

Y 型量子线中电子弹道输运性质^{*}

王传奎 江兆潭

(山东师范大学物理系, 济南 250014)

摘要: 对有限长 Y 型量子线中的电子弹道输运性质进行了量子力学计算。该有限长的量子结构分与两半无限长的量子通道相连, 当施加一偏压时, 量子通道分别可作为电子的发射极和收集极。采用了转移矩阵方法和截断近似技术。计算结果表明, 当结构对于 x 轴对称时, 在入射电子的能量小于量子结构的第一个横向本征模时, 电导存在着两个峰; 当结构对于 x 轴不对称时, 电导则存在着三个峰。进一步分析表明, 这些峰来自于电子共振隧穿量子结构中的量子束缚态。该结构对于经典粒子来说是非束缚体系。当结构对于 x 轴对称时, 较高能级是双重简并的, 而当结构对于 x 轴不对称时, 该能级的简并度消除。

关键词: 量子束缚态; 共振隧穿; Y 型量子线

PACC: 7215R; 7220F; 7335

中图分类号: O471.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2001)03-0283-05

1 引言

众所周知, 在 GaAs/AlGaAs 异质结上可形成具有高迁移率的二维电子气^[1]。当对该电子气施加进一步的限制时, 例如, 利用分裂栅技术^[2], 人们可制备出量子线(一维电子气)和量子点(零维电子体系)。在低温下, 电子的平均自由程可以大于实验室制备出的量子线的长度, 因此, 电子在量子线中作弹道输运。Van Wees 等^[3]和 Wharam 等^[4]独立地发现在量子线中作弹道输运的电子的电导是量子化的, 量子单元为 $2e^2/h$ 。这一发现引起了理论和实验工作者对介观体系的极大兴趣^[5-9]。

电导的量子化是由于电子横向能量的量子化。可以证明^[10], 在理想的情况下, 每个能带对电导的贡献为 $2e^2/h$, 这样一来, 电导的值为几个量子化单元, 表明了电子占据了几个能带。因此, 这一现象完全是量子效应, 即电子在量子线中的输运性质完全由量子力学的基本原理来描述。

到目前为止, 很多量子现象被发现^[11-13]。其中

之一为在一些开放的量子结构中存在着量子束缚态。这些结构对于经典粒子来说是非束缚体系。Schult 等^[14]计算了电子在两个交叉的无限长的量子线中的能量及波函数, 并且发现了束缚态。Exner 与 Seba^[15], Avishai 等^[16], 和 Sols 与 Macucci^[17]严格求解了无限长的单曲量子线的本征值问题, 发现了一个局域于弯曲处能量小于第一个横向模的束缚态。利用量子力学的方法, Berggren 和 Ji^[18]研究了电子在有限长的具有十字形结构的量子线中的输运性质, 发现了电导的共振峰, 并且证明了该共振峰是共振隧穿结构中的量子束缚态的结果, 从而提出了一种利用电导的共振峰来探测量子束缚态的方法。C. K. Wang^[19]研究了电子在有限长的双曲量子线中的输运性质, 其理论结果较好地解释了 Wu 等的实验结果^[20]。最近, Carini 等^[21]利用电磁场技术探测了弯曲波导中的束缚模, 得到了和相应的弯曲量子线一致的结果。由于波导和量子线具有很多相似的特点(量子线被称为电子波导), 因此, Carini 利用该方法间接地证实了弯曲量子线中束缚态的存在。

本文研究了有限长 Y 型量子结构的束缚态问

* 山东省优秀中青年科学家奖励基金和国家教育部留学回国人员科研资助费资助项目。

王传奎 男, 37 岁, 教授, 理学博士, 主要从事低维体系的电子结构和电子输运性质的研究。

江兆潭 男, 24 岁, 硕士研究生, 从事半导体介观体系中输运性质的研究。

题。通过计算电子在此量子结构中的电导，得到了该量子结构中量子束缚态的性质。在本文中，我们采用了单电子近似模型，即多电子相互作用没有被考虑。这是出于两方面的考虑，一方面，我们需要对单电子的性质有一个基本的理解；另一方面，J. Wang^[22]研究了电子在量子结构中的弹道运输性质后，发现单电子近似模型和多电子模型给出了相同的定性结果。

2 理论模型

图 1 给出了形成于 GaAs/AlGaAs 异质结上的量子结构示意图。设电子被束缚于 y 方向上的方势阱中，而在 x 方向上形成了电子的通道。由于 z 方向上的势阱很窄，故在一般实验条件下，该方向上仅有最低子能带被占据，因此在下面的工作中我们选该子能带能量为能量零点，并忽略该方向的贡献。

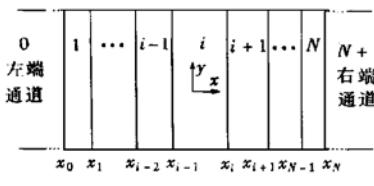


图 1 有限长的量子结构示意图 量子结构和两个半无限长的量子通道相连，并被分成 N 份。在每一份内，电子的势能仅为 y 的函数

FIG. 1 Schematic Diagram of Finite Quantum Structure

在单电子近似下，电子满足的有效质量方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \Psi(x, y) = E \Psi(x, y) \quad (1)$$

其中 m^* 为电子的有效质量。如图 1 所示，量子结构沿 x 方向被分成 N 段，设势场在每段中仅为 y 的函数，则 $V_j(x, y) = V_j + V_j(y)$ ，并且令 $V_j = 0$ 。

在第 i 段中，电子的波函数按一套完备基矢展开

$$\Psi_i(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} (B_{i,n} e^{iq_{i,n}y} + C_{i,n} e^{-iq_{i,n}y}) \Phi_{i,n}(y) \quad (2)$$

这里 $\Phi_{i,n}(y)$ 满足的方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_i(y) \right] \Phi_{i,n}(y) = E_{i,n} \Phi_{i,n}(y) \quad (3)$$

$$\text{并且有 } q_{i,n} = \begin{cases} \sqrt{2m^*(E - E_{i,n})/\hbar^2}, & E > E_{i,n} \\ i \sqrt{2m^*(E_{i,n} - E)/\hbar^2}, & E < E_{i,n} \end{cases}$$

设量子结构的左端和右端分别与一无限长的量子线相连，则左端量子线的波函数可写为

$$\Psi_0(x, y) = \sum_n [e^{iq_{0,n}y} \delta_{n,l} + C_{0,n} e^{-iq_{0,n}y}] \Phi_{0,n}(y) \quad (4)$$

而右端量子线的波函数为

$$\Psi_{N+1}(x, y) = \sum_n B_{N+1,n} e^{iq_{N+1,n}y} \Phi_{N+1,n}(y) \quad (5)$$

根据波函数的连续性条件并利用转移矩阵方法和截断近似技术^[19]，可求出任一段中电子波函数的展开系数。

对于以能量 E 入射的电子波，由任意一段的波函数求得的穿过量子通道的电流为

$$\begin{aligned} j(k) &= \frac{ie\hbar}{2m^*} \int_{-\infty}^{\infty} dy \left[\Psi_i^*(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_i(x, y) \right. \\ &\quad \left. - \Psi_i(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi_i^*(x, y) \right] \\ &= -\frac{e\hbar}{m^*} \left[\sum_n^{\text{Re}} q_{i,n} (b_{i,n} b_{i,n}^* - c_{i,n} c_{i,n}^*) \right. \\ &\quad \left. + \sum_n^{\text{Im}} q_{i,n} (b_{i,n} c_{i,n}^* - c_{i,n} b_{i,n}^*) \right] \quad (6) \end{aligned}$$

式中 $\text{Re}(\text{Im})$ 表示对 $q_{i,n}$ 为实数(虚数)的 n 取和，且 $k = \sqrt{2m^* E / \hbar^2}$ 。

考虑到线性运输，即对量子结构施加弱的偏压 V ，根据泡利不相容原理，能量范围在 $(E_F - eV, E_F)$ 的入射电子对电流有贡献，这样，在 $T = 0K$ ，我们可以近似地给出量子结构电导的表达式

$$G = -\frac{2em^* j(k)|_{|k|=k_F}}{h^2} \quad (7)$$

3 数值结果和讨论

利用已建立的理论模型，我们计算了 Y 型量子结构的电导。Y 型量子结构的示意图由图 2 中的内插图给出，该结构可看作为一个 T 型和一个双曲型量子线结构的混合体。对 GaAs 来说，电子的有效质量 $m^* = 0.067m_e$ 。

电导随入射能量的变化曲线由图 2 给出。图 2 中曲线 a 和 b 分别对应着两套结构参数。当 $t = 20\text{nm}$, $t_0 = 30\text{nm}$, $W = 100\text{nm}$ 和 $W_1 = 40\text{nm}$ 时，I 区的第一个横向模能量为 $E_1 = 14\text{meV}$ 。众所周知，对于弯曲的量子结构，电导的量子化平台被破坏

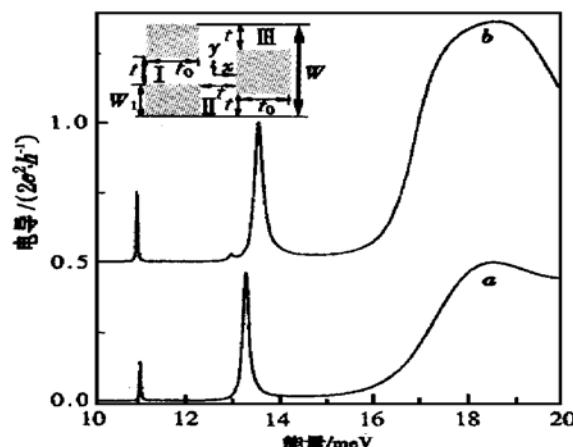


图 2 电导随入射电子能量的变化曲线 $W = 100\text{nm}$, $t = 20\text{nm}$, $t_0 = 30\text{nm}$ 曲线 a: $W_1 = 40\text{nm}$; 曲线 b: $W_1 = 50\text{nm}$. 图中的内插图是 Y 型量子结构. 为清楚起见, 曲线 b 在纵向上被补偿 $0.5(2e^2/h)$.

FIG. 2 Relation Between Conductance and Energy of Incident Electrons

了^[19]. 图 2 曲线 a 中, 令人注意的是在 $E < E_1 = 14\text{meV}$ 的范围内电导有两个共振峰 $G = 0.17 \times 2e^2/h$ 和 $0.48 \times 2e^2/h$, 其对应的能量分别为 $E_g = 11.03\text{meV}$ 和 $E_e = 13.29\text{meV}$. 该共振峰是电子共振隧穿结构中的量子束缚态的结果. 在以前的工作中, 人们发现孤立的 T 型结构和单曲结构中各有一个量子束缚态^[23, 24]. 而现在的量子结构为一个 T 型结构和两个单曲结构的混合体, 因此该结构的束缚态为耦合束缚态. 考虑到结构对于 x 轴的对称性和两

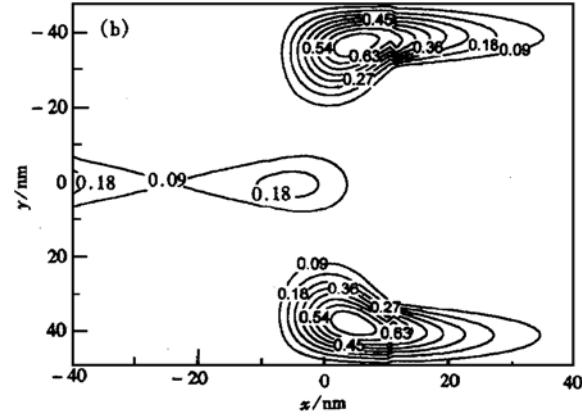
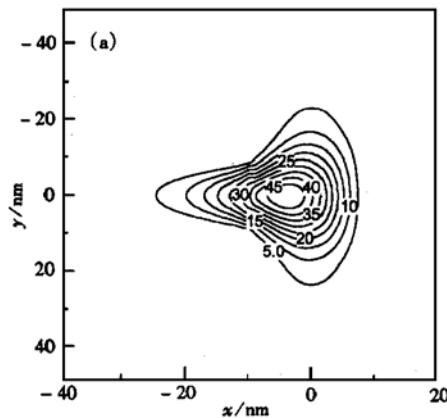


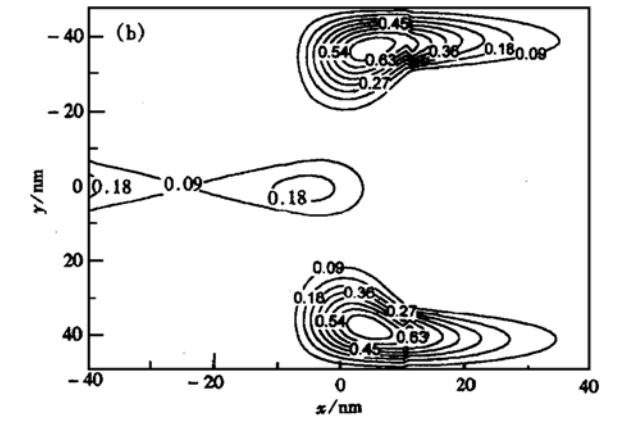
图 3 图 2 曲线 a 所示电导共振峰对应的态的几率分布等高线 (a) $E_g = 11.03\text{meV}$, (b) $E_e = 13.29\text{meV}$.

FIG. 3 Contour Line of Probability Distribution of the States due to Conductance Resonant Peaks (a) $E_g = 11.03\text{meV}$, (b) $E_e = 13.29\text{meV}$.

为了更好地说明量子束缚态的性质, 图 3 和图 4 给出了量子束缚态的几率分布等高线. 图 3(a) 和

个单曲结构的束缚态相互作用非常弱, 利用微扰理论, 可得到两个耦合能级, 其中高的能级为双重简并, 这样只观察到电导的两个共振峰. 量子束缚态的存在表明量子结构中存在着势阱^[25], 因此, 耦合量子束缚态来自于势阱的耦合. 由于 T 型结构和单曲结构对应的势阱是不相同的, 这样, 当入射电子的能量等于束缚态的能量时, 电子共振隧穿两个不等的势阱, 因此, 共振隧穿几率小于 1, 且值只与势阱的性质有关^[26].

为了说明上面的讨论, 我们取 $W_1 = 50\text{nm}$, 而保持其它参数与前相同, 此时结构对于 x 轴为非对称的. 由图 2(b) 可见, 在 $E < E_1 = 14\text{meV}$ 的能量范围内, 电导存在着三个共振峰, 对应的能量分别为 $E_g = 10.96\text{meV}$, $E_{e1} = 12.98\text{meV}$, $E_{e2} = 13.57\text{meV}$, 这是电子共振隧穿耦合量子束缚态的结果. 需要指出的是两激发态对应的电导峰值分为 $0.03(2e^2/h)$ 和 $0.5(2e^2/h)$, 可见二者差别很大. 如前所述, 此时电子共振隧穿两个不等同的势阱, 共振隧穿几率小于 1, 且只与势阱的性质有关. 由于量子结构对于 x 轴为非对称的, 对于该图所选的参数, T 型结构和上单曲结构的距离比和下曲结构的距离短. 因此当束缚态主要局域在 T 型结构和上单曲结构时, 共振隧穿几率大于当束缚态主要局域在 T 型结构和下曲结构的情况. 由于结构的非对称性, 原来两重简并的能级出现分裂, 从而该量子结构中存在着三个耦合束缚态.



(b) 分别是图 2(a) 中电导的两个共振峰对应的态的几率分布等高线. 由图 3 可见, 缚态几率分布对

于 x 轴是对称分布的, 第一个束缚态主要局域于 T 型空间处, 而第二个束缚态则主要局域于两个单曲空间处。图 4(a)、(b) 和(c) 分别是图 2 曲线 b 中电导的三个共振峰对应的态的几率分布等高线。由图 4 可清楚地看到束缚态几率分布对于 x 轴的非对称性。第一个束缚态仍主要局域于 T 型空间处, 而另两个束缚态则分别局域于下上两个单弯曲处。从该图亦可看到, 对于该类结构, 利用计算电导不能够准确地给出束缚态的几率分布。只有计算定态问题才可准确地给出束缚态, 很显然这是一个非常复杂的问题。

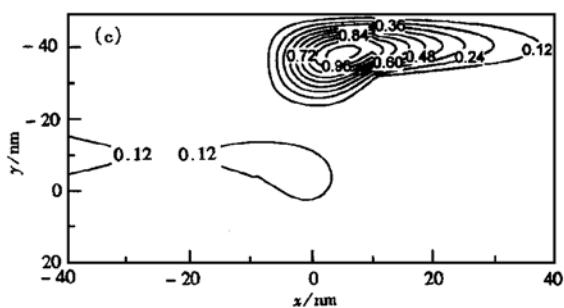
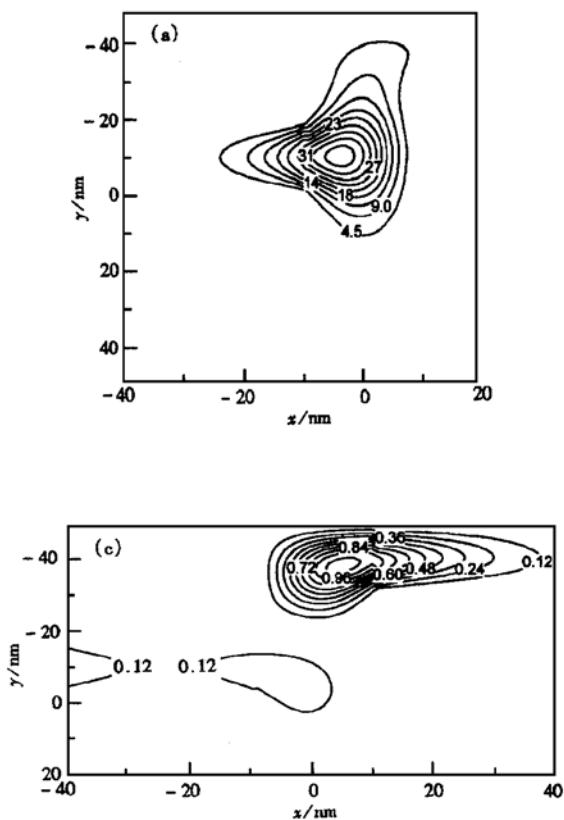
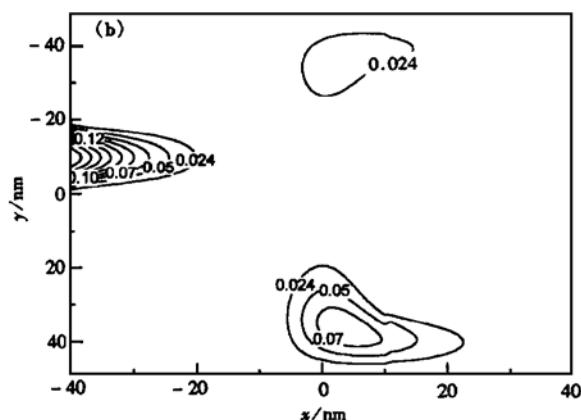


图 4 图 2 曲线 b 所示电导共振峰对应的态的几率分布等高线 (a) $E_g = 10.96\text{meV}$, (b) $E_{e1} = 12.98\text{meV}$, (c) $E_{e2} = 13.57\text{meV}$.

FIG. 4 Contour Line of Probability Distribution of the States due to Conductance Resonant Peaks (a) $E_g = 10.96\text{meV}$, (b) $E_{e1} = 12.98\text{meV}$, (c) $E_{e2} = 13.57\text{meV}$.

利用数值方法, 我们计算了 Y 型量子结构的电导。数值结果表明, 当结构对于 x 轴对称时, 在入射电子的能量小于结构的第一个横向模的范围内, 电导存在着两个共振峰。我们进一步指出电导的共振峰是由于电子共振隧穿结构内的量子束缚态的结果, 且电导第二个共振峰对应的能级是二重简并。当结构对于 x 轴不对称时, 该简并度被消除, 此时电导有三个共振峰, 表明了结构内存在三个量子束缚态。我们的结果对应着 $T = 0\text{K}$ 的情况。在有限温度下, 温度效应使电导的峰值变低和峰变宽^[19], 从而增加了实验探测的难度。对于我们的结构, 对于 $T = 0\text{K}$ 时电导峰值比较低的共振峰, 在有限温度下, 是不易观测到的。

参考文献

- [1] M. J. Kelly, Low-Dimensional Semiconductors: Materials, Technology, Devices, Oxford: Oxford University Press, 1995, 41.
- [2] H. Z. Zheng, H. P. Wei, D. C. Tsui and G. Weimann, Phys. Rev. B, 1986, **34**: 5635.
- [3] B. J. Van Wees *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1988, **60**: 848.
- [4] D. A. Wharam *et al.*, J. Phys. C, 1988, **21**: 209.
- [5] H. Chang *et al.*, Semicond. Sci. Technol., 1994, **9**: 210.
- [6] C. C. Eugester *et al.*, Phys. Rev. B, 1992, **46**, 10146.
- [7] E. G. Haanappel and D. Van der Marel, Phys. Rev. B, 1989, **39**: 5484.
- [8] G. Kirczenow, Solid State Commun., 1988, **68**: 715.
- [9] NIU Zhichuan, ZHOU Zengqi, LIN Yaowang *et al.*, Chinese Journal of Semiconductors, 1996, **17**(3): 227(in Chinese) [牛智川, 周增圻, 林耀望, 等, 半导体学报, 1996, **17**(3): 227].
- [10] Chuan-Kui Wang, Electronic Structure and Transport in Nanofabricated Low-Dimensional Semiconductor Systems, Linkoping: UniTryck Press, 1997.
- [11] T. A. Fulton and G. J. Doan, Phys. Rev. Lett., 1987, **59**: 109.
- [12] P. Delsing, T. Claeson, K. K. Likharev and L. S. Kuzmin, Phys. Rev. B, 1990, **42**: 7439.

- [13] L. P. Kouwenhoven *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1991, **67**: 1626.
 [14] R. L. Schult, D. G. Ravenhall and H. W. Wyld, Phys. Rev. B, 1989, **39**: 5476.
 [15] P. Exner and P. Seba, J. Math. Phys., 1989, **30**: 2574.
 [16] Y. Avishai *et al.*, Phys. Rev. B, 1991, **44**: 8028.
 [17] F. Sols and M. Macucci, Phys. Rev. B, 1990, **41**: 11887.
 [18] K. -F. Berggren and Z. -L. Ji, Phys. Rev. B, 1991, **43**: 4360.
 [19] Chuan-Kui Wang, K. -F. Berggren and Zhen-Li. Ji, J. Appl. Phys., 1995, **77**: 2564.
 [20] J. C. Wu *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1991, **59**: 102.
 [21] John P. Carini, J. T. Londergan and D. P. Murdock, Phys. Rev. B, 1997, **55**: 9852.
 [22] J. Wang, Y. -J. Wang and H. Guo, J. Appl. Phys., 1994, **75**: 2721.
 [23] Hua Wu *et al.*, Phys. Rev. B, 1991, **44**: 6351.
 [24] Andreas Weisshaar *et al.*, J. Appl. Phys., 1991, **70**: 355.
 [25] H. Wu, D. W. L. Sprung and J. Martorell, Phys. Rev., 1992, **B45**: 11960.
 [26] Yan Shousheng and Gan Zizhao, Mesoscopic Physics, Beijing University Press, Beijing, 1995, 257 (in Chinese) [阎守胜, 甘子钊, 介观物理, 北京: 北京大学出版社, 1995, 257].

Ballistic Transport in Y-Typed Quantum Channels^{*}

WANG Chuan-kui and JIANG Zhao-tan

(Department of Physics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China)

Abstract: The quantum-mechanical calculations of ballistic transport in finite Y-typed quantum channels are carried out. The channels connect to two semi-infinite quantum channels, which serve as the emitter and collector respectively when a potential difference is applied. The calculations are based on the transfer-matrix method and a truncating approximation. The numerical results show that, when the structure is symmetry related to the x -direction, there exist two peaks in the conductance at the energy of electrons less than the eigenvalue of the first transverse mode, and, when the structure is asymmetry related to the x -direction, there exist three peaks. It must be pointed out that these peaks are due to the resonant tunneling via bound states in the quantum structure which is a classical unbound system. When the structure is symmetry related to the x -direction, the higher energy level has double degeneracy, otherwise the degeneracy of the level is removed.

Key words: quantum bound state; resonant tunneling; Y-typed quantum wire

PACC: 7215R; 7220F; 7335

Article ID: 0253-4177(2001)03-0283-05

* Project Supported by Shandong Reward Foundation for Distinguished Middle-Aged and Young Scientist and Foundation of the Ministry of State Education for Studying Abroad and Returning Scholarships.

WANG Chuan-kui male, professor, Ph. D in condensed matter physics. He now mainly works on the electronic structure and the transport of low-dimensional systems.

JIANG Zhao-tan male, Master in condensed matter physics. Now he mainly works on the electronic transport in semiconductor mesoscopic systems.