

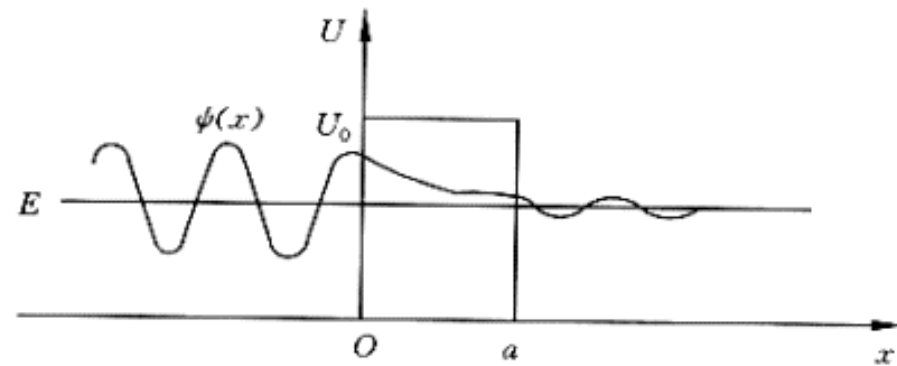
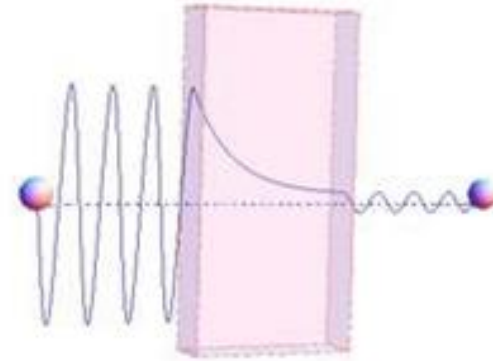
# 量子隧穿

王一博，卜逸舟，曹颖康

# Part1 隧穿效应和STM

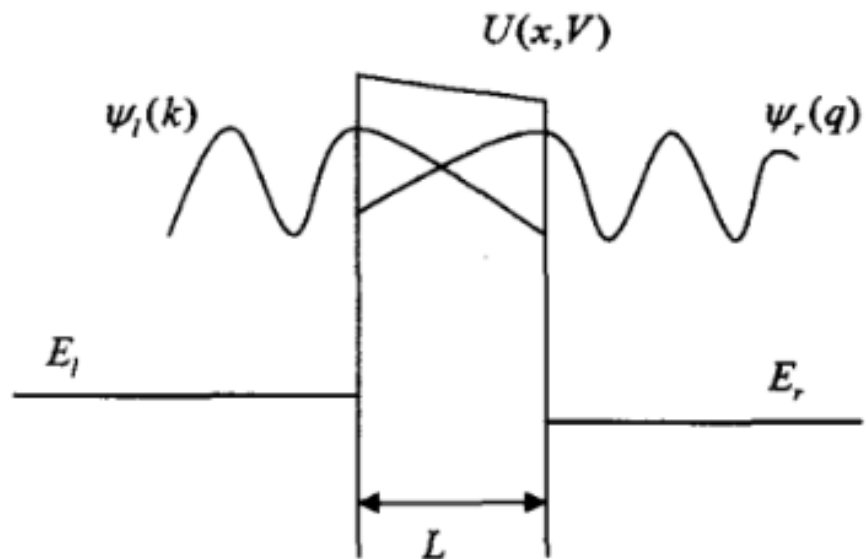
隧穿效应是基本的量子现象之一，  
即当粒子总能量小于势垒的高度时，该粒子仍能穿透这个势垒，其穿透几率对势垒的高度和宽度非常灵敏。这就为我们提供了许多能有效地探测固体表面或体内性质的手段。

扫描隧道显微镜（STM）是一种利用量子隧穿效应的，能在原子尺度上对固体表面直接成象，并可同时给出其电子结构信息的仪器。



扫描隧道显微镜的结构可以简化为右图。这样整个问题可以用转移哈密顿法处理。

这种方法的思想是把粒子隧穿前后的两个区域看成是被势垒分开的接近独立的两个部分，但是这两个部分存在着弱耦合相互作用。这种弱耦合作用可以通过微扰哈密顿算符 $H^T$ 来描述。



转移哈密顿法成功实施有如下几点至关重要：

1. 在微扰作用下，整个体系的粒子波函数可以写成

$$\Psi(x, t) = a(t) \Phi_l(x) \exp(-iE_l t/\hbar) + b(t) \Phi_r(x) \exp(-iE_r t/\hbar);$$

2. 整个系统的哈密顿量可以写成  $H = H_0 + H^T$ ， $H_0$  是不存在弱耦合相互作用时整个体系的哈密顿量，其与波函数的乘积可以写成：

$$H_0 \Psi(x, t) = E_l a(t) \Phi_l(x) \exp(-iE_l t/\hbar) + E_r b(t) \Phi_r(x) \exp(-iE_r t/\hbar);$$

3. 粒子隧穿的概率通常很小，可以认为在隧穿过程中  $a(t)$  近似为常数，不妨取为1， $b(t)$  是一个相比于  $a(t)$  非常小的函数，可以近似认为是0；

4. 在上条假设下， $a(t)$  的导数为0，但  $b(t)$  的导数不为0。

在上述几点的基础上，我们会得到单位时间内的隧穿概率，并且这一结果与费米黄金定则给出的结果一致

$$W = \frac{P |R_r|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{lr}^T|^2 \rho_r(E_l)$$

STM工作原理的几条关键方程:

$$I(V) = \frac{4\pi e}{\hbar} \sum_{mn} |M_{1m,2n}|^2 \{f(\epsilon_{1m})[1 - f(\epsilon_{2n})] - [1 - f(\epsilon_{1m})]f(\epsilon_{2n})\} \cdot \delta(\epsilon_{1m} - \epsilon_{2n} + eV)$$

$$I(V) = \frac{4\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon |M(\epsilon)|^2 [f(\epsilon) - f(\epsilon + eV)] \rho_1(\epsilon) \rho_2(\epsilon + eV)$$

$$I = \frac{4\pi e^2}{\hbar} V \sum_{mn} |M_{1msn}|^2 \delta(\epsilon_{1m} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{sn} - \epsilon_F)$$

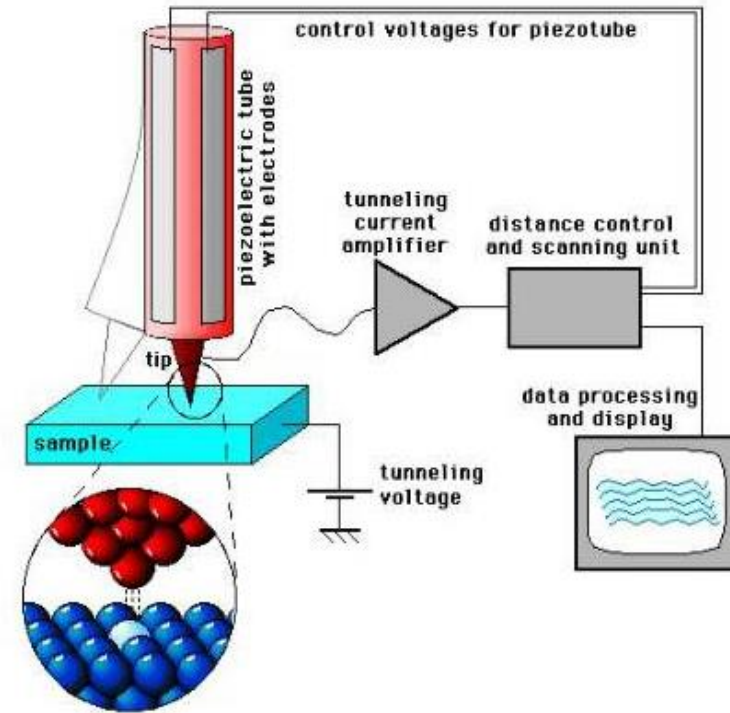
$$\sigma = dI/dV \approx 0.1 R^2 e^{2kR} \rho(\mathbf{r}_t, \epsilon_F)$$

$$\rho(\mathbf{r}, \epsilon) = \sum_n |\phi_{in}(\mathbf{r})|^2 \delta(\epsilon_{in} - \epsilon_F)$$

隧道电流反映了针尖所在样品位置的费米能级处的表面局域态密度图像，它包含了表面原子的几何和电子结构信息。

## CITS技术

由于电流对针尖与样品之间的距离非常灵敏，因而在采集隧道谱数据时，必须保持针尖与样品之间的距离不变。因此在获得样品表面形貌的过程中，在每一个隧道谱考察位置，保持针尖位置不变，测量该位置的 $dI/dV$ 与 $V$ 的关系，然后继续固定电压做恒流扫描。此种操作称为CITS技术。



# Part2 隧道器件



# 简单回顾半导体电子论

- 能带论：研究固体中的电子状态的理论基础

- 两个基本假设：玻恩-奥本海默绝热近似，Hartree - Fock平均场近似。

- Bloch定理：当势场具有晶格周期性时，电子态波动方程的解具有形式：

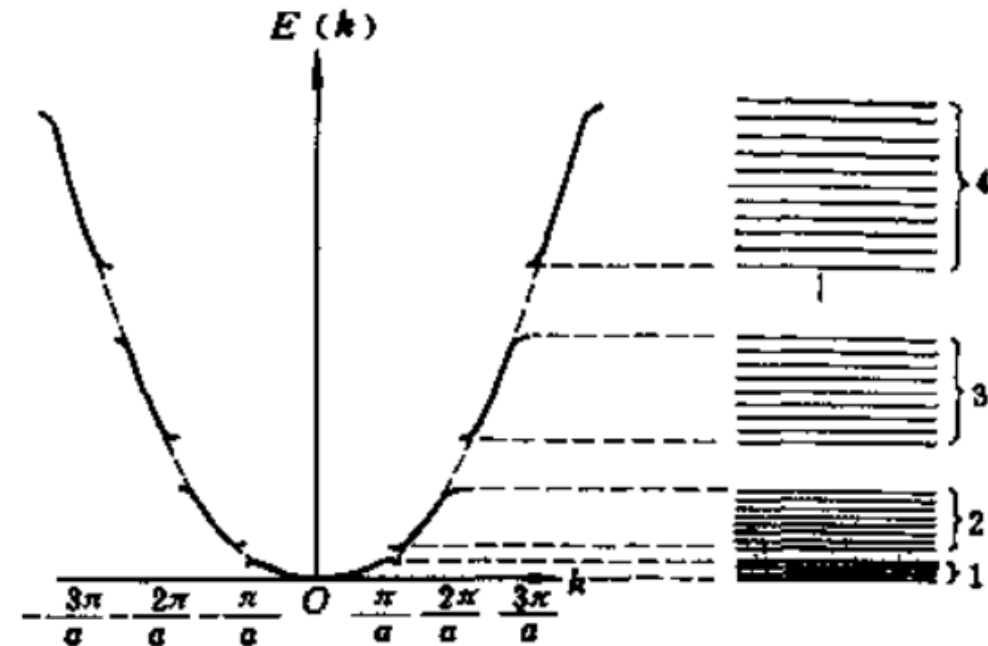
$$\phi(r) = e^{ik \cdot r} u(r) \quad u(r + R_n) = u(r)$$

- 电子的E-k关系：

近自由电子近似（抛物线色散关系）

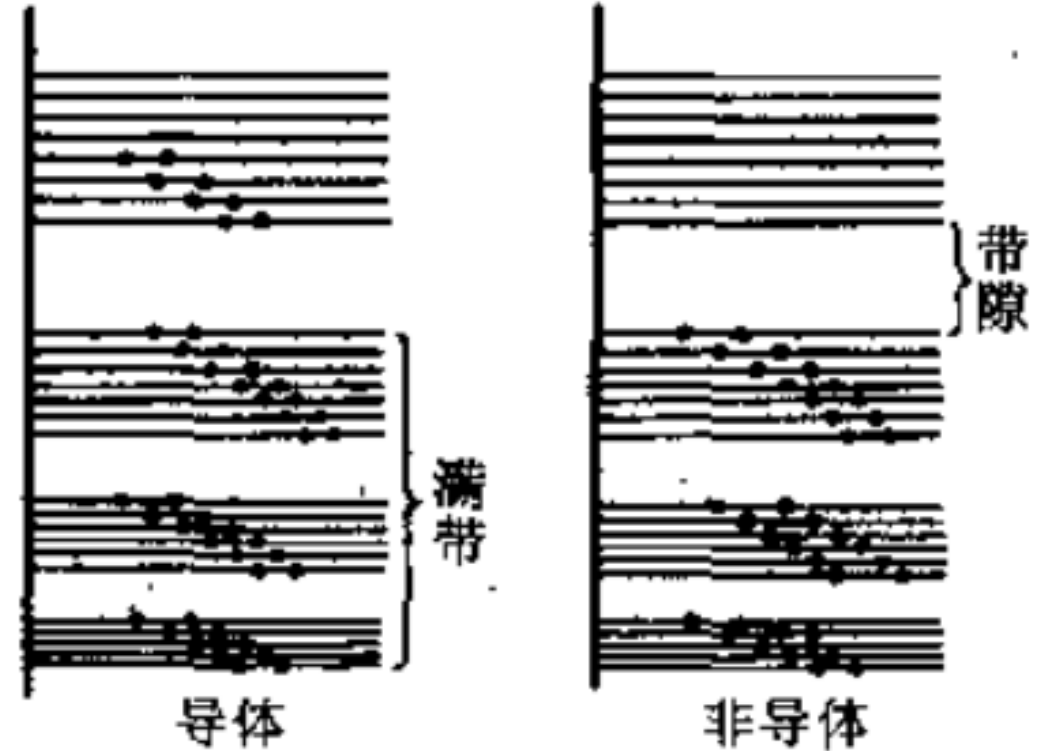
+周期势微扰（出现带隙）

+周期性边界条件（k取值离散化/准连续）



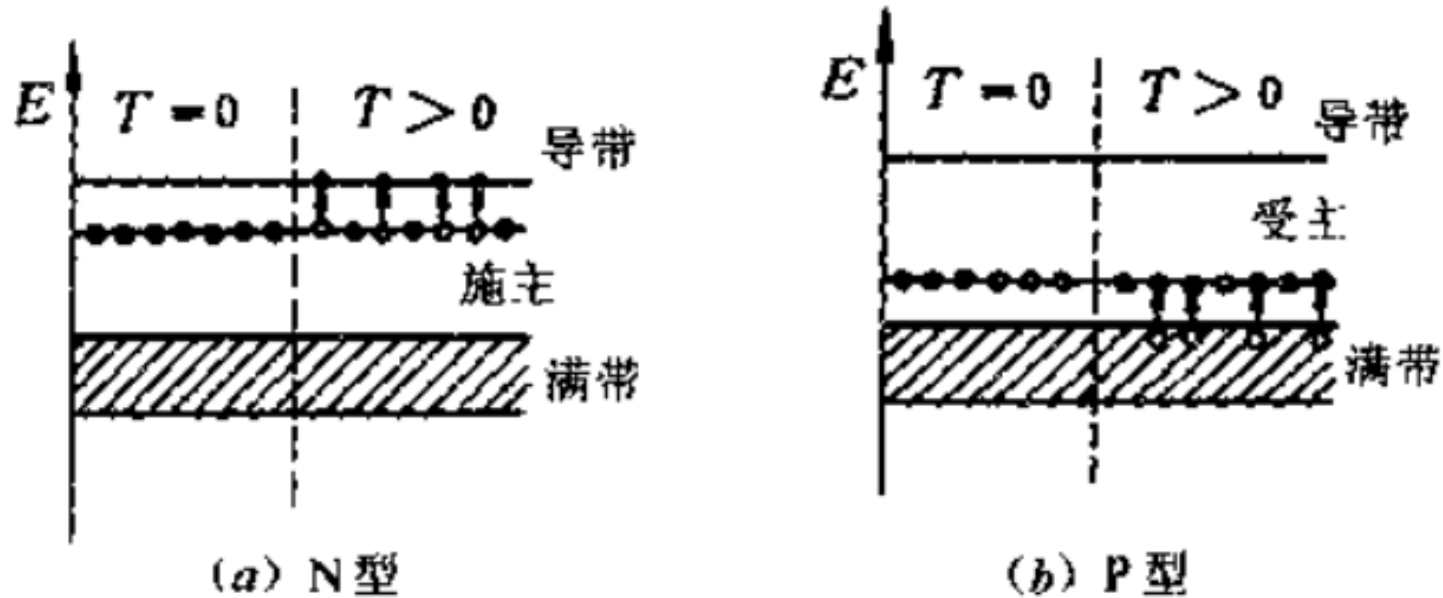
# 简单回顾半导体电子论

- 导体和绝缘体
- 半导体：带隙 $E_g < 2.5\text{eV}$ 。在一般温度下，导带底有少量电子，价带顶有少量空穴（本征激发），组成半导体的载流子。



# 简单回顾半导体电子论

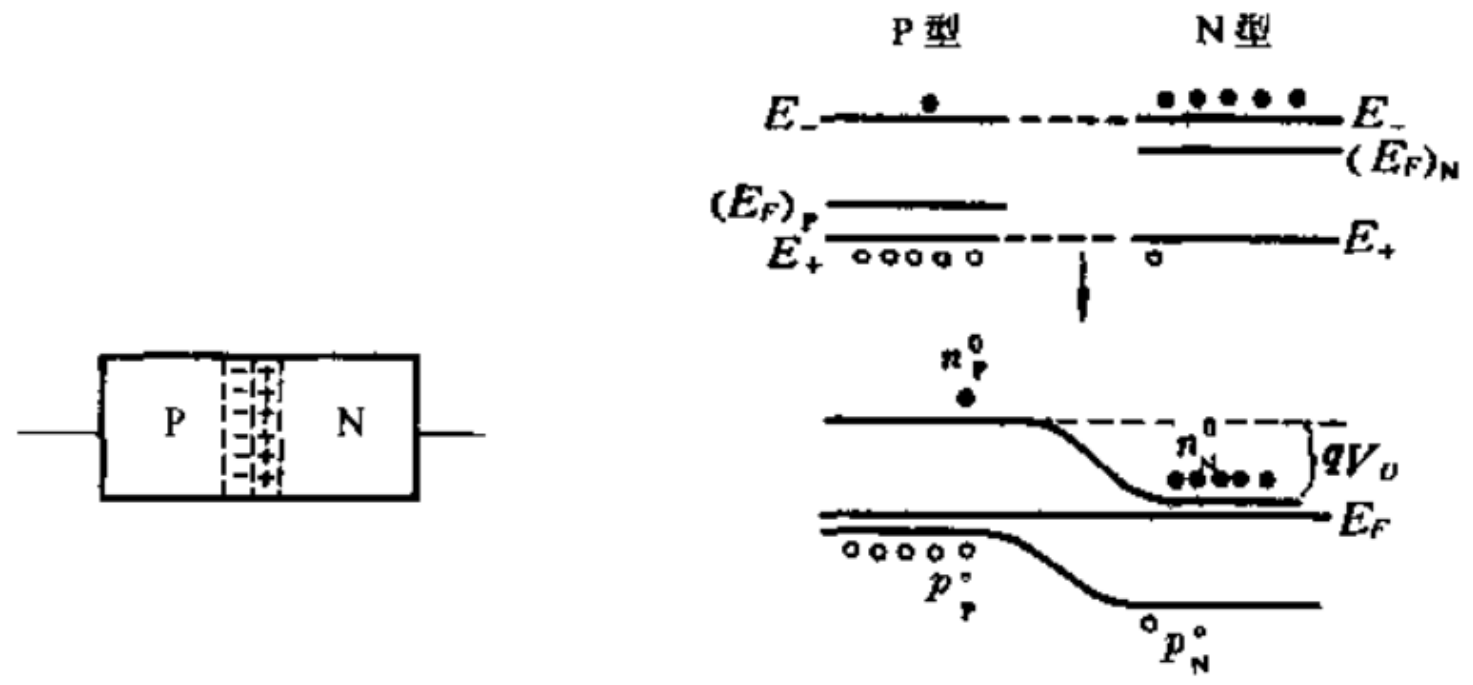
- 半导体中的杂质：提供禁带内的束缚能级



- 对于N型半导体，在杂质激发的范围内，电子的浓度远大于空穴，因此 $E_F$ 应在带隙的上半部，接近导带；而在P型半导体中，空穴浓度远多于电子， $E_F$ 应在带隙下半部，接近于价带。

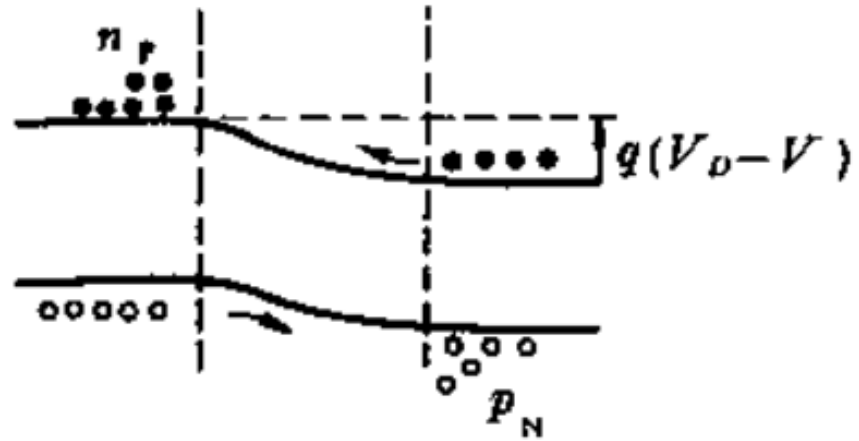
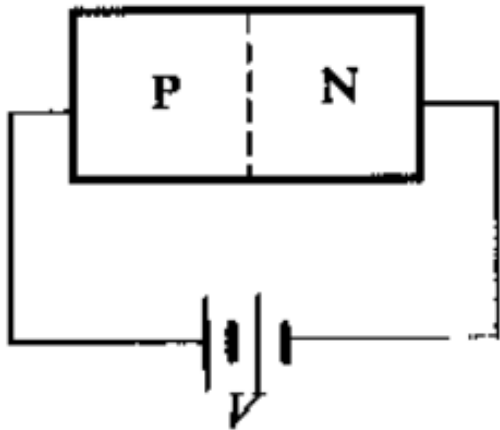
# 简单回顾半导体电子论

- PN结



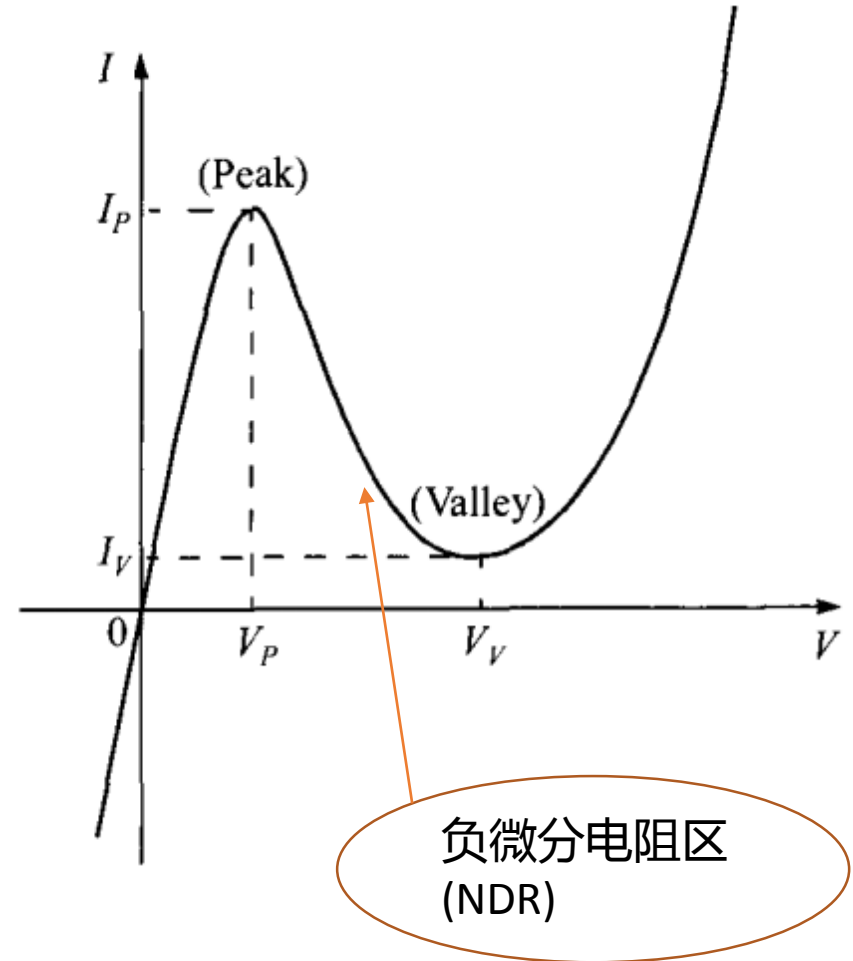
# 简单回顾半导体电子论

- PN结的单向导电性



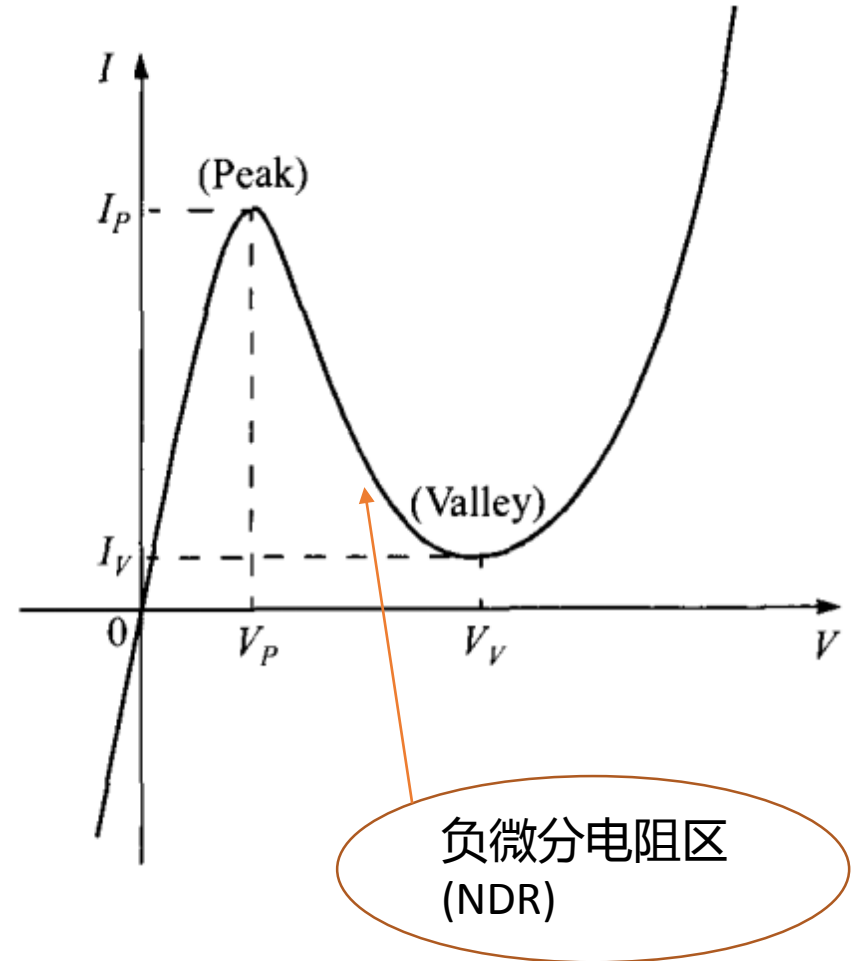
# 隧道二极管/江崎二极管 (Tunnel diode, TD)

- 1958年，Esaki在研究应用于高速双极晶体管的重掺杂锗PN结（高速双极晶体管中要求**基区窄且重掺杂**）时，江崎发现了反常的电流-电压特性。他用量子隧穿概念解释了这种反常特性，并在隧道理论和实验结果之间取得了相当好的一致性。
- 1960年，GaAs和InSb
- 1961年，Si和InAs
- 1962年，GaSb和InP

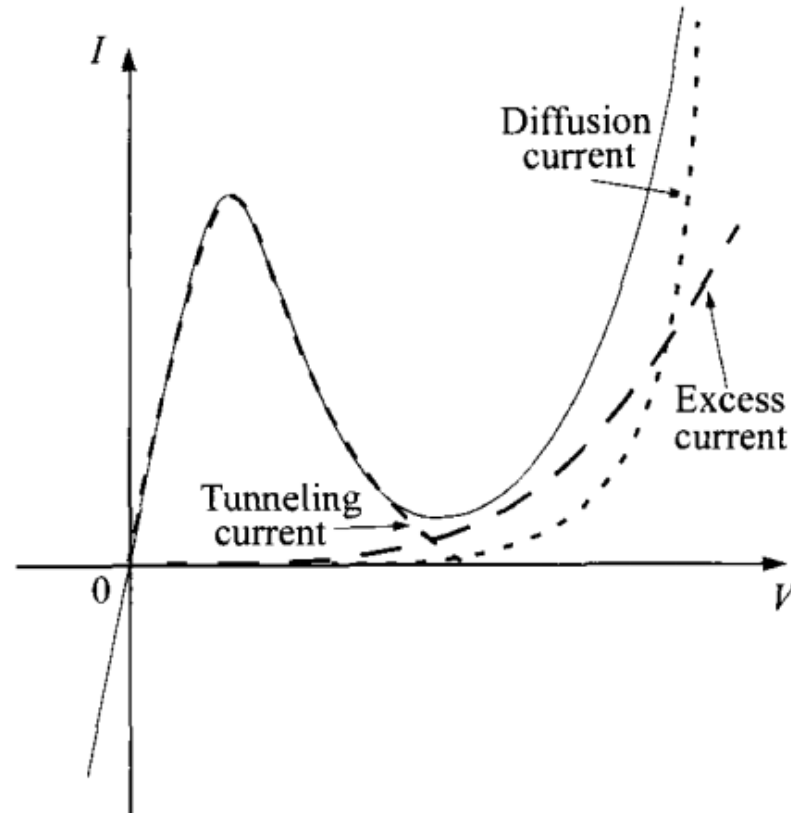
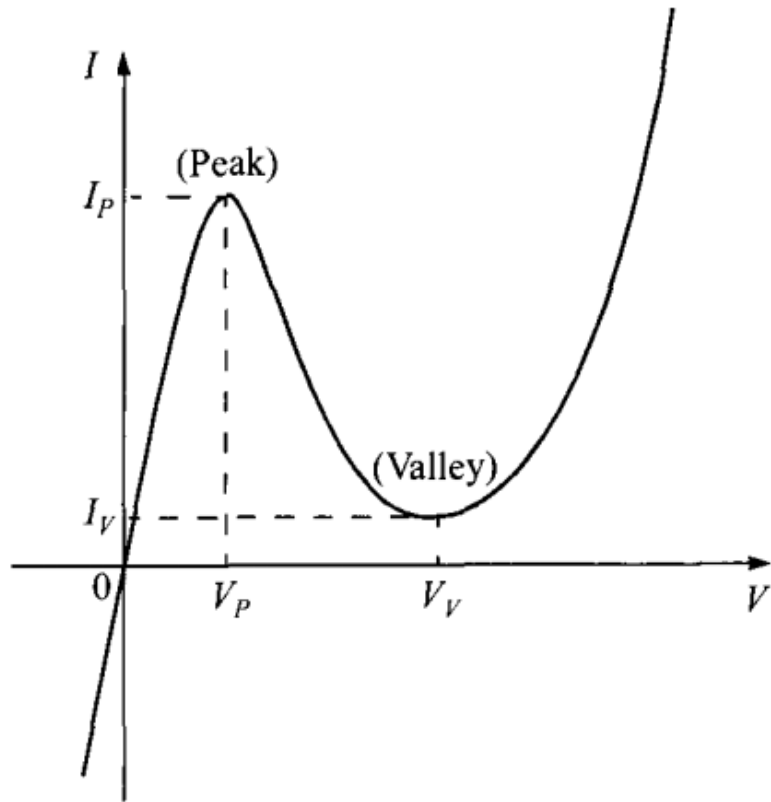


# 隧道二极管/江崎二极管 (Tunnel diode, TD)

- TD的工作原理是量子力学中的隧穿效应，载流子穿过势垒的隧穿时间不受常规渡越时间 ( $t = W/v$ ) 的支配，所以隧道二极管开关速度达皮秒量级，工作频率高达100GHz。可用于超高速开关逻辑电路、触发器和存储电路等。
- 隧道二极管还具有低功耗和低噪声等特点。隧道二极管可用于微波混频、检波、低噪声放大、振荡等。



# 隧道二极管 (TD)

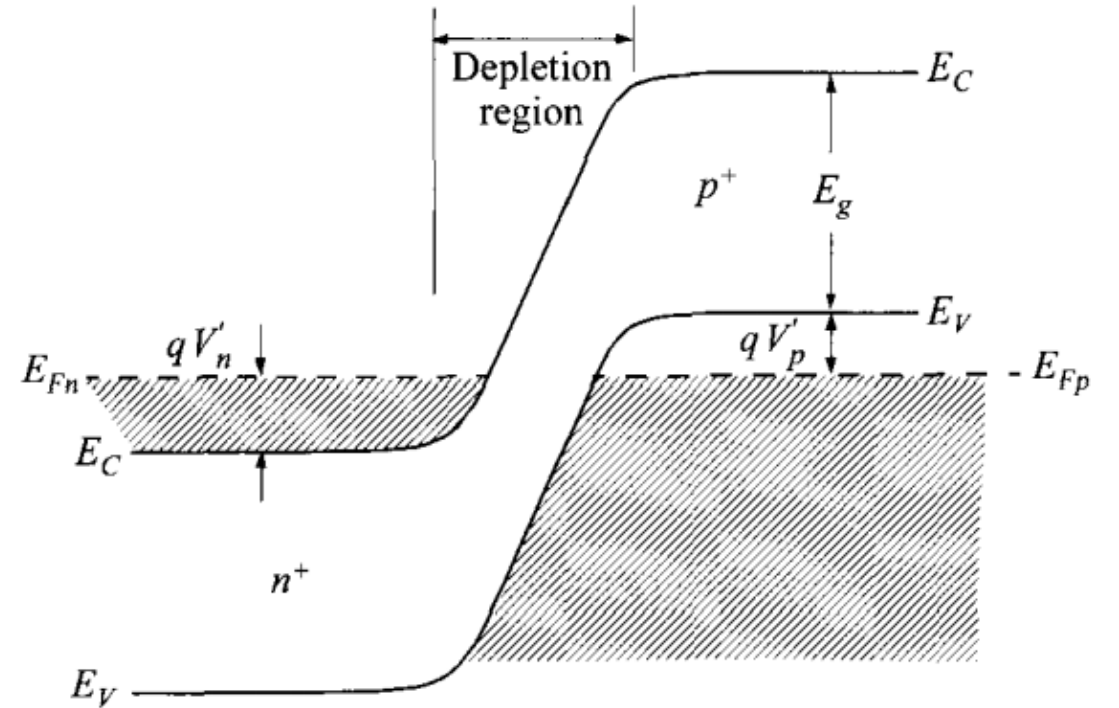


三个电流分量：带间隧穿电流、过剩电流和扩散电流。

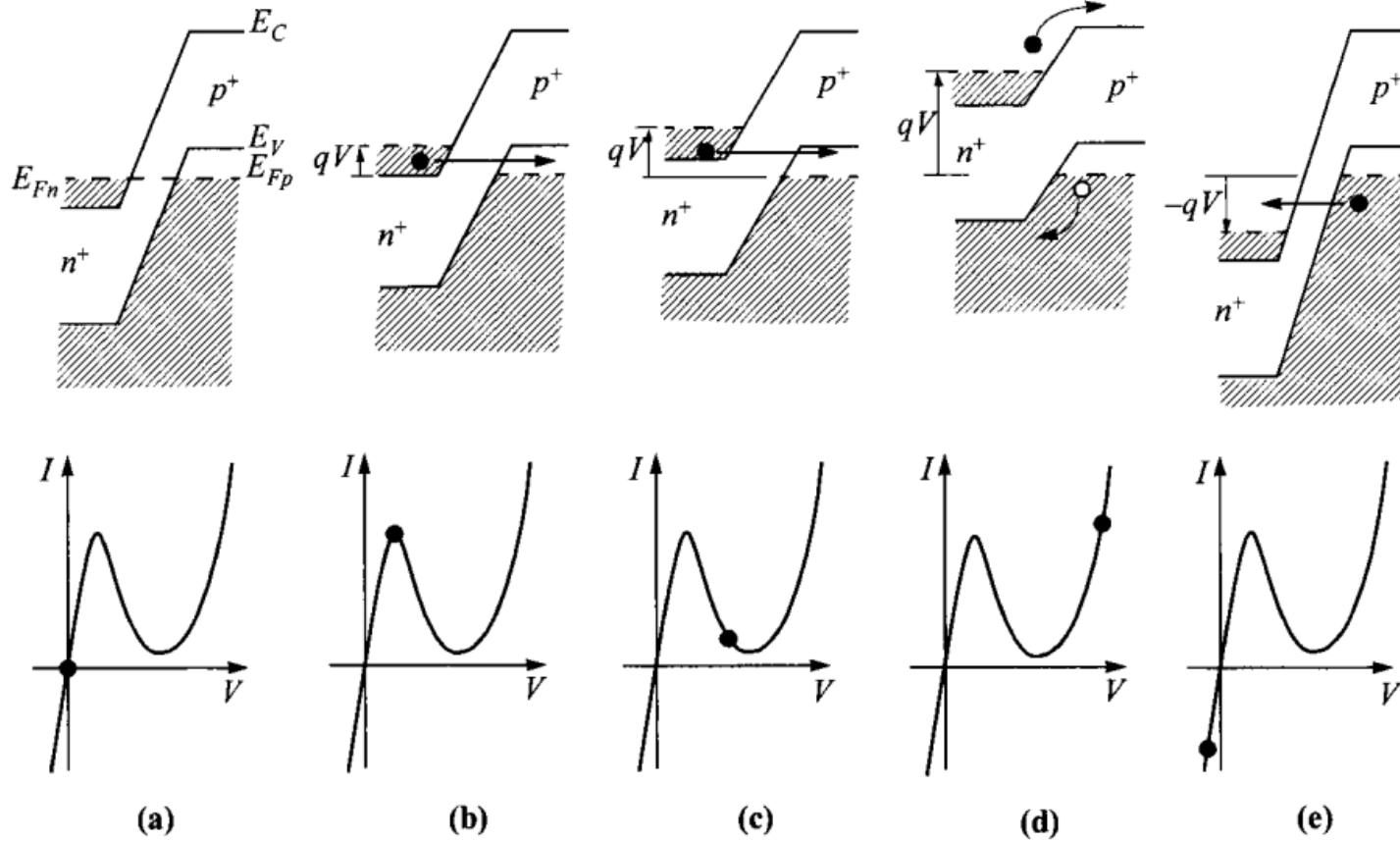


# 隧道二极管 (TD)

- 隧道二极管由P和N两侧皆为重掺杂且过渡区陡峭的PN结构成。
- 典型参数：
  - 兼并量  $qV'_n, qV'_p$ : 几个  $kT$  (0.02-0.03eV)
  - 耗尽层宽度  $< 10\text{nm}$
  - $E_g$ : 0.66eV(Ge), 1.424eV(GaAs)

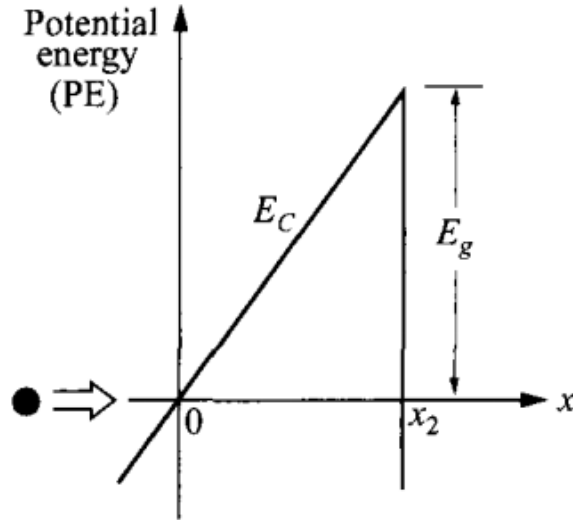
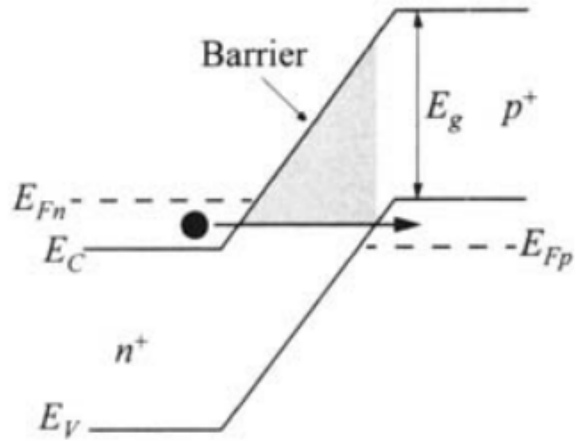


# 隧道二极管 (TD)



- 隧穿的必要条件是：
  - 电子隧穿的一侧存在被占据的能态；
  - 在另一侧，能量与电子隧穿一侧相同的能级未数据；
  - 隧道势垒高度足够低，势垒宽度足够窄，具有一定的隧穿几率；
  - 在隧穿过程中动量守恒

# 隧道二极管 (TD)



- 用WKB近似求三角形势垒的隧穿概率：

$$T_t \approx \exp \left[ -2 \int_0^{x_2} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left( E_g \frac{x}{x_2} \right)} dx \right]$$

$$T_t \approx \exp \left( -\frac{4\sqrt{2m^*} E_g^{1/2} x_2}{3\hbar} \right)$$

- 然后可求得隧穿电流：

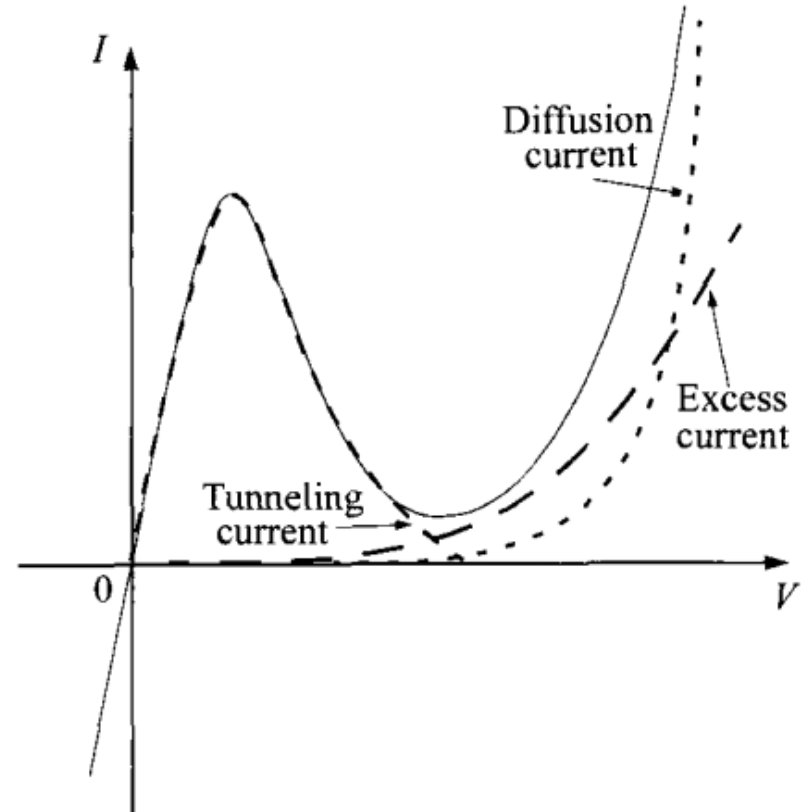
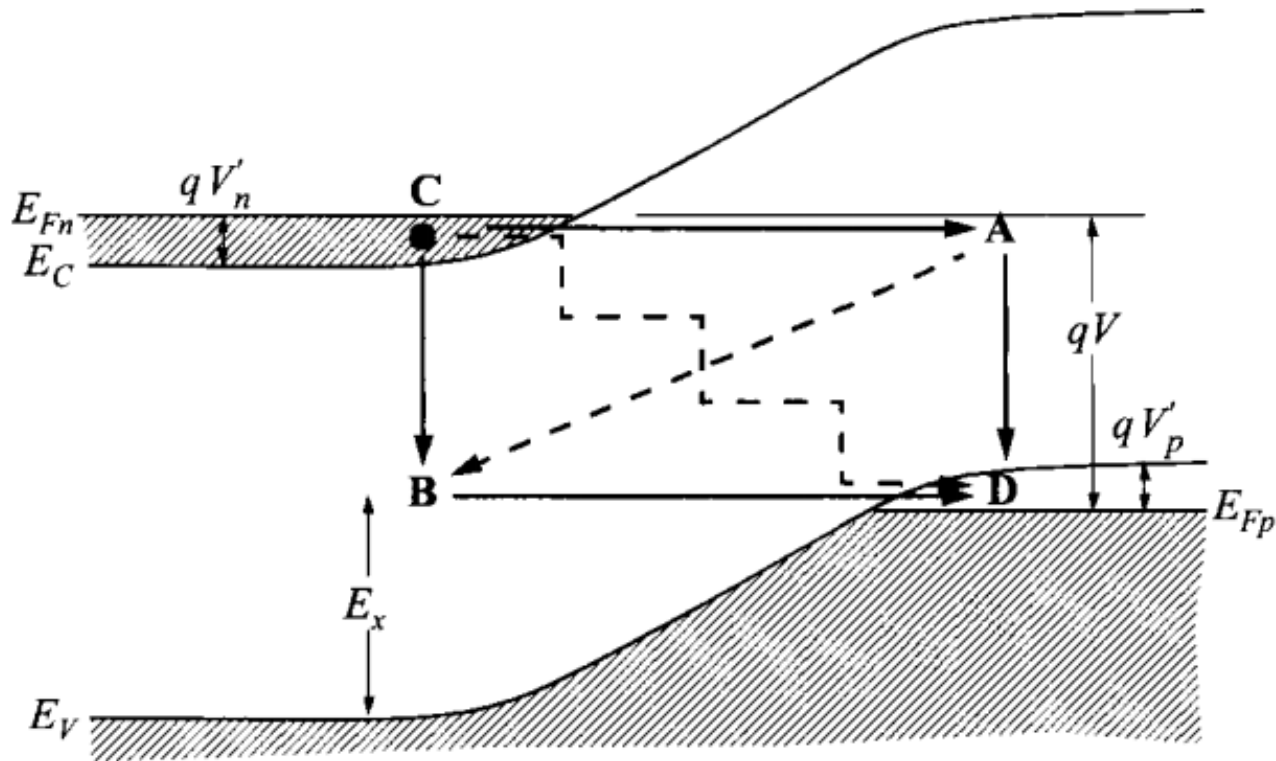
$$I_{C \rightarrow V} = C_1 \int F_C(E) N_c(E) T_t [1 - F_V(E)] N_v(E) dE$$

$$I_{V \rightarrow C} = C_1 \int F_V(E) N_v(E) T_t [1 - F_C(E)] N_c(E) dE$$

$$I_t = I_{C \rightarrow V} - I_{V \rightarrow C} = C_1 \int_{E_{Cn}}^{E_{Vp}} [F_C(E) - F_V(E)] T_t N_c(E) N_v(E) dE$$

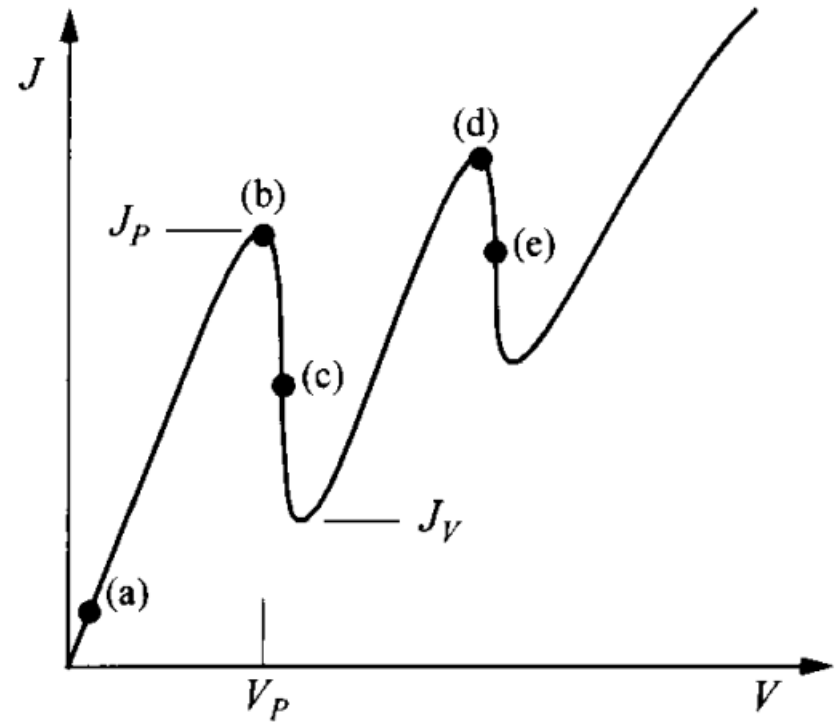
# 隧道二极管 (TD)

- 过剩电流：通过禁带内能级协助隧穿。

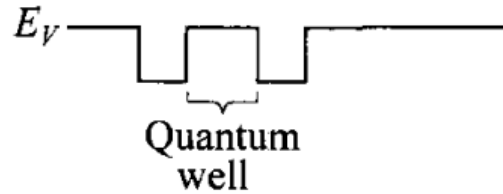
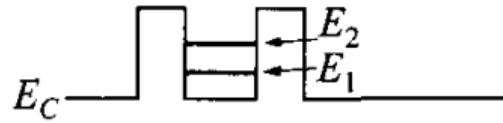
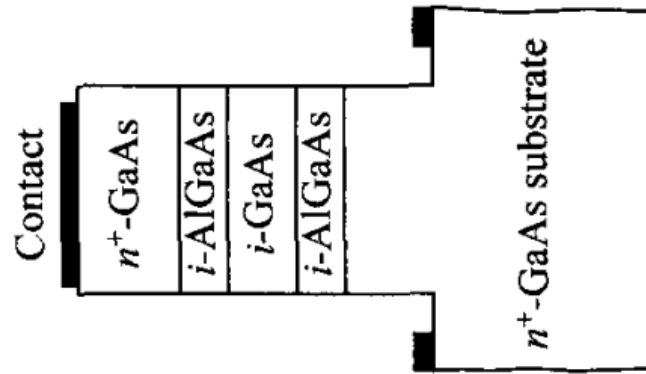


# 共振隧穿二极管 (resonant-tunneling diode, RTD)

- 1973年，Tsu和Esaki预言了RTD的NDR区。
- 19世纪80年代早期，演示了RTD的特性并不断改进。(MEB, MOCVD技术)
- 1986年，在室温下观察到RTD的NDR区。

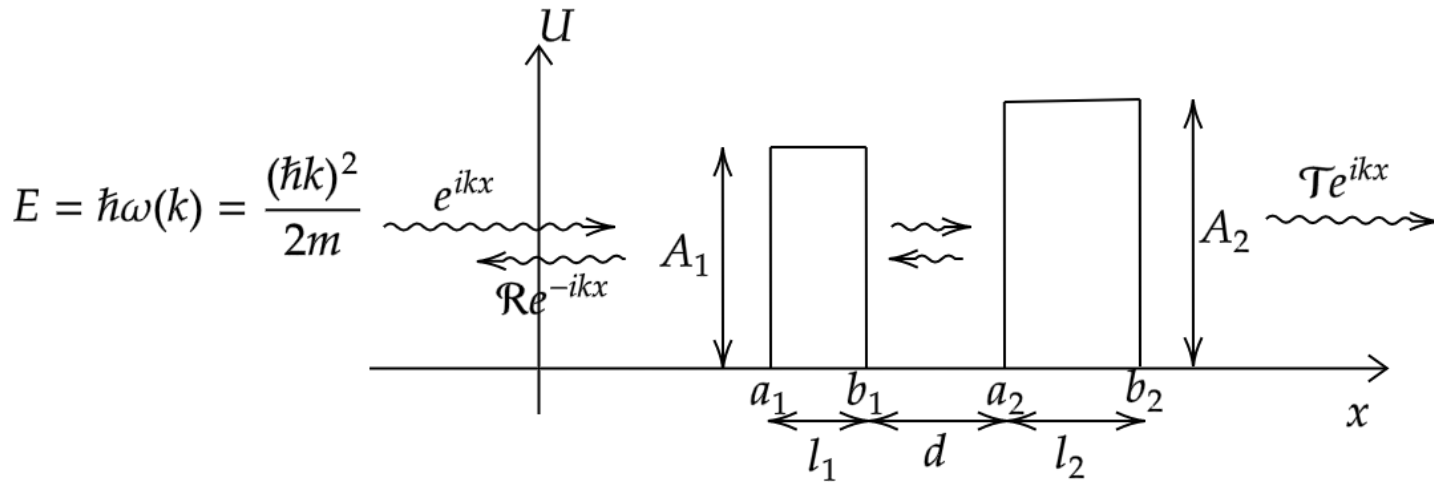


# 共振隧穿二极管 (RTD)



- 典型厚度：量子阱 $\sim 5\text{nm}$ ，势垒层 $\sim 1.5\text{-}5\text{nm}$ 。
- 典型势垒高度： $0.2\text{-}0.5\text{eV}$ 。

# Double-Barrier Potential



## • 方法一：解薛定谔方程

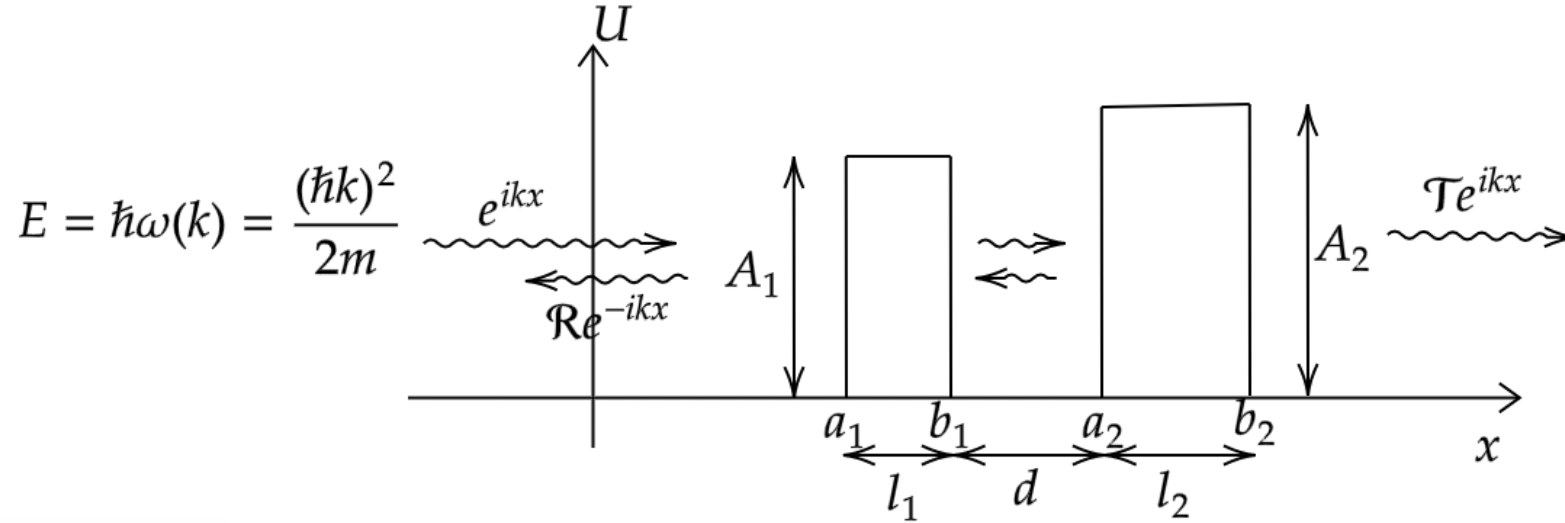
$$\Psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega(k)t}$$

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \mathcal{R}e^{-ikx}, & x < a_1 \\ c_1 e^{\beta_1 x} + d_1 e^{-\beta_1 x}, & a_1 < x < b_1 \\ \alpha e^{ikx} + \gamma e^{-ikx}, & b_1 < x < a_2 \\ c_2 e^{\beta_2 x} + d_2 e^{-\beta_2 x}, & a_2 < x < b_2 \\ \mathcal{T}e^{ikx}, & x > b_2 \end{cases}$$

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \beta_i \equiv \frac{\sqrt{2m(A_i - E)}}{\hbar}$$

$$\begin{aligned} & \phi(a_i - 0) = \phi(a_i + 0), \phi(b_i - 0) = \phi(b_i + 0) \\ & \left. \frac{d\phi(x)}{dx} \right|_{x=a_i-0} = \left. \frac{d\phi(x)}{dx} \right|_{x=a_i+0}, \left. \frac{d\phi(x)}{dx} \right|_{x=a_i-0} = \left. \frac{d\phi(x)}{dx} \right|_{x=a_i+0}, \quad (i = 1, 2) \end{aligned}$$

# Double-Barrier Potential



$$\mathcal{T} = \frac{e^{-ik(d+l_1+l_2)}}{\mathcal{F}[k; \beta_1, \beta_2; d; l_1, l_2]}$$

$$\mathcal{F}[k; \beta_1, \beta_2; d; l_1, l_2] = e^{ikd} [M_1 \sinh(\beta_1 l_1)] [M_2 \sinh(\beta_2 l_2)] + e^{-ikd} [\cosh(\beta_1 l_1) + iK_1 \sinh(\beta_1 l_1)] [\cosh(\beta_2 l_2) + iK_2 \sinh(\beta_2 l_2)],$$

$$M_i \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\beta_i}{k} + \frac{k}{\beta_i} \right), \quad K_i \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\beta_i}{k} - \frac{k}{\beta_i} \right); \quad (i = 1, 2).$$



# Double-Barrier Potential

- 方法二：类比Fabry-Perot腔
  - 两个势垒 $\longleftrightarrow$ FP腔的两块玻璃板
  - 物质波 $\longleftrightarrow$ 光波
- 单势垒的透射、反射概率幅：

$$\mathcal{T}_i = \frac{e^{-ikl}}{iK_i \sinh(\beta_i l) + \cosh(\beta_i l)} \quad \mathcal{R}_i = \frac{-iM_i \sinh(\beta_i l)}{iK_i \sinh(\beta_i l) + \cosh(\beta_i l)}$$

$$\mathcal{T}_i = T_i e^{i\phi_{ti}}, \quad \mathcal{R}_i = R_i e^{i\phi_{ri}}$$

$$T_i = \frac{1}{[1 + M_i^2 \sinh^2(\beta_i l_i)]^{1/2}} \quad \phi_{ti} = -kl_i - \phi_i$$

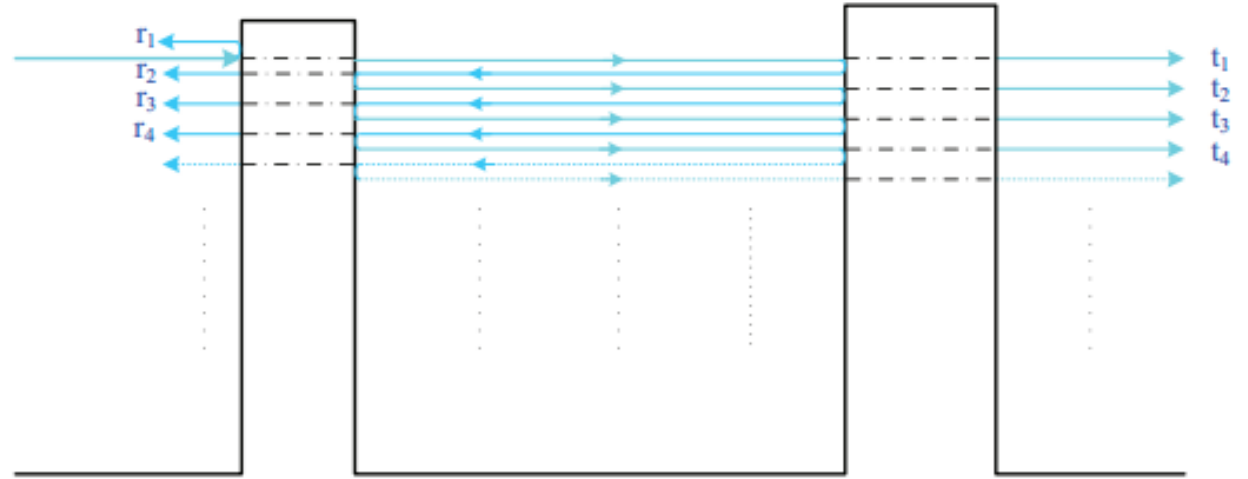
$$R_i = \frac{M_i \sinh(\beta_i l_i)}{[1 + M_i^2 \sinh^2(\beta_i l_i)]^{1/2}} \quad \phi_{ri} = -\pi/2 - \phi_i$$

$(i = 1, 2)$

$$M_i \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\beta_i}{k} + \frac{k}{\beta_i} \right), \quad K_i \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\beta_i}{k} - \frac{k}{\beta_i} \right)$$
$$\phi_i \equiv \arctan[K_i \tanh(\beta_i l_i)]$$

# Double-Barrier Potential

- 多物质波干涉



$$\begin{aligned}
 \mathcal{T} e^{ik(d+l_1+l_2)} &= T_1 T_2 \exp[i(\phi_{t1} + \phi_{t2}) + ik(d + l_1 + l_2)] \\
 &+ T_1 R_2 R_1 T_2 \exp[i(\phi_{t1} + \phi_{r1} + \phi_{r2} + \phi_{t2}) + ik(3d + l_1 + l_2)] \\
 &+ T_1 (R_2 R_1)^2 T_2 \exp\{i[\phi_{t1} + 2(\phi_{r1} + \phi_{r2}) + \phi_{t2}] + ik(5d + l_1 + l_2)\} + \dots \\
 &= T_1 T_2 \exp[i(\phi_{t1} + \phi_{t2}) + ik(d + l_1 + l_2)] \frac{1}{1 - R_1 R_2 \exp[i(\phi_{r1} + \phi_{r2} + 2kd)]}
 \end{aligned}$$

$$\mathcal{T} = \frac{e^{-ik(d+l_1+l_2)}}{\mathcal{F}[k; \beta_1, \beta_2; d; l_1, l_2]}$$

# Double-Barrier Potential

- 透射概率幅：
$$\mathcal{T} = \frac{e^{-ik(d+l_1+l_2)}}{\mathcal{F}[k;\beta_1,\beta_2;d;l_1,l_2]}$$

- 透射概率：

$$t = |\mathcal{T}|^2 = \left| \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2 \exp[i(\phi_{r1} + \phi_{r2} + 2kd)]} \right|^2 = \left( \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \right)^2 \frac{1}{1 + \frac{4R_1 R_2}{(1 - R_1 R_2)^2} \sin^2 \left[ kd + \frac{1}{2}(\phi_{r1} + \phi_{r2}) \right]}$$

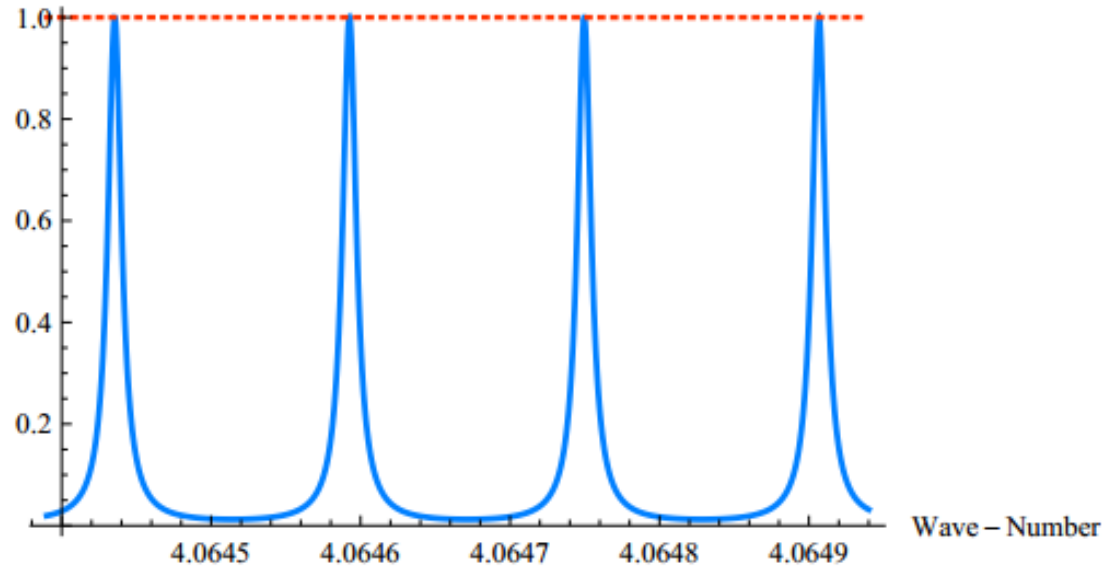
- 当  $kd + \frac{1}{2}(\phi_{r1} + \phi_{r2}) = m\pi, m \in \mathcal{Z}$ . 透射概率达到极大值  $t_{max} = \left( \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \right)^2$

- 对称双势垒： $T_1 = T_2, R_1 = R_2$ . 于是  $t_{max} = 1$ .

- 当  $kd + \frac{1}{2}(\phi_{r1} + \phi_{r2}) = (m + \frac{1}{2})\pi, m \in \mathcal{Z}$  透射概率达到极小值  $t_{min} = \left( \frac{T_1 T_2}{1 + R_1 R_2} \right)^2$

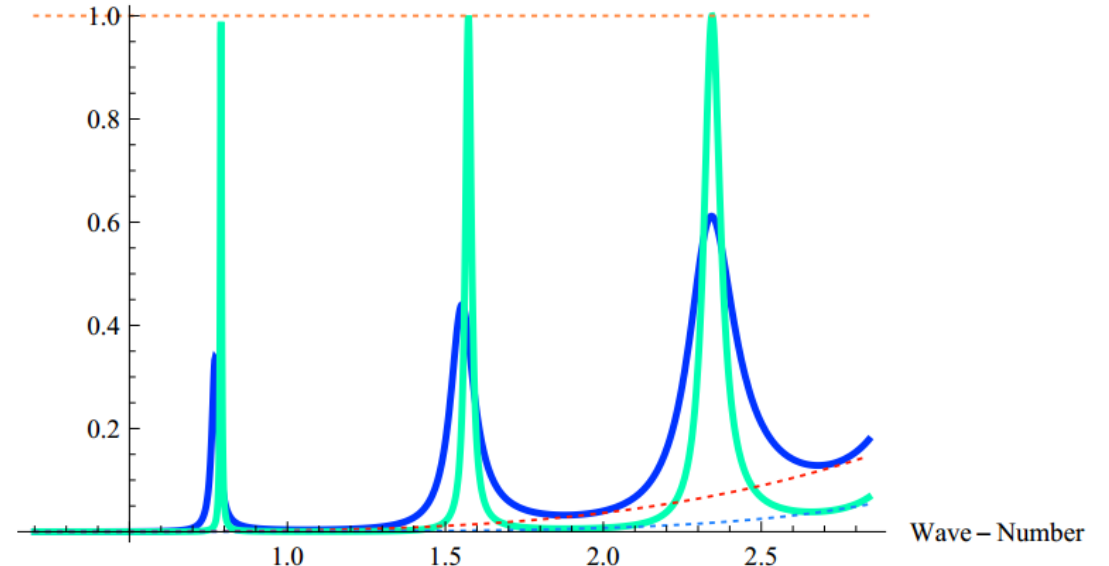
# Double-Barrier Potential

Transmission - Rate



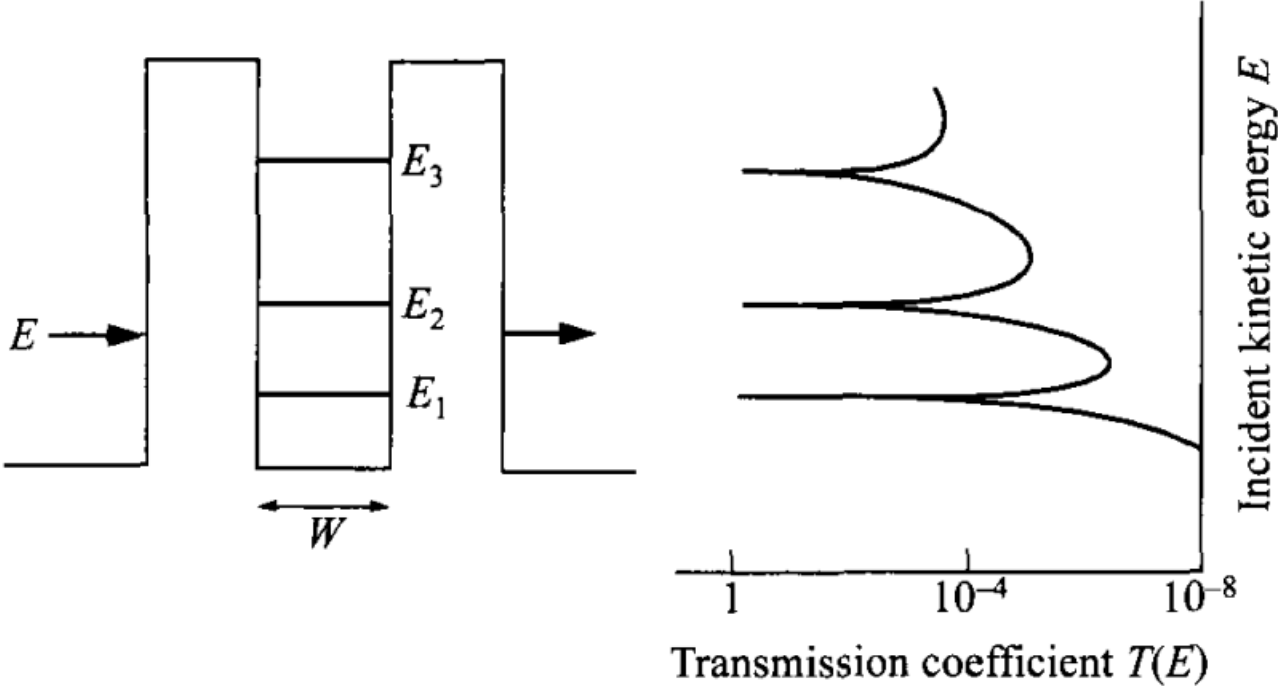
Transmission Spectrum for Optical FP Interferometer.  
 $R = 80\%$ ,  $d_o = 2\text{cm}$ , unit of  $k$ :  $10^6/\text{m}_o$ .

Probability

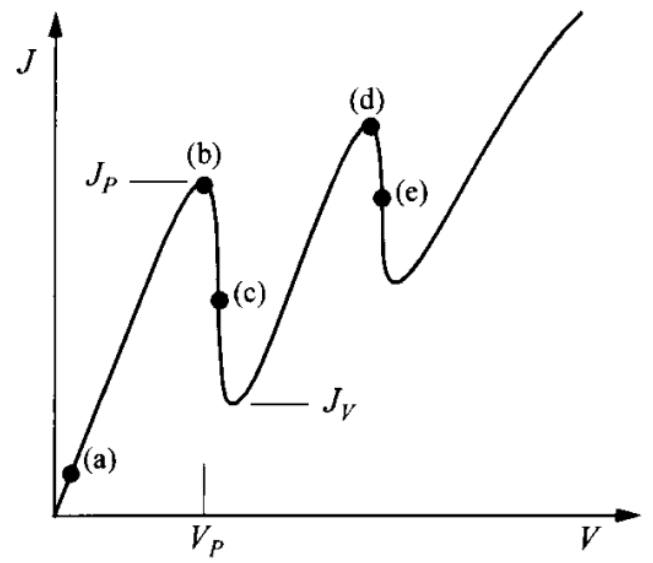
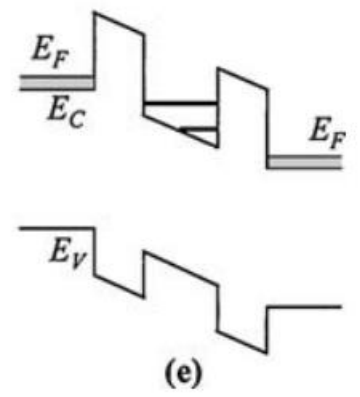
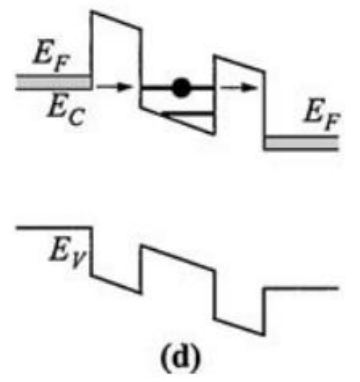
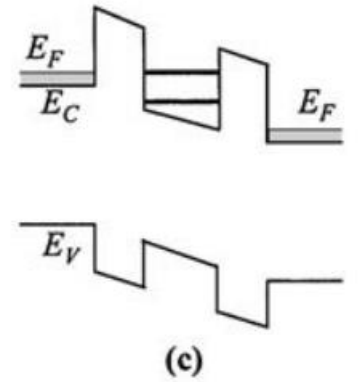
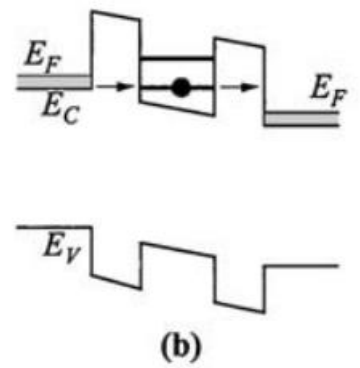
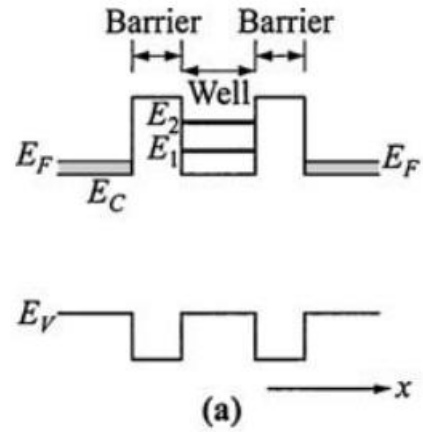


Transmission Spectrum for double barrier.  
 Green: symmetric double barriers:  $A = 10.36\text{eV}$ ,  $l = 1.2\text{\AA}$ ,  $d = 6.5\text{\AA}$ .  
 Blue:  $A_1 = 10.36\text{eV}$ ,  $l_1 = 1.2\text{\AA}$ ,  $A_2 = 9.6\text{eV}$ ,  $l_2 = 0.6\text{\AA}$ ,  $d = 6.5\text{\AA}$   
 wave number is plotted with unit  $k_e = \sqrt{2m_e E_s}/\hbar$  here  
 $E_s = 1\text{eV}$

# 共振隧穿二极管 (RTD)



# 共振隧穿二极管 (RTD)



# 参考文献

- 《固体物理学》 黄昆
- 《半导体器件物理》 施敏
- Zhi Xiao, Shi-sen Du, Chun-Xi Zhang, “Revisiting 1-Dimensional Double-Barrier Tunneling in Quantum Mechanics” arXiv:1210.0970 [quant-ph]