

GaAs-Al_xGa_{1-x}As 双势垒结构中电子共振隧穿寿命*

宫 箭[†] 梁希侠 班士良

(内蒙古大学理工学院物理系, 呼和浩特 010021)

摘要: 采用转移矩阵和数值计算相结合的方法求解含时 Schrödinger 方程, 计算了电子在双势垒结构中的构建时间和隧穿寿命. 结果表明: 构建时间和隧穿寿命对于描述电子隧穿时间特性同等重要. 通过研究隧穿时间对结构参数的依赖情况发现, 隧穿寿命随阱宽和垒厚的增加而迅速增大.

关键词: 双势垒; 共振隧穿; 寿命

PACC: 7340G; 7320D

中图分类号: O471.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2005)10-1929-05

1 引言

Esaki 和 Zhu 最早在上个世纪 70 年代研究了通过半导体超晶格结构的共振隧穿问题, 预言了负微分电阻现象^[1]. 随后这一现象在实验上得到证实^[2], 并且被公认为是构成一系列高速和高频电子器件的基础. 在过去近三十年的时间, 许多研究人员对这一问题进行了研究^[1~14], 理论和实验都揭示了一些有意义的静态性质, 像负微分电阻^[1~10]、电流双稳^[11]和声子辅助隧穿^[12~14]等. 与此同时, 有关这一问题的动力学方面解释还不全面, 尤其像电子从超晶格结构中的逃逸时间问题对器件的开关时间起着决定性的作用, 对这一问题的研究将对全面了解电子输运过程有很大的帮助.

Tsuchiya 等人^[15]在 1987 年首次测量了电子通过 AlAs-GaAs-AlAs 双势垒结构的逃逸时间, 他们利用条纹相机 (streak camera system) 观测了光致发光强度随时间的衰减情况. 发现在窄垒情况下, 电子隧穿时间对温度的依赖很弱, 而且隧穿时间随垒厚的增加而指数增加. 解决这一问题的理论方法主要包括波包散射法^[16~20]、Feynman 路径积分^[21]和

Larmor 时钟法^[21]等. Guo 等人^[16]较早地利用波包散射理论讨论了隧穿时间问题, 计算了构建时间 (build-up time) 和衰减时间 (decay time), 他们指出: 简单利用衰减时间来确定时间性质是不合理的. Kim 等人^[18]也给出了一种计算隧穿寿命的分析方法, 然而他们的方法只适用于方型量子阱结构, 并且没有详尽地讨论结构参数的影响. 最近一些学者^[22,23]利用束缚能级的宽度和衰减时间之间的关系, 讨论了能级宽度受结构参数和外场的影响, 但计算方法略显简单, 无法对隧穿时间给出全面的描述.

本文在波包散射理论的基础上, 给出了一种求解含时 Schrödinger 方程的数值方法, 利用转移矩阵和 Runge-Kutta (RK) 法相结合求得含时波函数. 研究发现这种方法较传统的转移矩阵法^[1,3]在求解波函数时更简单, 并且能够讨论任意形状势垒结构的隧穿问题. 我们曾经在以前的工作中利用该方法讨论了抛物量子阱结构的共振隧穿, 得到了有意义的结果^[8~10], 也计算了电子通过双势垒结构的构建时间和隧穿寿命. 结果发现: 利用构建时间和隧穿寿命共同描述电子隧穿时间特性更合理. 通过对隧穿寿命的讨论发现, 电子通过双势垒结构的隧穿寿命对结构参数有很强的依赖关系, 隧穿寿命随阱宽和

* 国家自然科学基金 (批准号: 10164003), 内蒙古大学青年科技基金 (批准号: ND0206) 资助项目

宫 箭 男, 1976 年出生, 博士研究生, 研究方向为层状半导体结构中输运问题.

梁希侠 男, 1944 年出生, 博士生导师, 现主要从事半导体异质结构中的电-声子相互作用的研究.

班士良 男, 1956 年出生, 博士生导师, 现主要从事半导体异质结构中的电-声子相互作用及隧穿问题的研究.

[†] 通信作者. Email: ndgong@imu.edu.cn

2005-03-19 收到, 2005-04-30 定稿

垒厚的增加而迅速增大.

2 理论模型

对于阱宽 W 、两个垒厚分别为 L_1, L_2 的双势垒结构,电子满足的含时 Schrödinger 方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + \left[\frac{1}{2} P_z \frac{1}{m^*(z)} P_z + U(z) - eFz \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (1)$$

其中 $m^*(z)$ 和 $U(z)$ 分别是随空间变化的电子有效质量和势函数; F 为沿晶格增长方向的外加电场强度. 由于电子横向动量守恒, 包络函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 可以表示成

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(z, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2)$$

其中 $\vec{k} = (k_x, k_y)$; $\vec{r} = (x, y)$ 分别是电子在平行界面方向的横向波矢和坐标. 采用分离变量, $\psi(z, t)$ 分成

$$\psi(z, t) = \psi(z) T(t) \quad (3)$$

将(2)式和(3)式代入方程(1)中,可以得到

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t} = E_z T(t) \quad (4)$$

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_1 a} & e^{-ik_1 a} \\ ik_1 e^{ik_1 a} & -ik_1 e^{-ik_1 a} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(a) & g(a) \\ \frac{m_1(a)}{m_2(a)} f(a) & \frac{m_1(a)}{m_2(a)} g(a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(b) & g(b) \\ f(b) & g(b) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} e^{ik_3 b} & e^{-ik_3 b} \\ ik_3 \frac{m_2(b)}{m_3(b)} e^{ik_3 b} & -ik_3 \frac{m_1(a)}{m_2(a)} e^{-ik_3 b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_3 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

以及

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_1 a} & e^{-ik_1 a} \\ ik_1 e^{ik_1 a} & -ik_1 e^{-ik_1 a} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f(a) & g(a) \\ \frac{m_1(a)}{m_2(a)} f(a) & \frac{m_1(a)}{m_2(a)} g(a) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} \quad (12)$$

利用(11)和(12)式很容易得到 A_1, B_1, A_2, B_2, A_3 各个系数.

另外,我们用 y 来代替(5)式中 $f(z)$ 和 $g(z)$, 代入 Schrödinger 方程得到:

$$\begin{cases} x = -\frac{2}{\hbar^2} [E_z - U(z) + eFz] y \\ y = m(z) x(z) \end{cases} \quad (14)$$

方程(14)的数值解可以利用 RK 法得到.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \left[\frac{1}{m^*(z)} \nabla^2 \right] + U(z) - eFz \right] \psi(z) = E_z \psi(z) \quad (5)$$

其中 E_z 为电子在 z 方向的能量. 电子在 t 时刻含时波函数可以通过对与时间无关的本征函数 $\psi(z)$ 展开得到

$$\psi(z, t) = \int_0^\infty e^{-i(v\hbar) E_k t} C(k) \psi_k(z) dk \quad (6)$$

其中 $e^{-i(v\hbar) E_k t}$ 项反映了波函数随时间的演化; E_k 为电子的初始动能.

作为方程(5)的解, $\psi(z)$ 可以结合转移矩阵和数值计算得到. 我们将结构分成三个区,在 1 区 ($z < a$) 和 3 区 ($z > b$) 势函数分别为常数, 2 区可以为任意垒区 ($a < x < b$), 本文仅讨论双势垒方型量子阱结构.

我们定义三个区的定态电子波函数 $\psi(z)$ 分别为:

$$\psi_1(z) = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z} \quad (7)$$

$$\psi_2(z) = A_2 f(z) + B_2 g(z) \quad (8)$$

$$\psi_3(z) = A_3 e^{ik_3 z} \quad (9)$$

其中

$$k_i = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*(z) (E_z - U(z) + eFz)} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (10)$$

利用连续性条件, (7) ~ (9) 式中的振幅满足:

由(16)式,可知当 $z > a$ 时, $(z, 0) = 0$, 所以 $C(k)$ 可以简化成:

$$C(k) = \int_a^{\infty} (A_1 e^{-ikz} + B_1 e^{ikz}) (z, 0) dz \quad (17)$$

将(16)式代入(17)式,可以得到展开系数 $C(k)$ 的解析形式:

$$C(k) = \frac{\sqrt{z_0}}{1/4} [e^{-i(k-k_0)z_0} e^{-(k-k_0)^2 z_0/2} + e^{i(k+k_0)z_0} B_1 e^{-(k+k_0)^2 z_0/2}] \quad (18)$$

3 结果与讨论

我们选择 Al_{0.4}Ga_{0.6}As-GaAs-Al_{0.4}Ga_{0.6}As 材料构成的双势垒结构进行了计算. 材料对应的势垒高度和电子有效质量作为 Al 组分的函数满足:

$$U_0 = \begin{cases} 0.75x, & 0 < x < 0.45 \\ 0.75x + 0.69(x - 0.45)^2, & 0.45 < x < 1 \end{cases} \quad (19)$$

$$m^*(z) = 0.067 + 0.083x, \quad 0 < x < 1 \quad (20)$$

图 1 给出了波函数振幅 $|ψ(z, t)|^2$ 随时间的演化情况. 双势垒结构由两个 5nm 的垒和一个 5nm 的方型量子阱构成. 从图中可以看到, $|ψ(z, t)|^2$ 在初始时刻是非对称的, 随着时间推移, 波函数振幅从非对称过渡到对称; 并且还可以看到峰值随时间增加而增大, 达到极值后指数衰减. 这说明电子在隧穿双势垒结构时, 由于相干效应在阱中有明显的聚集过程, 达到最大值后, 再从阱中逃逸出去.

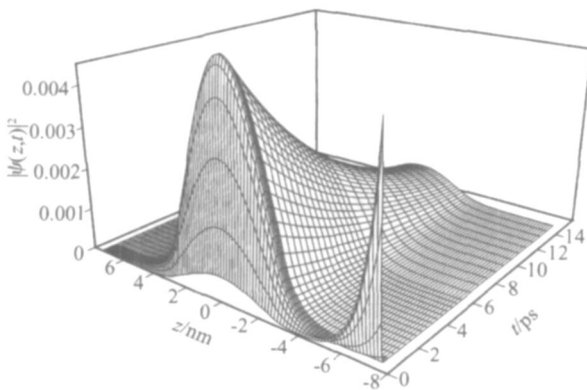


图 1 波函数振幅随时间的演化

Fig. 1 Temporal evolution of the wave function based on time-dependent Schrödinger equation

如果考虑电子可能被陷在量子阱中, 那么电子在阱区和两势垒区出现的几率可以表示为:

$$P(t) = \int_a^b dz |ψ(z, t)|^2 \quad (21)$$

$P(t)$ 给出了电子出现几率对时间的依赖关系.

我们仍然选择前面用到的双势垒结构, 计算了电子在阱区和两势垒区出现的几率 $P(t)$ 随时间的变化关系, 如图 2 所示. 从图中可以看到, 几率随时间先增加, 经过一段时间 t_b 后, 达到极大值, 然后指数衰减, 这一结果与 Guo 和 Kim 的结论是一致的^[16,18]. 对于曲线中的衰减部分可以利用公式

$$P(t) = Pe^{-t/\tau} \quad (22)$$

进行拟合, 其中 P 为任意合适的值, τ 为隧穿寿命. 根据文献^[16], t_b 是波包通过第一个垒后, 电子在阱内几率密度达到最大值所需要的时间, Guo 等人将其定义为构建时间. 图 2 中得到的构建时间和隧穿寿命分别为 0.48ps 和 7.19ps, 比较可以发现, 构建时间较短, 在描述时间特性时, 一般可以忽略. 我们也计算了其他结构的隧穿时间, 发现对于双势垒结构尺寸比较小时, 构建时间和隧穿寿命相差不大, 甚至比隧穿寿命要长. 为了简化起见, 具体结果这里不再赘述. 这说明, 利用构建时间和隧穿寿命共同描述电子隧穿时间特性是更合理的.

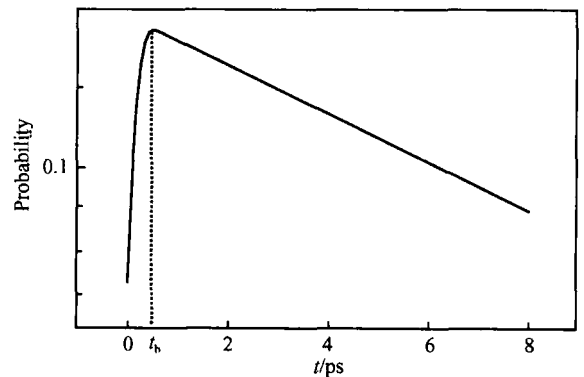


图 2 电子在量子阱和两势垒结构中出现的几率随时间的变化关系

Fig. 2 Probability of finding the electron in the well and both barriers, $P(t)$, as a function of time for a double barriers structure.

图 3 给出了隧穿寿命随阱宽的变化关系, 其中固定双势垒结构的垒厚为 5nm, 垒高 300meV. 从图中可以看到, 隧穿寿命随阱宽的增加而迅速增加. 结果是很好理解的: 当阱宽增加时, 量子阱对电子的束缚增强, 电子局域在阱内的时间变长, 因而使得电子隧穿寿命增加. 为了和实验比较, 我们也讨论了隧穿寿命随垒厚的变化关系, 同样固定阱宽 5nm, 垒高

300meV. 图 4 清晰地表明,电子隧穿寿命随垒厚的增加而指数级增加. 结果容易理解:由于两势垒厚度增加,增强了电子在阱内的相干性,阻碍电子从阱中向外逃逸,所以导致隧穿寿命变长. 这一结果与实验符合得很好^[15].

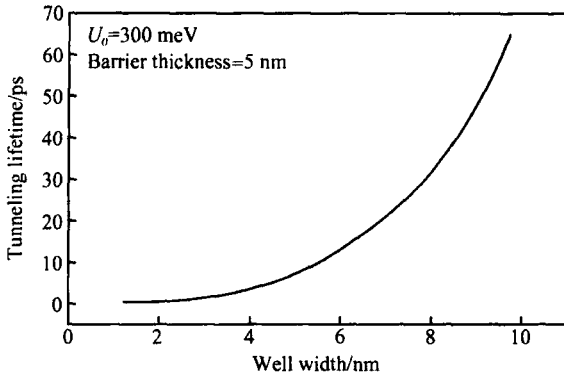


图 3 电子通过双势垒结构隧穿寿命随阱宽的变化关系

Fig. 3 Tunneling lifetimes through the double barriers structure as the functions of the well width

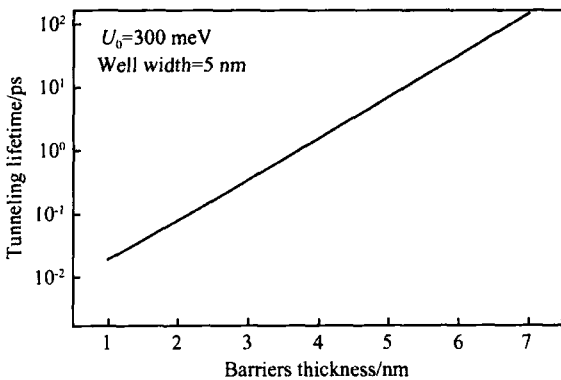


图 4 电子通过双势垒结构隧穿寿命随垒厚的变化关系

Fig. 4 Tunneling lifetimes through the double barriers structure as the functions of the barrier thickness

4 结论

本文给出一种简单数值求解含时 Schrödinger 方程的方法,给出了含时波函数随时间的演化情况,利用波包散射理论计算了电子隧穿双势垒结构的时间. 讨论了隧穿寿命对阱宽和垒厚的依赖关系,从所得结果看到,隧穿寿命随阱宽和垒厚的增加而迅速增加,说明隧穿时间对势垒结构尺寸是非常依赖的. 另外,我们的方法对计算抛物量子阱结构也是适用的. 外场、空间电荷效应等一些对共振隧穿有较

强的影响,尤其空间电荷效应将影响到电子在阱内的聚集过程,可能与构建时间和隧穿寿命的影响有较大的不同. 这些问题在进一步的研究中.

参考文献

- [1] Tsu R, Esaki L. Tunneling in a finite superlattice. *Appl Phys Lett*, 1973, 22(11) : 562
- [2] Chang L L, Esaki L, Tru R. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. *Appl Phys Lett*, 1974, 24(12) : 593
- [3] Ando Y, Itoh T. Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers. *J Appl Phys*, 1987, 61(4) : 1497
- [4] Mizuta, Tanoue T. The physics and applications of resonant tunneling diodes. Cambridge: University of Cambridge Press, 1995
- [5] Wu Jianqing, Liu Zhenxing, Jiang Desheng, et al. Vertical transport in narrow barrier GaAs/AlAs SL under elevated hydrostatic pressure. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1999, 20(4) : 303 (in Chinese) [武建青, 刘振兴, 江德生, 等. 流体静压力下窄势垒 GaAs/AlAs 超晶格的低温纵向输运. *半导体学报*, 1999, 20(4) : 303]
- [6] Wang X H, Gu B Y, Yang G Z. Coupling between the transverse and longitudinal components of an electron in resonant tunneling. *Phys Rev B*, 1997, 55(15) : 9340
- [7] Sun J P, Haddad G I, Mazumder P, et al. Resonant tunneling diodes: models and properties. *Proceedings IEEE*, 1998, 86(4) : 641
- [8] Ban S L, Hasbun J E, Liang X X. A novel method for quantum transmission across arbitrary potential barriers. *J Lumin*, 2000, 87 ~ 89 : 369
- [9] Gong J, Ban S L, Liang X X. Resonant tunneling in semiconductor multibarrier heterostructures. *International J Modern Phys B*, 2002, 16(30) : 4607
- [10] Gong J, Liang X X, Ban S L. Resonant tunneling in parabolic quantum well structures under a uniform transverse magnetic field. *Chin Phys*, 2005, 14(1) : 201
- [11] Goldman V J, Tsui D C, Cunningham J E. Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling structures. *Phys Rev Lett*, 1987, 58(12) : 1256
- [12] Turley P T, Teitworth S W. Phonon-assisted tunneling from a two-dimensional emitter state. *Phys Rev B*, 1994, 50(12) : 8423
- [13] Yan Z W, Liang X X. Role of interface optical phonons in magnetotunneling in asymmetric double-barrier structures. *J Appl Phys*, 2002, 91(2) : 724
- [14] Yan Z W, Liang X X. Optical phonon-assisted magnetotunneling peaks in GaAs/Al_xGa_{1-x}As double-barrier structure. *Phys Rev B*, 2002, 66(23) : 235324
- [15] Tsuchiya M, Matsusue T, Sakaki H. Time escape rate of electrons from quantum well in double-barrier heterostructures.

- Phys Rev Lett ,1987 ,59(20) :2356
- [16] Guo H ,Diff K ,Neofotistos G ,et al. Time-dependent investigation of the resonant tunneling in a double-barrier quantum well. Appl Phys Lett ,1988 ,53(2) :131
- [17] Stamp A P ,McIntosh G C. A time-dependent study of resonant tunneling through a double barrier. Am J Phys ,1996 ,64 (3) :264
- [18] Kim J U ,Lee H H. An analytic method for tunneling lifetime in the double-barrier quantum well. J Appl Phys ,1998 :84 (2) :907
- [19] Stoica F H ,Dragoman D. Analytical treatment of wave packet tunneling through a resonant double barrier heterostructure. J Appl Phys ,1999 ,86(5) :2677
- [20] Stefanucci G ,Almbladh C O . Time- dependent partition-free approach in resonant tunneling systems. Phys Rev B ,2004 ,69 (19) :195318
- [21] Landauer R ,Martin T. Barrier interaction time in tunneling. Rev Mod Phys ,1994 ,66(1) :217
- [22] Fisher D J ,Zhang C. Electron tunneling lifetime of a quasi-bound state in a double-barrier resonant tunneling structure. J Appl Phys ,1994 ,76(1) :606
- [23] Guo Y ,Gu B L ,Duan W H. Level width of a quasibound state in a double-barrier parabolic-well resonant tunneling structure. Z Phys B ,1997 ,102 :217

Electron Tunneling Lifetime Through a GaAs-Al_xGa_{1-x}As Double Barriers Heterostructure *

Gong Jian[†], Liang Xixia, and Ban Shiliang

(Department of Physics, College of Sciences and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

Abstract : The time-dependent Schrödinger equation is numerically solved by the combining transfer matrix and the Runge-Kutta method. The temporal evolution of the wave functions and tunneling time are discussed within a GaAs-Al_xGa_{1-x}As double barriers structure. It indicates that the build-up time cannot be ignored in comparison with the tunneling lifetime for the small system case. Furthermore, the tunneling lifetimes are studied as the functions of the structure parameters. It is also found that the tunneling lifetime increases monotonously with the well width and the barriers thickness.

Key words : double barrier heterostructure; resonant tunneling; lifetime

PACC : 7340G; 7320D

Article ID : 0253-4177(2005)10-1929-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10164003) and the Young Science Technology Foundation Inner Mongolia University (No. ND0206)

Gong Jian male, was born in 1976, PhD candidate. He is majoring in transporting in semiconductor structures.

Liang Xixai male, was born in 1944, professor. He is now engaged in research on electron-phonon interaction in semiconductor heterostructures.

Ban Shiliang male, was born in 1956, professor. He is now engaged in research on electron-phonon interaction and quantum tunneling in semiconductor heterostructures.

[†] Corresponding author. Email : ndgong @imu. edu. cn

Received 19 March 2005, revised manuscript received 30 April 2005