

- IBZ w supersieci

w (x,y) periodyczność sieci $V(x+a)=V(x)$

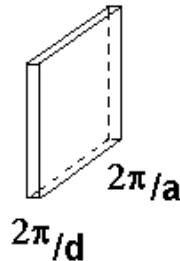
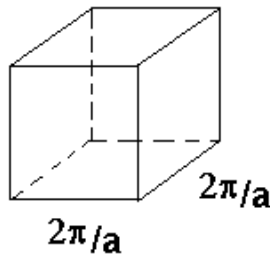
w kier. z periodyczność SL $V(z+d)=V(z)$

$$d \gg a$$

np. sieć prosta kubiczna

w litym kryształ 3D:

w supersieci



tzn. pasma będą bardzo wąskie, dla odpowiadającego kierunku k

struktura energetyczna
(metoda silnego wiązania)

z tw. Blocha (dla kier. z)

$$\chi_q(z) = e^{iqz} u_q(z), \quad u_q(z+d) = u_q(z)$$

w metodzie TB

$$\chi_q^{(i)}(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n^N e^{iqnd} \chi_q^{(i)}(z - nd)$$

dla i -tego stanu w izolowanej studni
narzucając warunki brzegowe Borna –von Karmana

$$\chi_q(z + Nd) = \chi_q(z)$$

$$qNd = 2m\pi \quad \Rightarrow \quad q = \frac{2\pi}{Nd}m$$

Hamiltonian

Możemy przedstawić jako:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum_n^N V(z - nd)$$

$$\langle \chi_q | H | \chi_q \rangle = E(q)$$

pozostawiając tylko oddziaływanie najbliższych sąsiadów i pamiętając, że

$$\left\langle \chi_q^{(i)}(z - nd) \left| \frac{p^2}{2m^*} + V(z - nd) \right| \chi_q^{(i)}(z - nd) \right\rangle = E_i$$

dostajemy:

(***)

$$E_i(q) = E_i + S_i + 2 \cdot t_i \cdot \cos(qd)$$

$q: 0 - 2\pi/d$

dla każdego „i” oraz „q” dodatkowo zachodzi (podpasma)

$$E_i(q, k_t) = E_i(q) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_t^2$$

z (***) mamy

$$qd = \arccos\left(\frac{E - E_i - S_i}{2t_i}\right)$$

mnożąc przez N mamy

$$qdN = N \arccos\left(\frac{E - E_i - S_i}{2t_i}\right)$$

ale $dN = L = 1/\Omega_0$, ale $= q/\Omega_0 = \rho$, gdyż q – numeruje kolejne stany

dotatkowo -

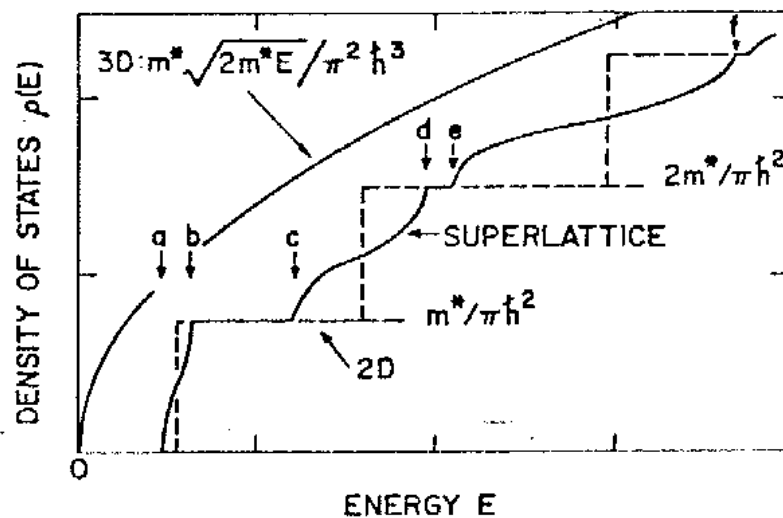
na dnie każdego minipasma, gęstość stanów = 0

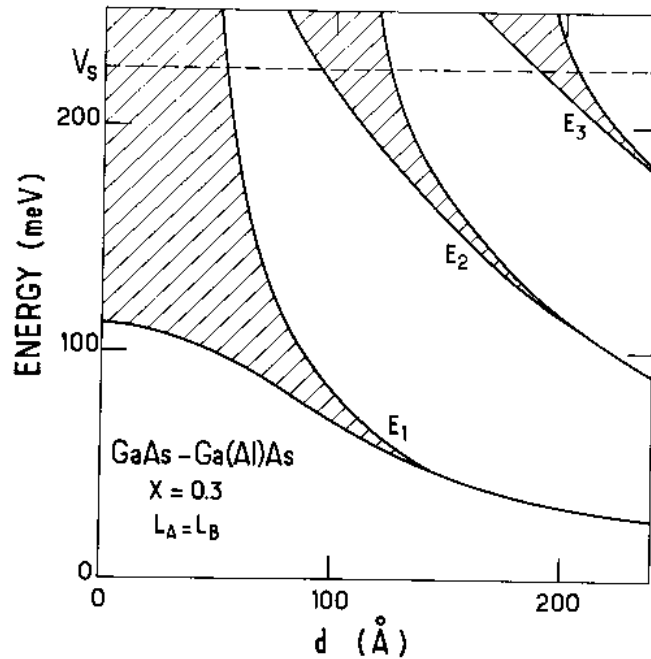
od szczytu każdego minipasma (i między minipasmami) gęstość jest stała =

$$\rho_{2D} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2}$$

zatem

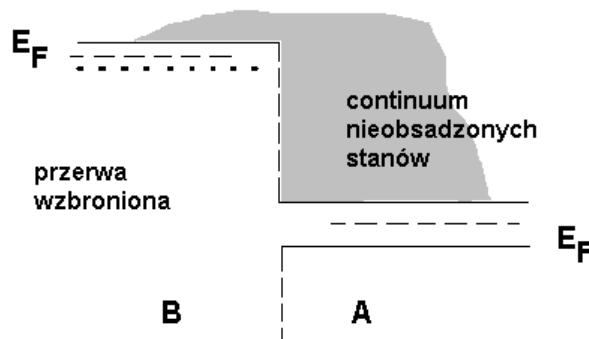
$$\rho_i(E) = N \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \arccos\left(\frac{E - E_i - S_i}{2t_i}\right)$$



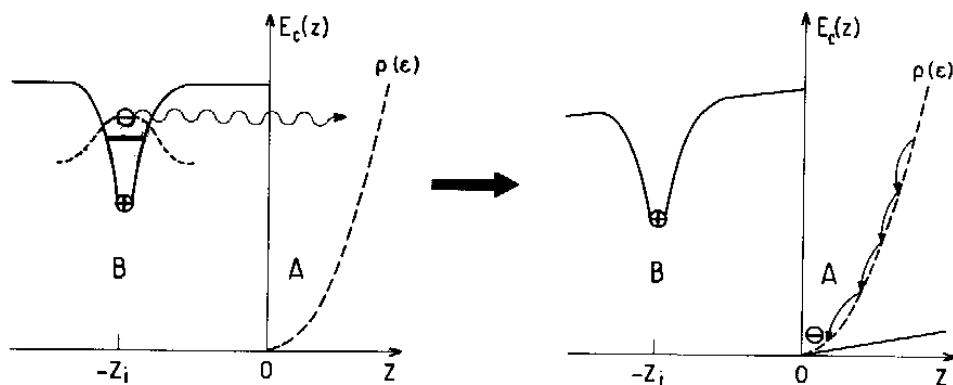


Heterozłącza i studnie domieszkowane w barierze (2-wymiarowy gaz elektronowy)

- Domieszki donorowe – jony sztywno związane w sieci elektrony kwazi-swobodne ($T > 0$) lub płytko związane ($T \approx 0$)
- Równowaga termodynamiczna wymaga wyrównania poziomu Fermiego (nawet w $T = 0$)



nawet w $T = 0$ dyfuzja elektronów do obszaru A



przepływ lub tunelowanie zachodzi tak długo, aż wyrówna się poziom Fermiego (określony w A i B przez obszary dalekie od złącza)

- w B pozostaje warstwa dodatnio naładowana zjonizowanych donorów (źródło bariery potencjału dla elektronów)
- w A kwaziswobodne elektrony gromadzą się w pobliżu złącza

pole dodatnio naładowanej warstwy (powierzchniowa gęstość ładunku σ)

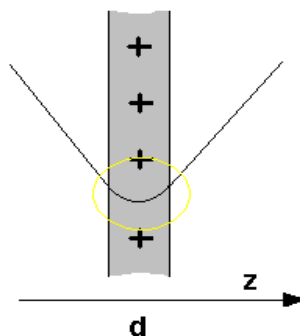
$$E = 2\pi\sigma$$

(zwrócone od płaszczyzny)

potencjał elektryczny w punkcie oddalonym o z od pow. Warstwy (energia potencjalna)

$$V = -\int_0^z E dz = -Ez = (\text{dla } e^-) = Ez$$

dla jednorodnie naładowanej warstwy o grubości „d”
zależność wewnątrz warstwy jest kwadratowa

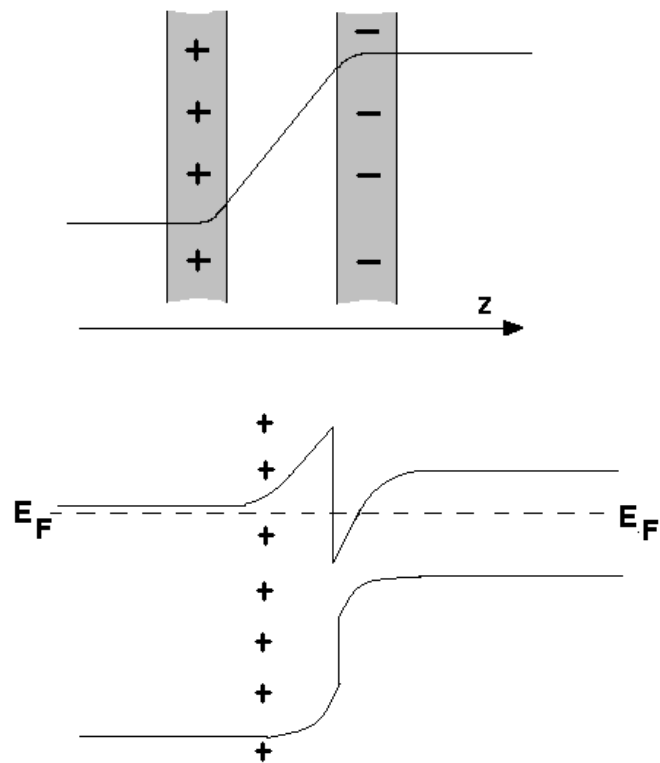


dwie naładowane powierzchnie

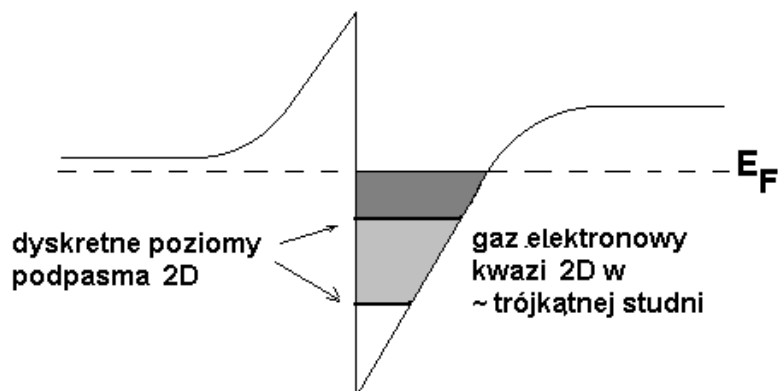
dno pasma stanowi potencjał $= 0$ dla kwaziswobodnych elektronów o energiach bliskich E_g (licząc zero energii w szczycie pasma walencyjnego)

- offset brzegów pasm jest wielkością charakterystyczną dla pary materiałów

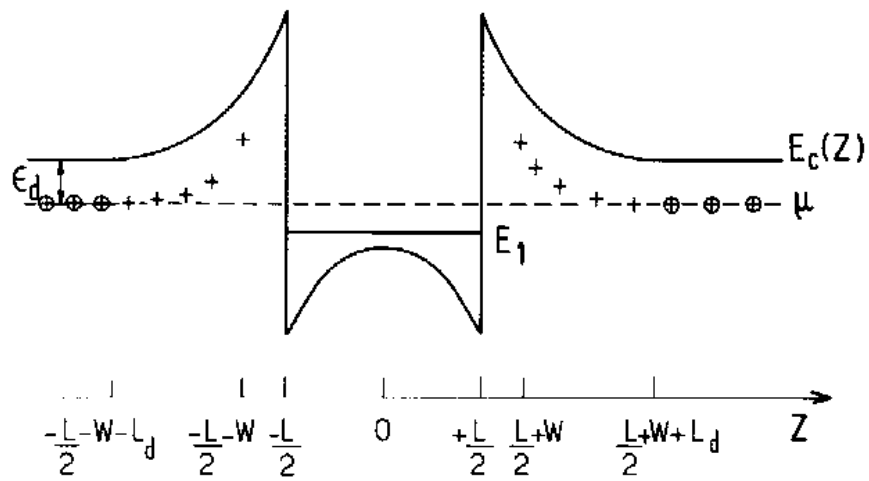
pole elektryczne pochodzące od rozwarstwowanego ładunku (różnica potencjałów) wbudowuje się w obszar złącza



powstaje skok potencjału (na poziomie potencjału próżni) w paśmie przewodnictwa



przypadek studni kwantowej symetrycznie domieszkowanej w barierach



jakościowo sytuacja nie ulega zmianie gdy domieszkowane są A i B

kilka innych sytuacji:

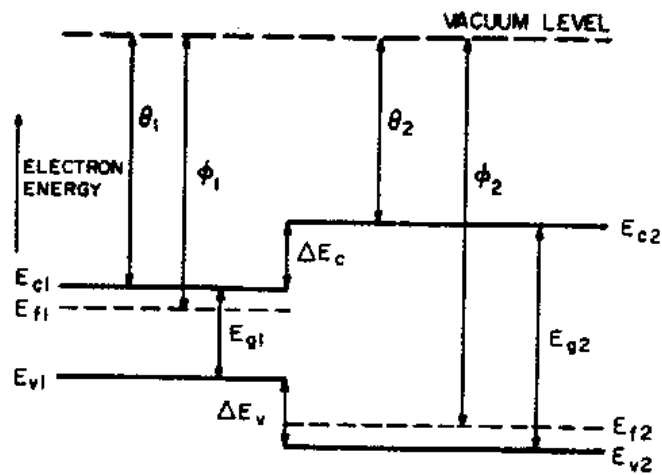


FIG. 1. Energy-band diagram for two isolated semiconductors in which space-charge neutrality is assumed to exist in every region.

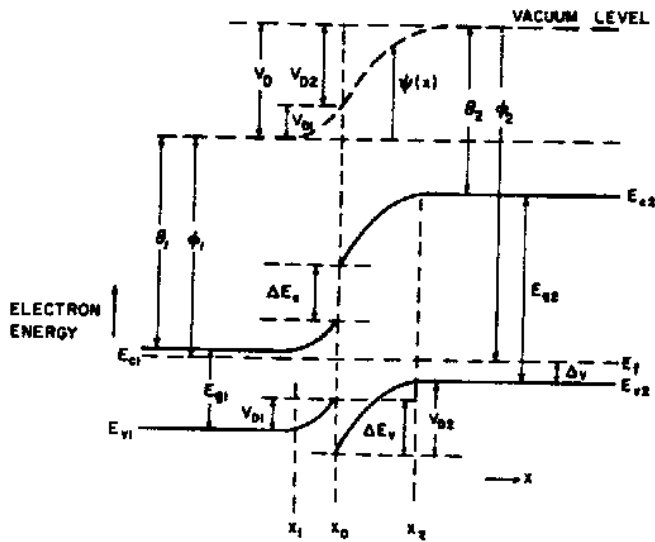
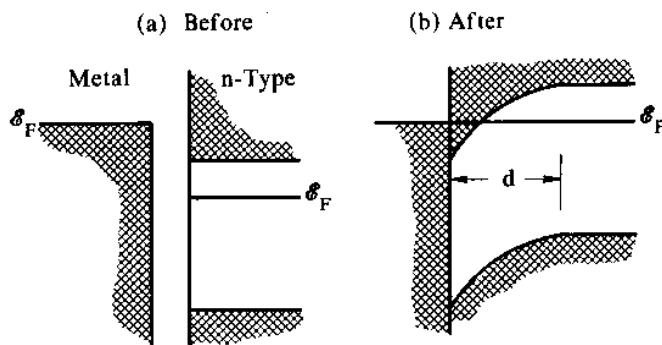
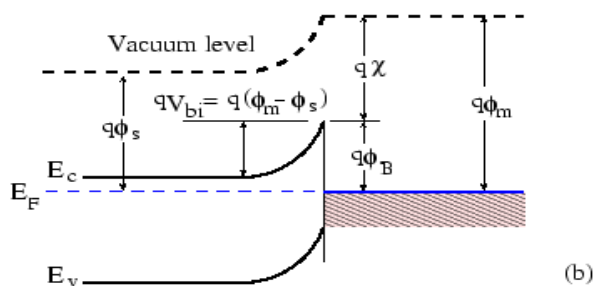
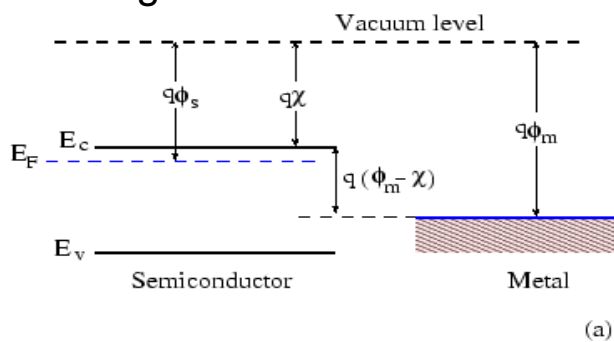


FIG. 2. Energy-band diagram of n - p heterojunction at equilibrium.

kontakt omowy



Bariera Schottkiego



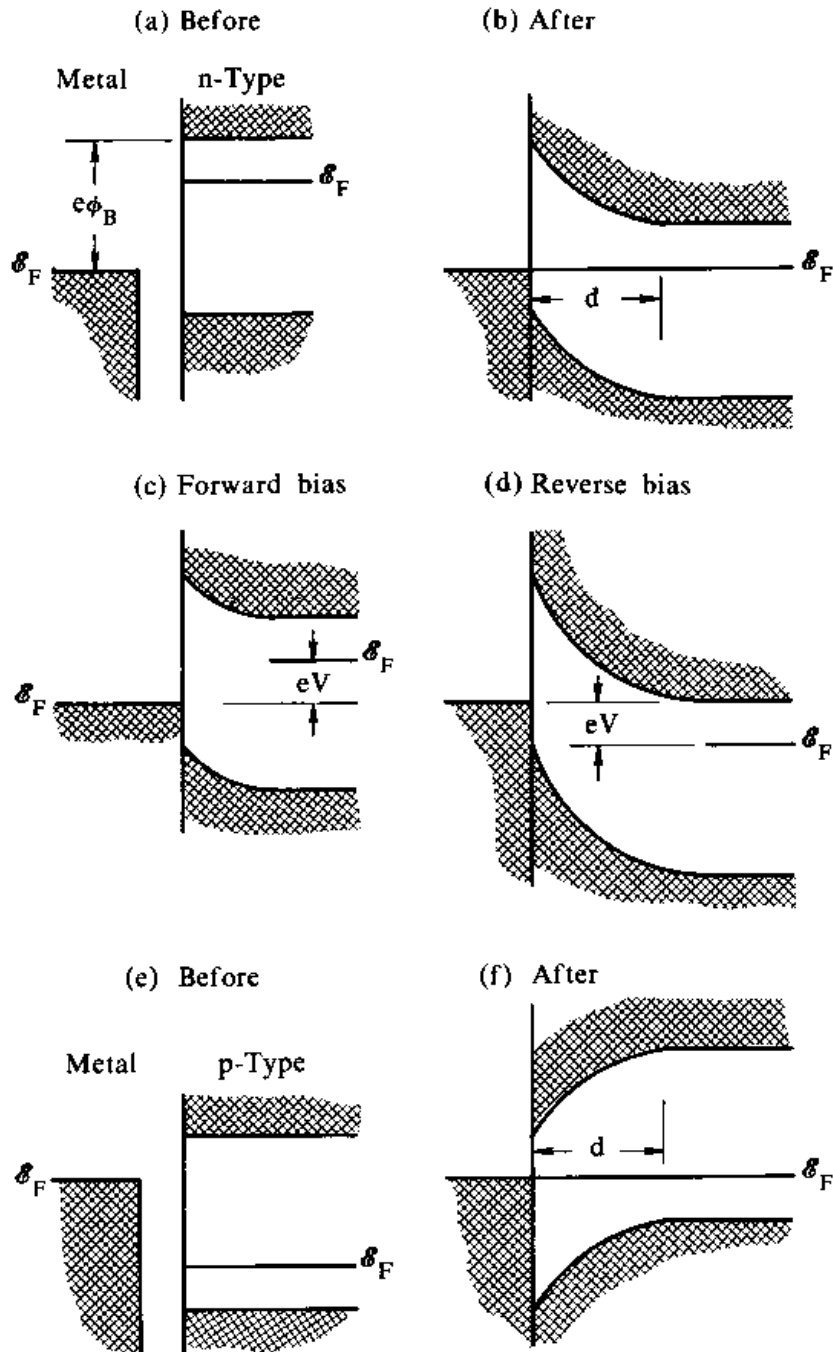
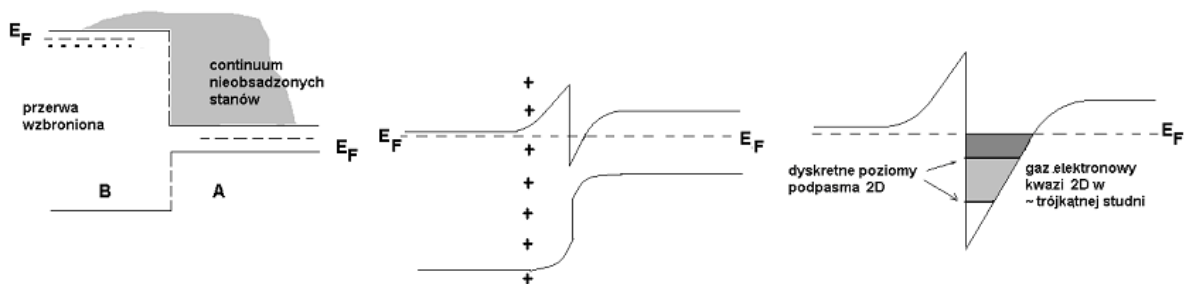


Fig. 10-37 Various aspects of a metal-semiconductor junction. (a) A metal and n-type semiconductor before contact. (b) The same as (a) but after contact. (c) and (d) The same as (b) but forward and reversed biased. (e) and (f) The same as (a) and (b) but the semiconductor is p-type.

Schemat obliczeń poziomów energetycznych (podpasm) na heterozłączu domieszkowanym w barierze



Podstawowe zadanie:

Znaleźć gęstość stanów elektronowych w pobliżu złącza

Założenia (znamy):

1. N_d - objętościowa gęstość domieszek donorowych (w barierze) (zakładamy jednorodny rozkład)
2. ΔE_c - różnica położenia dna pasma przewodnictwa dla niedomieszkowanego złącza
3. L_S - grubość warstwy niedomieszkowanej (bezpośrednio przy złączu)
4. E_F - względne położenie poziomów Fermiego w izolowanych ośrodkach

nie znamy:

- grubości L_D warstwy domieszek ulegających jonizacji

tyle domieszek ulega jonizacji, aż elektrony „zapełniające” warstwę niedomieszkowaną podniosą poziom Fermiego do poziomu E_F w barierze, ale nie wiemy ile elektronów przepłynie bo nie znamy rozkładu stanów (podpasm) w powstałej „trójkątnej” studni po niedomieszkowanej stronie złącza

Oznaczmy:

E_i - energie dyskretnych podpasm w studni

L_D - grubość warstwy zjonizowanych donorów

W temp. $T = 0$, każde podpasmo obsadzone jest tylko do E_F

zatem gęstość gazu kwaziswobodnych elektronów w i -tym podpasmie (gęstość ładunku po pomnożeniu przez e)

$$n_i = \int_{E_i}^{E_F} \rho(E) dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i)$$

uwaga: $\rho(E)$ jest gęstością stanów w 2D (zatem na „ cm^2 ”),
to n – też jest gęstością gazu 2D – gęstością powierzchniową

niech $\chi_i(z)$ - funkcja obwiedni i -tego podpasma
to

$$|\chi_i(z)|^2 (E_F - E_i) \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$$

lokalna gęstość stanów (ładunku elektronowego) w „punkcie” z ,
po scałkowaniu i zsumowaniu po podpasmach:

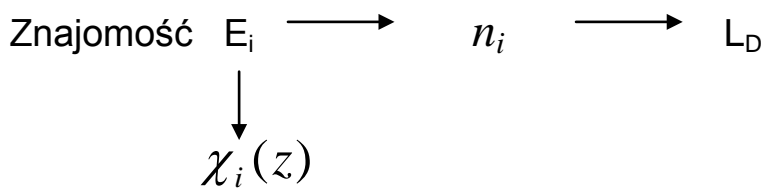
$$n_e = \sum_i n_i = \text{musi dać} = N_D L_D = \int_0^{L_D} N_D dz$$

powierzchniowa gęstość ładunku elektronowego = powierzchniowej gęstość zjonizowanych donorów

to wyraża zasadę zachowania ładunku

(dla uproszczenia położmy zero energii w E_F)

SCHEMAT postępowania:



pozwalają z równania Poissona wyznaczyć kształt potencjału $V(z)$;

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e}{\kappa} \left[\sum n_i |\chi_i(z)|^2 - N_D L_D Y(z) \right]$$

$Y(z)$ – jest funkcją schodkową ($\neq 0$ i $=1$ tylko w obszarze bariery)

z warunkami brzegowymi:

$V(-\infty) = \delta$ (energia wiązania elektr. na donorach w A)

$V(\infty) = E_G^B / 2$

i

pamiętając o ΔE_c (tzn., że na złączu jest skok potencjału)

Znając $V(z)$ możemy znaleźć E_i oraz

$$\chi_i(z)$$

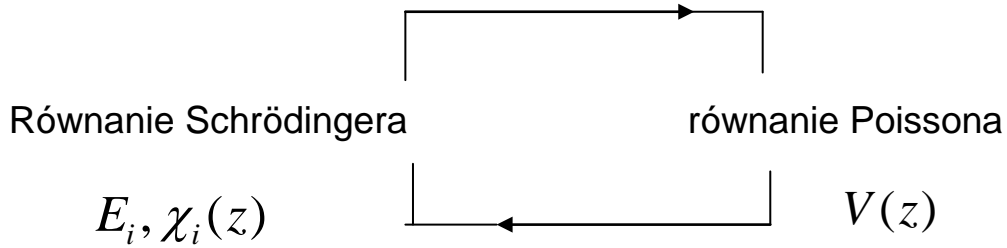
z równania Schrödingera

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\Lambda_{EC}} + V(z) \right] \chi_i(z) = E_i \chi_i(z)$$

z war. brzegowymi

$$\chi(z) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} 0$$

Iteracyjny rachunek samouzgodniony



aż przestanie się zmieniać widmo energii lub n_e

metoda pola samouzgodnionego SCF;
początkowy $V(z)$ dowolny, byle - *sensowny*;

- ściśle rozwiązanie = numeryczne
(efekty wymiany i korelacji elektronowej można uwzgl. za pomocą lokalnego potencjału)

Przypadek pojedynczego podpasma

wariacyjne oszacowanie energii podpasm

przybliżenie Fanga-Howarda

dla jednego heterozłącza

samouzgodniony potencjał „na prawo” od złącza można przybliżyć przez

$$eFz$$

odpowiada to założeniu, że znamy gęstość 2D elektronów

$$F = \frac{4\pi}{\kappa} n_e$$

w płaszczyźnie przy $z=0$; $en_e = \sigma$

κ – stała dielektryczna, czynnik 2 - pole od elektronów i zjon. donorów

zakładając nieskończoną barierę potencjału dla $z < 0$
i funkcje próbną w postaci:

$$\begin{cases} \chi(z) = 0, & z \leq 0 \\ \chi(z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} z \exp(-bz/2) & z \geq 0 \end{cases}$$

b - parametr wariacyjny,

minimalizując całkowitą energię n_e elektronów (wszystkie w tym samym stanie-podpasie), tzn.

$$E(b) = \langle \chi | T + V/2 | \chi \rangle$$

$$E(b) = \frac{\hbar^2 b^2}{8m} + \frac{1}{2} \frac{3eF}{b}$$

$$b_{\min} = \left[\frac{6meF}{\hbar} \right]^{1/3}$$

dostajemy minimum w

a energia pasma podstawowego

$$E_1 = \frac{\hbar^2 b^2}{8m} + \frac{3eF}{b}$$

wyniesie:

$$E_1 = \left[\frac{6^{2/3}}{8} + \frac{3}{6^{1/3}} \right] (eF)^{2/3} \frac{\hbar^{2/3}}{m^{1/3}}$$

licząc od dna potencjału;

ponieważ zakładaliśmy, że znamy gęstość 2D, n_e ,
i zakładając, że tylko jedno podpasmo – o energii dna E_1 w trójkątnej studni
jest obsadzone, to możemy obliczyć gdzie będzie poziom Fermiego

$$n_e = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_1)$$

samouzgodniony potencjał $V(z)$ może teraz być odzyskany
z równania Poissona przy warunkach brzegowych:

$$V(0) = 0, \quad V(\infty) = E_F$$

Zmodyfikowana metoda Fanga-Howarda

$$\begin{cases} \chi(z) = M \exp(dz/2), & z \leq 0 \\ \chi(z) = N(z + z_0) \exp(-bz/2) & z \geq 0 \end{cases}$$

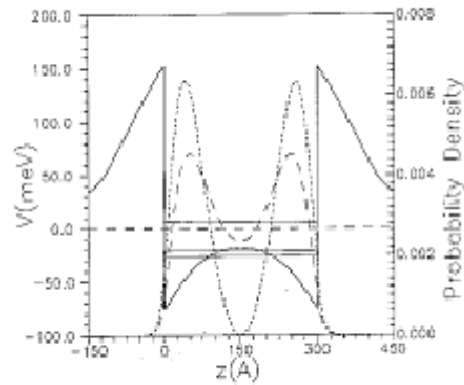
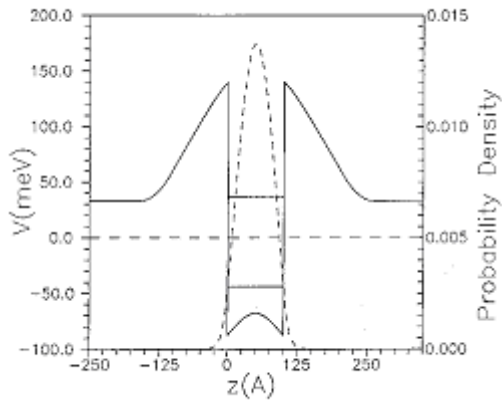
funkcja wnika w głąb bariery

- ciągłość funkcji
- odpowiedni skok pochodnej
- normalizacja wyznaczają M, N, z_0 , parametrami wariacyjnymi są:
 b, d

Przykłady obliczeń dla gazu elektronowego 2D metodą pola samouzgodnionego

Studnie kwantowe: $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As} | \text{GaAs} | \text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$

szerokość studni		Lw
grubość obszaru niedomieszkowanego		Ls
koncentracja aluminium	x	



objętościowa gęstość domieszek donorowych Nd

$L_w = 10 \text{ nm}$
 $L_s = 10 \text{ nm}$
 $x = 0.3$
 $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
 $n_s = 12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

$L_w = 30 \text{ nm}$
 $L_s = 10 \text{ nm}$
 $x = 0.3$
 $N_d = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
 $n_s = 13 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

----- lokalna gęstość ładunku

Powody domieszkowania w barierze – nie w studni:

- uzyskać maksymalnie gęsty i ruchliwy gaz kwazi-2D
- odizolować elektrony od jonów donorowych – niejednorodności sieci, tzn. elementów rozpraszających elektrony