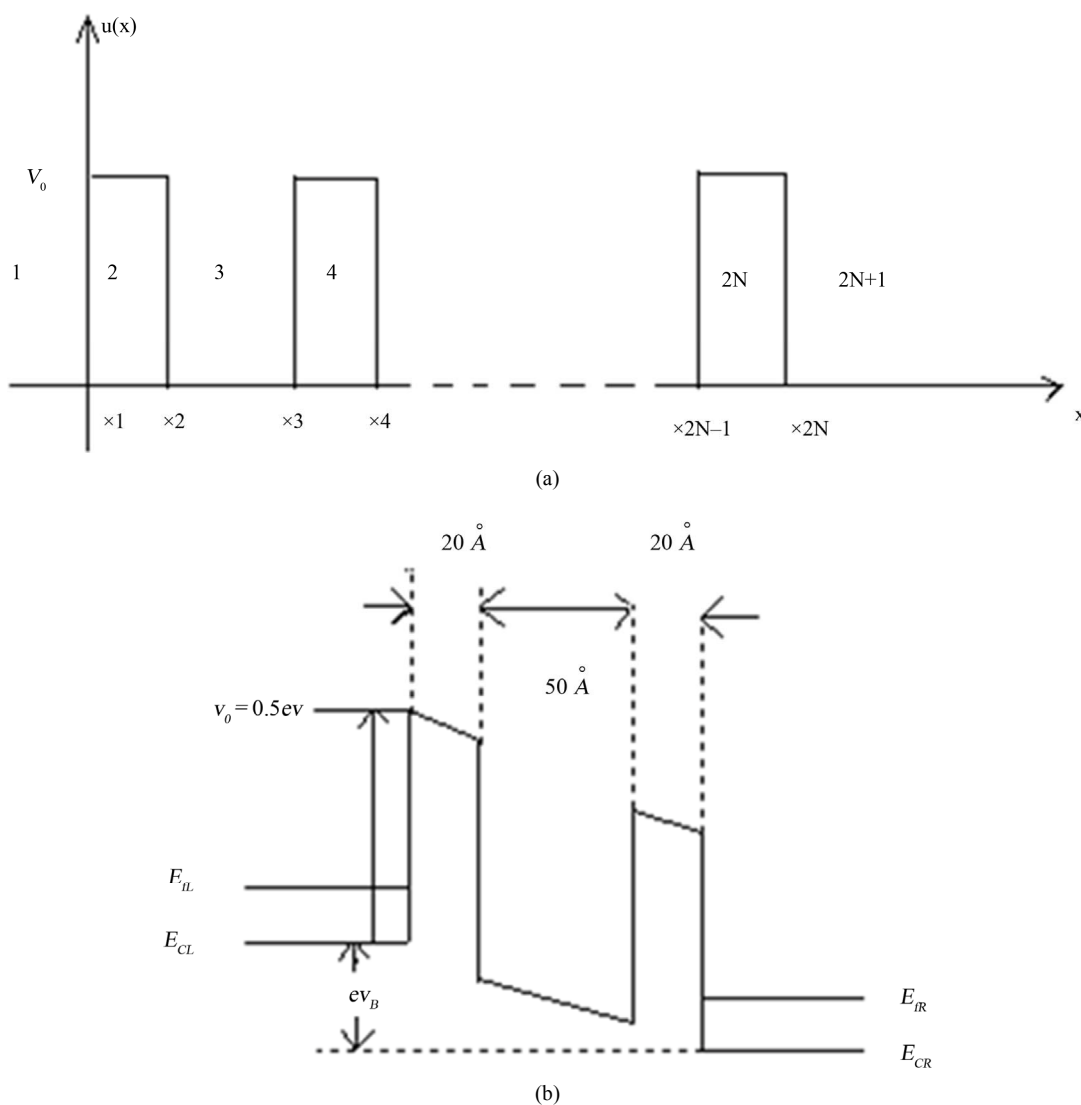


Figure 1. (a) Multi-barrier structure; (b) Multi-barrier structure in an external electric field. E_{CL}, E_{CR} are the bottom of the conduction band on the left side and on the right side, E_{FL}, E_{FR} are the Fermi energy on the left side and on the right side
图 1. (a) 多势垒结构; (b) 外电场下的多势垒结构, 其中 E_{CL}, E_{CR} , 分别为左边和右边的导带底能量, E_{FL}, E_{FR} 分别为左边和右边的费米能级

$$J_L = e \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\hbar k_x}{m^*} T(k_x) \times \left[2 \int \frac{d^2 k_{yz}}{(2\pi)^2} f \left(E_{CL} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{yz}^2}{2m^*}, E_{fL} \right) \right] \quad (1)$$

其中: E_{CL} , E_{fL} 分别为左边的导带底能量和费米能级。同理可得, 从右边反射回来的电流密度为:

$$J_R = -e \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\hbar k_x}{m^*} T(k_x) \times \left[2 \int \frac{d^2 k_{yz}}{(2\pi)^2} f \left(E_{CR} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_{yz}^2}{2m^*}, E_{fR} \right) \right] \quad (2)$$

由(1)(2)两式得总的电流密度为:

$$J = J_L + J_R = e \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\hbar k_x}{m^*} T(k_x) \times \left\{ \begin{array}{l} f \left(E_x + \frac{\hbar^2 k_{yz}^2}{2m^*}, E_{fL} \right) \\ -f \left(E_x + \frac{\hbar^2 k_{yz}^2}{2m^*}, E_{fR} \right) \end{array} \right\} = \frac{e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty T(E_x) [n_{2D}(E_{fL} - E_x) - n_{2D}(E_{fR} - E_x)] dE_x \quad (3)$$

其中二维电子密度为:

$$n_{2D}(E_{fL} - E_x) = 2 \int \frac{d^2 k_{yz}}{(2\pi)^2} f \left(E_x + \frac{\hbar^2 k_{yz}^2}{2m^*}, E_{fL} \right) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{yz} - (E_{fL} - E_x)}{k_B T}}} dE_{yz} = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} \int_0^{\frac{E_{fL} - E_x}{k_B T}} \frac{1}{1 + z} dz = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left(1 + e^{\frac{E_{fL} - E_x}{k_B T}} \right) \quad (4)$$

其中: $z = e^{-\frac{E_{yz} - (E_{fL} - E_x)}{k_B T}}$, 及

$$n_{2D}(E_{fR} - E_x) = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left(1 + e^{\frac{E_{fR} - E_x}{k_B T}} \right) \quad (5)$$

综上(3)~(5)式可得:

$$J = \frac{em^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \ln \left(\frac{1 + e^{\frac{E_{fL} - E_x}{k_B T}}}{1 + e^{\frac{E_{fL} - eV_B - E_x}{k_B T}}} \right) T(E_x) dE_x \quad (6)$$

其中: k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度, $T(E_x)$ 为透射系数。

当 $T \rightarrow 0$ K 时: $n_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} E \Theta(E)$, 其中:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}, \text{ 则式(3)即总的电流密度 } J \text{ 变为:}$$

$$J = \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_{fL}} (E_{fL} - E_x) T(E_x) dE_x, \quad eV_B > E_{fL} \quad (7)$$

$$J = \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3} \times \left[eV_B \int_0^{E_{fL} - eV_B} T(E_x) dE_x + \int_{E_{fL} - eV_B}^{E_{fL}} (E_{fL} - E_x) T(E_x) dE_x \right] \quad (8)$$

$eV_B < E_{fL}$

2.2. 电导

按定义温度为 T 时的单位面积的电导为:

$$G = \frac{J}{v_B} = \frac{em^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3 v_B} \int_0^\infty \ln \left(\frac{1 + e^{\frac{E_{fL} - E_x}{k_B T}}}{1 + e^{\frac{E_{fL} - eV_B - E_x}{k_B T}}} \right) T(E_x) dE_x \quad (9)$$

当温度 $T \rightarrow 0$ K 时, 则单位面积的电导近似为:

$$G = \frac{J_{T \rightarrow 0}}{v_B} = \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3 v_B} \int_0^{E_{fL}} (E_{fL} - E_x) T(E_x) dE_x, \quad (10)$$

$eV_B > E_{fL}$

$$G = \frac{em^*}{2\pi^2 \hbar^3 v_B} \times \left[eV_B \int_0^{E_{fL} - eV_B} T(E_x) dE_x + \int_{E_{fL} - eV_B}^{E_{fL}} (E_{fL} - E) T(E_x) dE_x \right] \quad (11)$$

$eV_B < E_{fL}$

3. 计算结果与分析

1) 在温度 $T = 0$ K 时, 电导与电压的特征曲线(图 2)。

由图 2(b)知两势垒结构的单位面积的电导随着偏压的增大出现振荡现象, 两个峰值电压分别为 $v_{B1} = 0.177$ v, $v_{B2} = 0.759$ v, 这是因为: 由分析图 2(a)无偏压两势垒结构的透射系数与入射电子能量关系知: 量子阱中有两个束缚态能级($E_1 = 0.094$ ev, $E_2 = 0.378$ ev), 且每个束缚态能级都具有一定的宽度。当

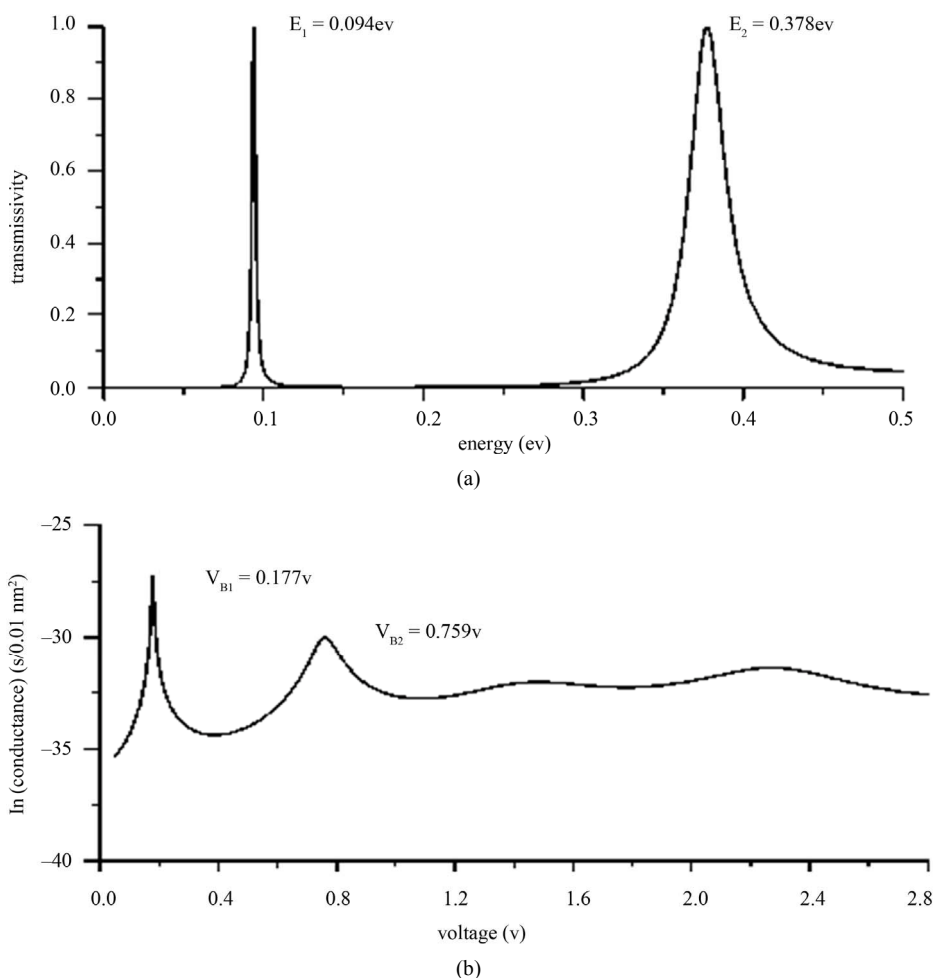


Figure 2. (a) Transmission coefficient as a function of incident electron energy for an unbiased two-barrier structure; (b) Natural log of the unit area conductance vs the applied voltage at $T = 0$ K for the double-barrier structure. The effective mass $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$, the barrier width $a = 2$ nm, the well width $b = 5$ nm, the barrier height $v_0 = 0.5$ eV, the Fermi energy $E_f = 0.005$ eV
图 2. (a) 无偏压的两势垒结构的透射系数与入射电子能量的关系; (b) 温度 $T = 0$ K 时 两势垒结构单位面积电导的自然对数与外加偏压的关系。其中有效质量 $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$, 势垒宽度 $a = 2$ nm, 势阱宽度 $b = 5$ nm, 势垒高度 $v_0 = 0.5$ eV, 费米能级 $E_f = 0.005$ eV

入射电子能量等于能级的中间值时发生完全共振透射, 也可以说电子在该处出现的几率最大。当两势垒结构从右端向左端加正向电压时, 左边能级相对右边的升高, 势垒结构发生倾斜如图 1(b)所示, 随着所加电压 v_B 增大, 束缚态能级 E_1 相对左边降低, 当 E_1 能级的最小值等于左边的费米能级 E_{FL} 时, 此时开始发生共振隧穿, 当所加偏压 v_B 进一步增大, 束缚态能级 E_1 相对左边继续降低, 此时发生共振隧穿的电子数也越来越多, 单位面积的电导也急剧增大, 当电子能量等于 E_1 能级中间值($E_1 = 0.094$ eV)时发生完全共振隧穿, 此时单位面积的电导达到最大值; 所加偏压 v_B 继续增大, E_1 能级继续降低, 参与共振隧穿的电子数目逐渐减少, 单位面积的电导降低, 当 E_1 能级的最小值

与左边导带底平行时, 此时电导达到最小值。同理, 随着所加电压 v_B 继续增大, 当 E_2 能级的最小值等于左边的费米能级 E_{FL} 时, 此时开始发生共振隧穿, 当电子能量等于 E_2 能级中间值($E_2 = 0.378$ eV)时发生完全共振隧穿, 此时单位面积的电导达到最大值; 所加偏压 v_B 继续增大, E_2 能级继续降低, 参与共振隧穿的电子数目逐渐减少, 单位面积的电导降低, 当 E_2 能级的最小值与左边导带底平行时, 此时电导达到最小值。同时可看到电导的峰值电压大约是共振能量的二倍。

2) 在温度 $T > 0$ K 时, 电导与电压特征曲线关系(图 3)。

由图 3 知: 温度对电导与偏压之间的关系基本上无影响, 电导的峰值偏压随温度的增大基本保持不

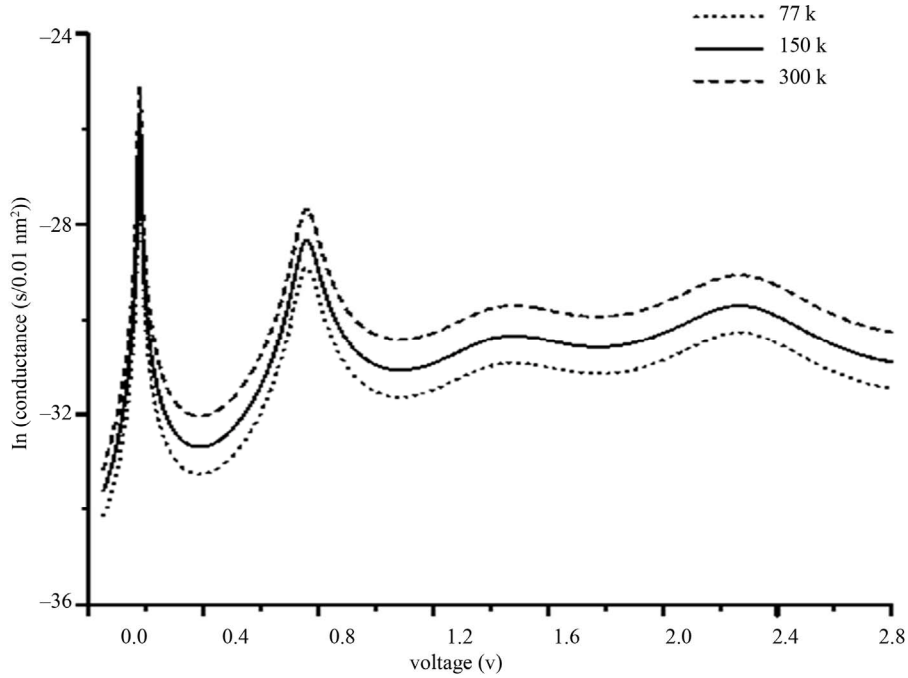


Figure 3. Natural log of the unit area conductance vs the applied voltage at different temperatures for the double-barrier structure. The effective mass $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$, the barrier width $a = 2$ nm, the well width $b = 5$ nm, the barrier height $v_0 = 0.5$ ev, the Fermi energy $E_f = 0.005$ ev

图 3. 不同温度下两势垒结构的单位面积电导的自然对数与外加偏压的关系。有效质量 $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$, 势垒宽度 $a = 2$ nm, 势阱宽度 $b = 5$ nm, 势垒高度 $v_0 = 0.5$ ev, 费米能级 $E_f = 0.005$ ev

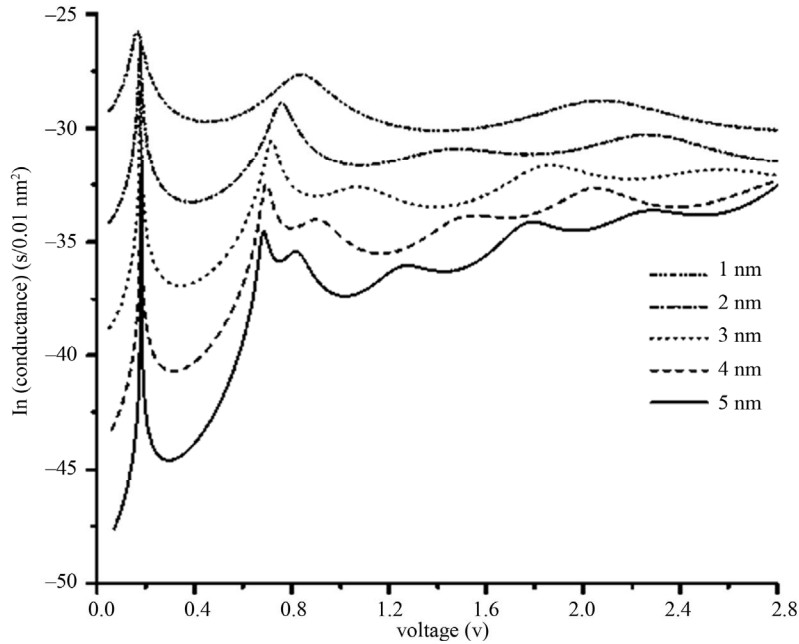


Figure 4. Natural log of the unit area conductance vs the applied voltage at $T > 0$ K and the different barrier width for the double-barrier structure. The barrier width $a = 1$ nm, 2 nm, 3 nm, 4 nm, 5 nm, the effective mass $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$, the well width $b = 5$ nm, the barrier height $v_0 = 0.5$ ev, the Fermi energy $E_f = 0.005$ ev

图 4. 温度 $T > 0$ K 时, 不同势垒宽度下两势垒结构的单位面积电导的自然对数与外加偏压的关系。势垒宽度 $a = 1$ nm, 2 nm, 3 nm, 4 nm, 5 nm。有效质量 $m_w^* = 0.067m_0$, $m_b^* = 0.1085m_0$ 。势阱宽度 $b = 5$ nm, 势垒高度 $v_0 = 0.5$ ev, 费米能级 $E_f = 0.005$ ev 保持不变

变, 只是电导随温度的增大而增大。

3) 势垒宽度对电导的影响(势阱宽度一定)。由图 4 知: 两势垒结构的单位面积电导随势垒宽度的增大逐渐降低, 电导的第一个峰值偏压基本保持不变, 第二个及以后的峰值偏压随着势垒宽度增大向低压方向移动, 即电导峰值之间间距减小。这是因为随着势垒宽度的增大, 势阱中两个束缚态能级间的间距逐渐减小。

4. 总结与讨论

对外场中一维多势垒结构推导了电流密度表达式, 进而得出单位面积的电导, 采用半导体材料 GaAs/Ga_{0.5}Al_{0.5} 的参数, 计算了两势垒结构的电导, 并分析了两势垒结构的单位面积电导与电压特性曲线及温度和势垒宽度对电导 - 电压特性曲线的影响。计算结果表明: 1) 温度对电导与偏压的特性曲线基本无影响, 只是电导随温度的增大而增大。2) 当势阱宽度一定时, 随着势垒宽度的增大, 峰值偏压间的间距减小, 且电导随势垒宽度的增大而减小。该计算结果只考虑了电子态的贡献, 而实验结果应该包括了电子态、空穴的导电及电荷空间分布的贡献。在文献上还没有看到测量只考虑电子对电导贡献的实验, 则该计算结果只是纯理论结果, 与现有实验结果^[4]是有差别的。本研究有利于我们对电导的理解及对实验和器件研究具有一定的参考和指导作用。

参考文献 (References)

- [1] L. Esaki, R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. IBM Journal of Research and Development, 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] N. G. Sun, D. Q. Yuan and W. D. Deering. Electric-field-induced changes in the transmission spectrum of a superlattice. Physical Review B, 1995, 51(7): 4641-4644.
- [4] L. L. Chang, L. Esaki and R. Tsu. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. Applied Physics Letters, 1974, 24(12): 593-595.
- [5] M. J. Kelly. Tunnelling in quantum-well structures. Electronics Letters, 1984, 20(19): 771-772.
- [6] M. O. Vasell, J. Lee and H. F. Lockwood. Multibarrier tunneling in Ga_{1-x}Al_x/GaAs heterostructures. Journal of Applied Physics, 1983, 54(9): 5206-5213.
- [7] C. Rauch, G. Strasser, K. Unterrainer, W. Boxleitner, E. Gornik and A. Wacker. Transition between coherent and incoherent Electron Transport in Ga/GaAlAs superlattices. Physical Review Letters, 1998, 81(16): 3495-3498.
- [8] F. Borondo, J. Sanchez-Dehesa. Electronic structure of a GaAs quantum well in an electric field. Physical Review B, 1986, 33(12): 8758-8761.
- [9] E. J. Austin, M. Jaros. Electronic structure of an isolated GaAs-GaAlAs quantum well in a strong electric field. Physical Review B, 1985, 31(8): 5569-5572.
- [10] B. Jogai, K. L. Wang. Interband optical transitions in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs superlattices in an applied electric field. Physical Review B, 1987, 35(2): 653-659.
- [11] M. Nakayama, M. Ando, I. Tanaka, et al. Electric-field effects on above-barrier states in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattice. Physical Review B, 1995, 51(7): 4236-4241.
- [12] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, et al. Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures. Physical Review B, 1985, 32(2): 1043-1060.
- [13] R. Biswas, S. Mukhopadhyay and C. Sinha. Biased driven resonant tunneling through a double barrier graphene based structure. Physics E, 2010, 42(5): 1781-1786.
- [14] T. Noda, N. Koguchi. Current-voltage characteristics in double-barrier resonant tunneling diodes with embedded GaAs quantum rings. Physics E, 2006, 32(1-2): 550-553.
- [15] G. Sun, Y. J. Ding, G. Y. Liu, et al. Photoluminescence emission in deep ultraviolet region from GaN/AlN asymmetric-coupled quantum wells. Applied Physical Letters, 2010, 97(2): Article ID 021901-1-021904-3.
- [16] 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.
- [17] A. Rogalski. Quantum well photoconductors in infrared detector technology. Journal of Applied Physics, 2003, 93(8): 4355-4390.
- [18] T. H. Wood, C. A. Burrus, D. A. B. Miller, et al. High-speed optical modulation with GaAs/GaAlAs quantum wells in a *p-i-n* diode structure. Applied Physical Letters, 1984, 44(1): 16-18.
- [19] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, et al. Novel hybrid optically bistable switch: The quantum well self-electro-optic effect device. Applied Physical Letters, 1984, 45(1): 13-15.
- [20] R. Tsu, L. Esaki. Tunneling in a finite superlattice. Applied Physical Letters, 1973, 22(11): 562-564.
- [21] K. Mukherjee, N. R. Das. Tunneling current calculations for nonuniform and asymmetric multiple quantum well structures. Journal of Applied Physics, 2011, 109(5): Article ID 053708-1-053708-6.
- [22] Y. Ando, T. Itoh. Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers. Journal of Applied Physics, 1987, 61(4): 1497-1502.
- [23] B. Jonsson, S. T. Eng. Solving the Schrödinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. IEEE Journal of Quantum Electronics, 1990, 26(11): 2025-2035.
- [24] R. Gilmore. Elementary quantum mechanics in one dimension. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 2004.