

Obserwacje świadczące o dyskretyzacji widm energii w strukturach niskowymiarowych

1. Optyczne

Widma:

- absorpcji – wzbudzenie fotonami o coraz większej energii ze szczytu pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa – maksima odzwierciedlają strukturę obu pasm (w szczególności CB) – gęstości stanów
- PL, fotoluminescencja – obserwacja intensywności emisji po wzbudzeniu głęboko do CB (najsilniejsza emisja zwykle dla nie zabronionego przejścia z dna CB do szczytu VB)
- PLE, widma wzbudzenia – obserwujemy emisję (maksimum) ale w funkcji zmieniającej się energii wzbudzenia – odzwierciedla te same struktury CB co absorpcja – wzbudzenia do „szczególnych” stanów w CB

64

OPTICAL PROPERTIES OF THIN HETEROSTRUCTURES

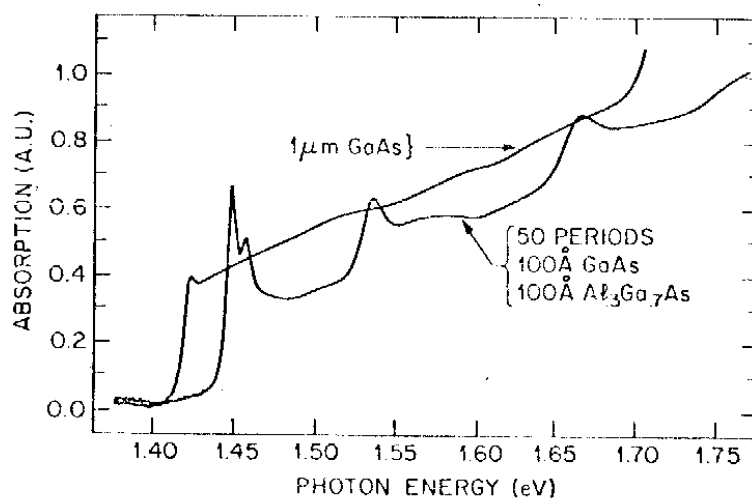


Fig. 30e. Comparison of the room-temperature absorption spectra of high-quality bulk and $L_z = 100 \text{ \AA}$ MQW GaAs samples. The bump at the onset of bulk absorption is the remnant of the thermally dissociated exciton. The sharp exciton peak in MQWs denotes a stronger resonant light-matter coupling. (Ref. 254.)

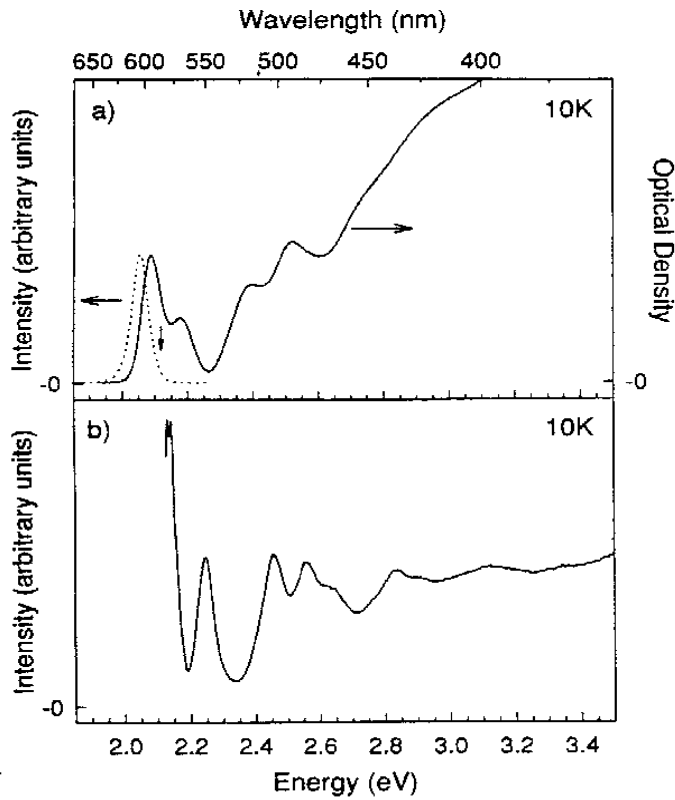
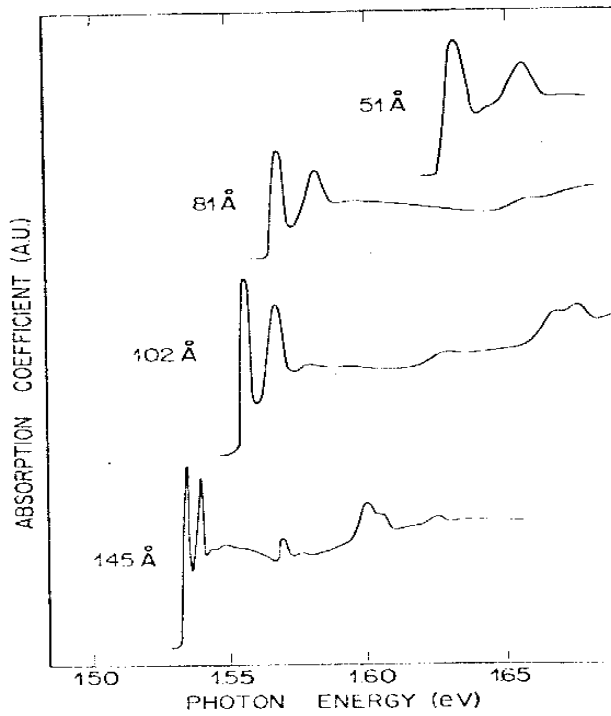


FIG. 1. (a) Absorption (solid line) and photoluminescence (dashed line) spectra for ~ 28 - \AA -radius quantum dots. In luminescence the sample was excited at 2.655 eV (467.0 nm). The downward arrow marks the emission position used in PLE. (b) PLE scan for ~ 28 - \AA -radius dots.



Excitation spectra of various wells with different thicknesses at 1.8 K.

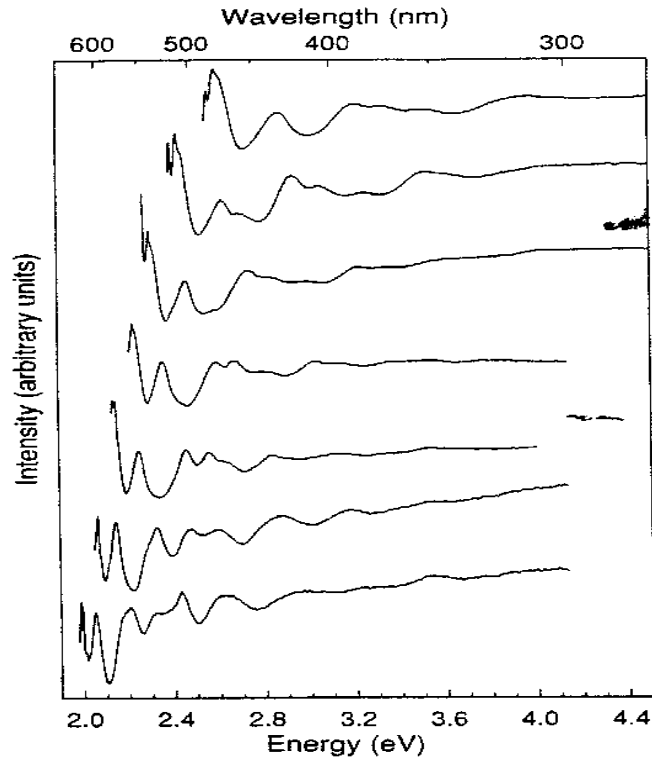


FIG. 2. Normalized PLE scans for seven different size quantum dot samples. Size increases from top to bottom and ranges from ~ 15 to ~ 43 Å in radius. In many scans a broad lamp artifact appears at ~ 3.5 eV. This feature was ignored in the data analysis.

własności elektryczne

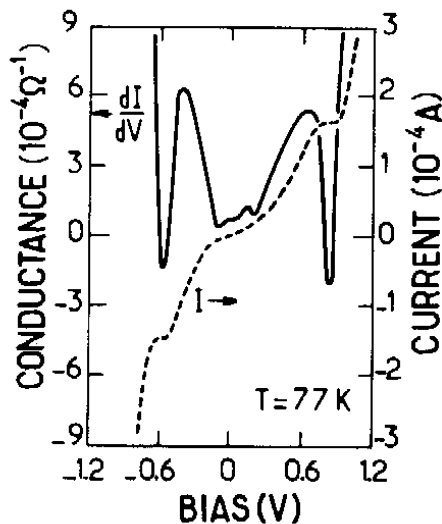


Fig. 16. — Current-voltage and conductance-voltage characteristics of a double barrier structure of GaAs between two $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ barriers sandwiched between n^+ -GaAs regions. $L = 50$ Å; $b = 80$ Å; $T = 77$ K. After reference [39].

- Rezonansowe tunelowanie przez DBS

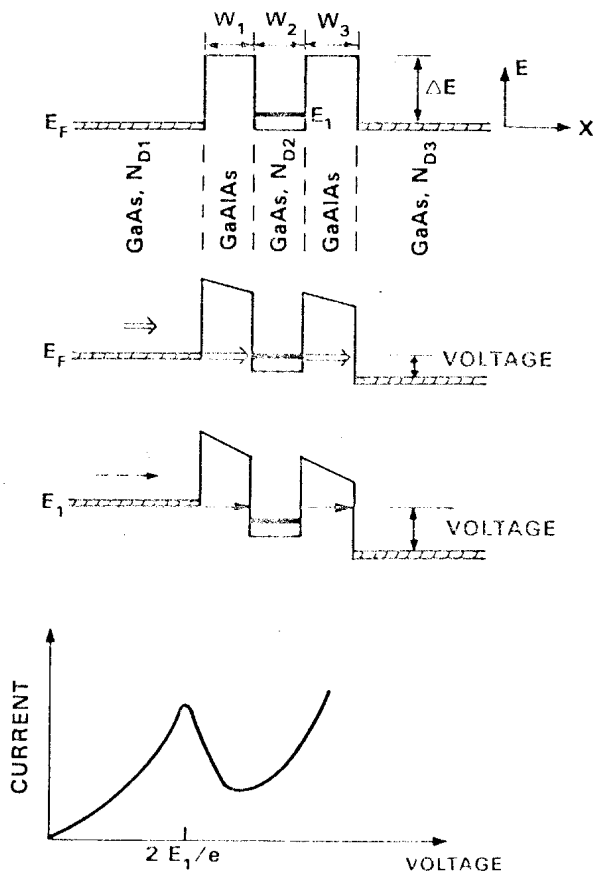
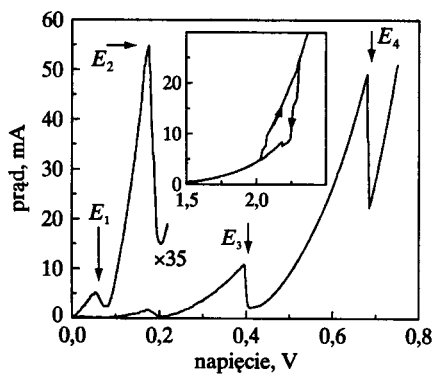
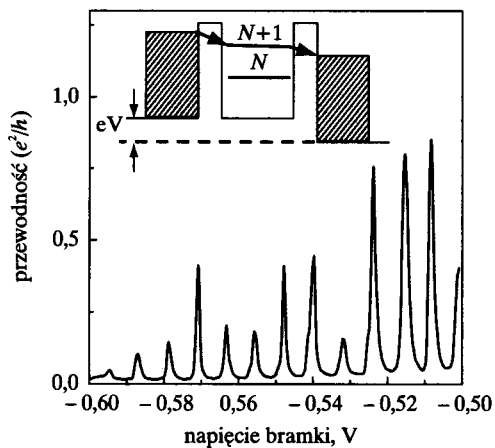


FIG. 66. Schematics of resonant tunneling effect. Energy levels in a single-well double-barrier heterostructure (top three drawings) under bias increasing from the top. The electron energy is indicated as a function of position. Parameters are $N_{D1} = N_{D3} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_{D2} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and $W_1 = W_2 = W_3 = 50 \text{ \AA}$. Resonant transmission occurs for $V = 2E_1/e$, when electrons tunnel resonantly into the $n = 1$ well state from the left electrode (from Sollner *et al.*²⁵).



Rys. 3.28. Charakterystyka prądowo-napięciowa dla rezonansowej struktury o podwójnej barierze, składającej się ze studni GaAs o grubości 20 nm z barierami $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ o grubości 8,5 nm. Widoczne są rezonanse z czterema stanami związanymi oraz histereza zaobserwowana w asymetrycznej strukturze z barierami $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$ o grubości 8,5 i 13 nm, i studnią z $\text{In}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{As}$ o grubości 7,5 nm. Dzięki uprzejmości Philipa Buckle'a i Wendy Tagg z University of Sheffield



Rys. 3.30. Oscylacje przewodnictwa związane z blokadą kulombowską zmierzone w temperaturze 10 mK na elektrostatycznie wytworzonej kropce kwantowej. U góry pokazano mechanizm transportu pojedynczych elektronów przez strukturę. Dane reprodukowano z: L. P. Kouwenhoven, N. C. van der Vaart, A. T. Johnson, W. Kool, C. J. P. M. Harmans, J. G. Williamson, A. A. M. Staring i C. T. Foxon, *Zeitschrift für Physik B* **85**, 367 (1991). Copyright 1991 Springer-Verlag

Fotoprąd w supersieciach

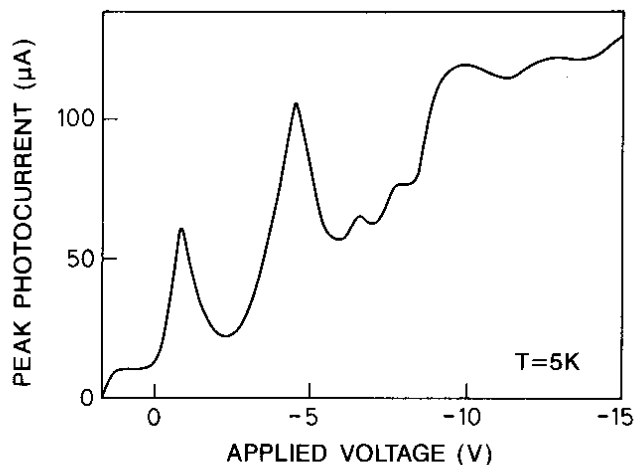
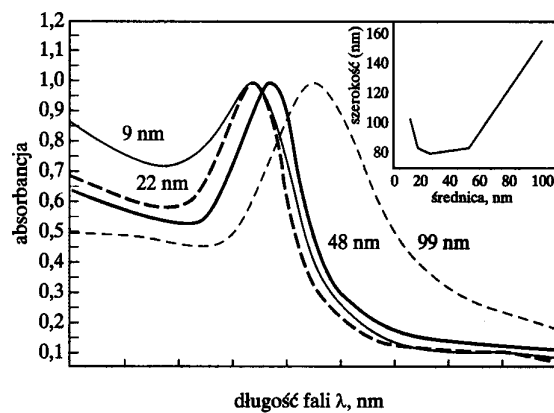


Fig. 4.5. Peak photocurrent vs applied voltage in a superlattice with 18.4 nm GaAs wells, 1.4 nm AlAs barriers, and 40 periods at 5 K. The excitation energy was 1.851 eV.



Rys. 1.17. Widma absorpcyjne nanocząstek złota o różnej wielkości oraz zależność szerokości połówkowej piku absorpcyjnego od średnicy cząstki

Pojedyncze heterozłącze

- **Położenie poziomu Fermiego**

- a. metal: energia najwyższego obsadzonego poziomu w temperaturze 0 K;
- b. półprzewodnik samoistny:

$$E_F = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right) \quad (*)$$

(licząc od szczytu pasma walencyjnego; E_g – szerokość przerwy; $m_{e/h}$ - masy elektronów/dziur)

dowód:

obsadzenie poziomów energetycznych fermionów (elektronów, dziur) – rozkład Fermiego-Diraca:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \approx e^{(E_F-E)/kT}$$

dla $E \gg E_F$,

zakładając paraboliczną, na dnie pasma przewodnictwa, relację dyspersyjną $E(k)$, to ilość stanów elektronowych (w 3D) o energiach z przedziału pomiędzy E i $E+dE$ wynosi (na jednostkę objętości)

$$n(E)dE = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2} dE$$

(gdyż $n(k)dk = n(E)dE$, a $n(k) \sim k^2 dk$, oraz $dk/dE \sim (E-E_g)^{-1/2}$)

natomiast liczba wszystkich elektronów (w paśmie przewodnictwa) (to jest liczba elektronów/jedn.obj = koncentracja)

$$n = \int_{E_g}^{\infty} n(E) f(E) dE = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{(E_F - E_g)/kT}$$

podobnie

$$p = 2 \left(\frac{2\pi m_h kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-E_F / kT}$$

koncentracja dziur

(ponieważ dziury w paśmie walencyjnym powstają przez obecność elektronów w paśmie przewodnictwa)

$$f_d = 1 - f \approx e^{(E - E_F) / kT}$$

iloczyn $n \cdot p$ wyraża tzw. *prawo działania mas*;
(iloczyn koncentracji nie zależy od E_F , zależy tylko od iloczynu $m_e \cdot m_h$ i od E_g)

dla samoistnego półprzewodnika $n=p$ zatem

$$e^{2E_F / kT} = \left(\frac{m_h}{m_e} \right)^{3/2} e^{E_g / kT}$$

co daje (α)

ale tak jest tylko w najprostszym modelu

- CB i VB niezdegenerowane i opisane najprostszym modelem $n(E)$

w rzeczywistości VB jest na ogół zdegenerowane, każde z pasm (i) składających się na VB ma inną gęstość $n_i(E)$

c. przewodniki domieszkowane (niesamoistne):

Tu obraz jest bardziej skomplikowany;

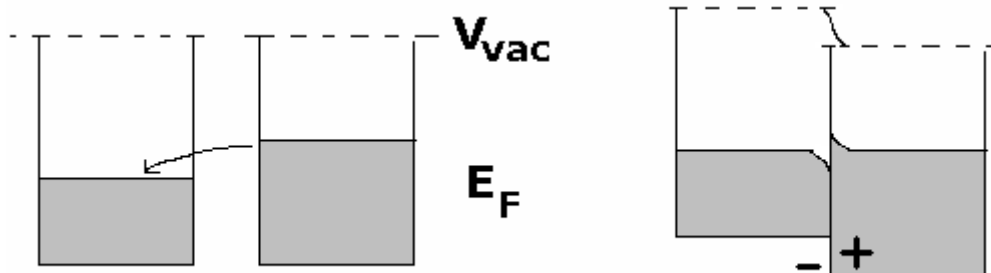
w $T = 0$ K, $E_F \sim$ pomiędzy poziomem donorowym/akceptorowym
a dnem odpowiedniego pasma
(dla płytkich domieszek, $E_d \ll E_g$, $E_F \sim E_d$)

- Dwa różne ośrodki **przed połączeniem** (złącze w postaci idealnej płaszczyzny (prostopadłej do kier. Z)

Jedynym poziomem odniesienia jest poziom próżni

względem tego poziomu wyznaczone są

- potencjały jonizacyjne
 - powinowactwa elektronowe
 - położenie poziomów Fermiego
- po złączeniu ośrodków – wyrównanie poziomu Fermiego (teraz z def. dla układu 2 ośrodków)



metale:

przepływ swobodnych nośników aż do wyrównania E_F ;
może pojawić się skok potencjału na złączu

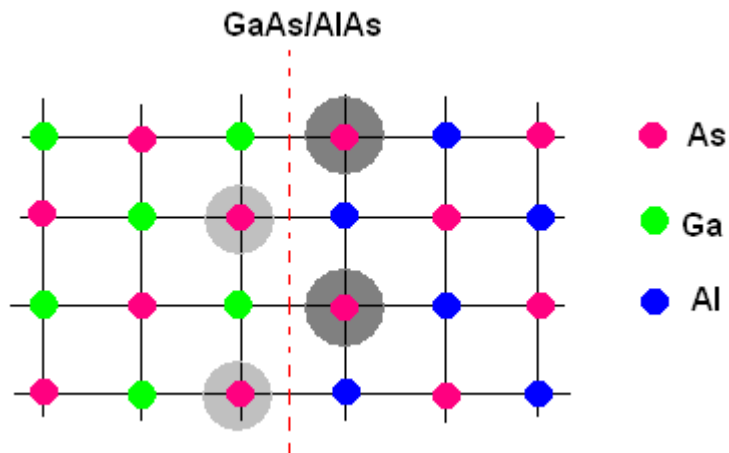
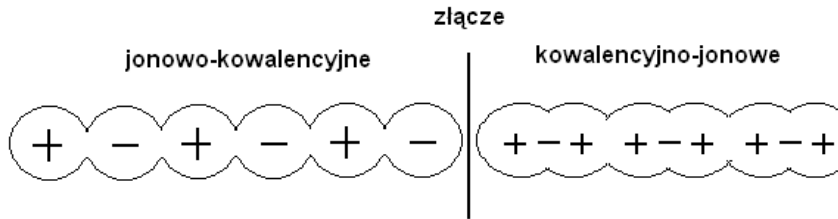
półprzewodniki samoistne

(zawsze istnieją nieintencjonalne domieszki umożliwiające przepływ ładunków z donorów i akceptorów zmierzający do wyrównania E_F)

dla idealnych półprzewodników:

przesunięcie ładunku na złączu związane z wiązaniem w sieć kryst.,
powodujące lokalny skok potencjału i częściowe wyrównanie E_F

inaczej: charakter kowalencyjno-jonowy wiązań jest inny po obu stronach złącza, co będzie prowadziło do **przesunięcia** ładunku na złączu



charakter wiązania na złączu ulegnie zmianie (nie jest zrównoważone), nastąpi przesunięcie (czyli polaryzacja) na złączu

(tu: atomy As po obu stronach złącza mają inne otoczenie niż w macierzystym kryształ)

- analogia do wiązania chemicznego w cząsteczkach heteroatomowych - polarność wiązań

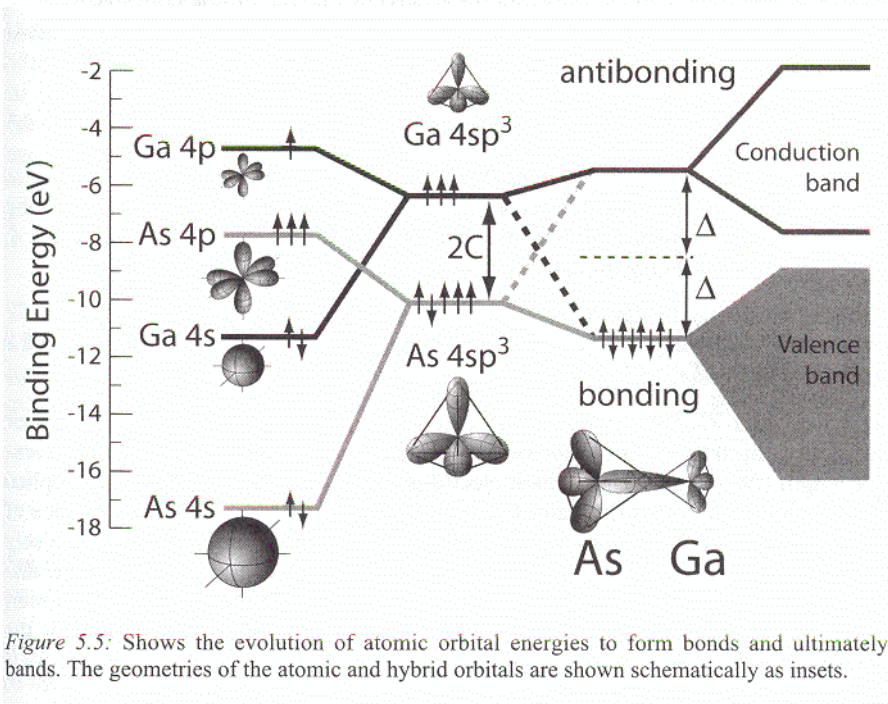
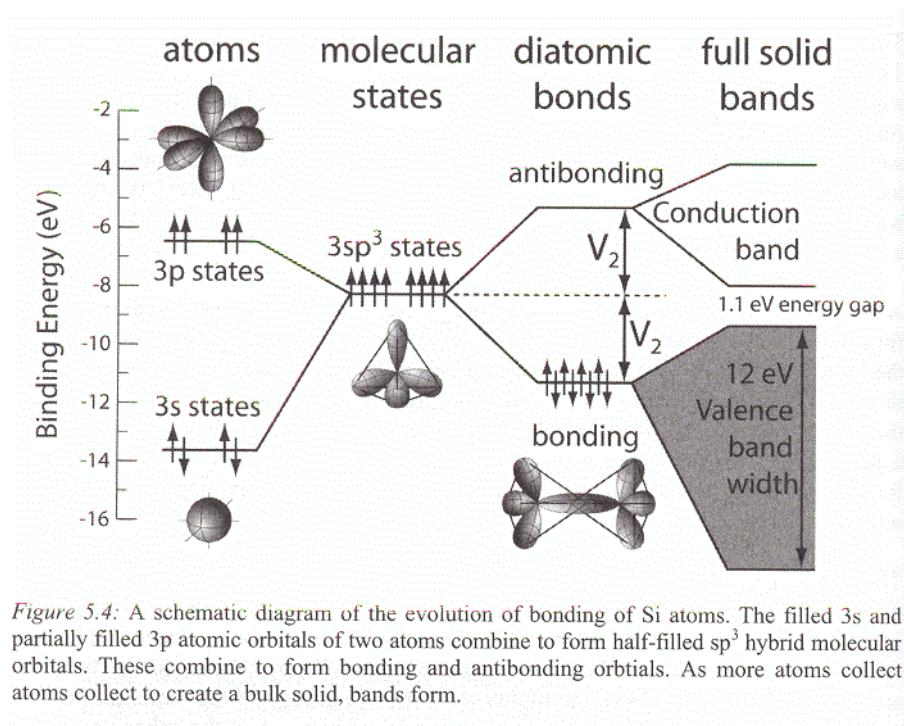
molekularnie:

E_V = energia ostatniego zajętego orbitala molekularnego
HOMO

E_C = energia pierwszego nieobsadzonego orbitala molekularnego
LUMO

względne położenia HOMO i LUMO mogą być oszacowane na podstawie kwantowo-chemicznych obliczeń półempirycznych lub *ab initio*

z HOMO i LUMO powstają pasma, walencyjne i przewodnictwa



- reguła wspólnego anionu (Harrison, 1977)

z dokładnością do kilku dziesiątych eV, dwa półprzewodniki posiadające wspólny anion (np. GaAs, AlAs), tę samą strukturę krystaliczną, oraz podobną stałą sieci, mają prawie zerowy – tzn. na ogół znacznie mniejszy -

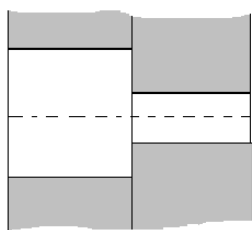
(rzędu kilku dziesiątych eV) „offset” położenia brzegów pasma walencyjnego

np.: GaAs / InAs, przerwa GaAs – $E_g \approx 1.5$ eV
przerwa InAs – $E_g \approx 0.5$ eV

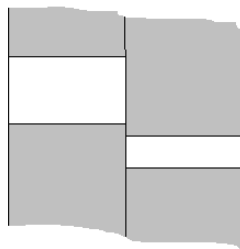
offset $E_c \approx 0.8$ eV, offset $E_v \approx 0.2$ eV

można też wyznaczać „band offsets” eksperymentalnie

Rodzaje heterozłącza:



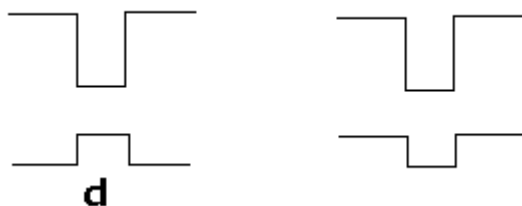
I rodzaju



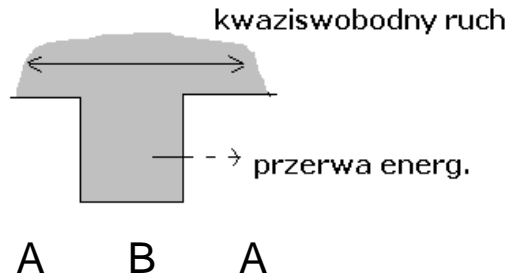
II rodzaju

przeniesienie ładunku -
złącze przewodzące

studnie kwantowe:



jeśli szerokość studni, d , jest mezoskopowych rozmiarów to ruch ewentualnych nośników (elektronów na dnie pasma przewodnictwa czy dziur w paśmie walencyjnym), który jest kwazi-swobodny w litym jednorodnym ośrodku 3D, może zostać istotnie ograniczony w kierunku prostopadłym do płaszczyzny złącza w obszarze ośrodka tworzącego „studnię”

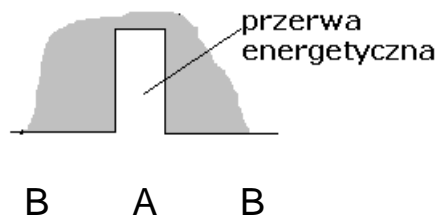


W obszarze A nie mogą istnieć elektrony o energiach z dna pasma obszaru B

Jeśli szerokość studni jest b. mała to kwazi-swobodny ruch nośników w obszarze B (o energiach bliskich dna pasma) staje się **kwazi-dwuwymiarowy**

przestrzenne ograniczenie klasycznego ruchu cząstki prowadzi do kwantyzacji (dyskretyzacji) widma energii

bariery potencjału:



Potencjał próżni zwykle głęboko w paśmie przewodnictwa =>



W litych kryształach elektrony obsadzające dno pasmo przewodnictwa (w półprzewodnikach, lub energetyczny obszar blisko E_F w metalach) stanowią kwaziswobodny gaz 3D

W bardzo cienkich studniach kwantowych gaz jest kwazi-2D

W układach 1-wymiarowych ograniczenie kwaziswobodnego ruchu elektronów w 2 wymiarach => gaz kwazi-1D

W układach 0-wymiarowych: elektrony (w pewnych zakresach energii) ograniczone w swobodnym ruchu we wszystkich kierunkach przestrzennych = gaz-0D = całkowita dyskretyzacja energii

Gęstość stanów gazu nD w układach niskowymiarowych

$\rho(E)dE = \frac{\text{Ilość stanów w przedziale } (E, E+dE)}{\text{jednostkę objętości}}$
--

1. 3D; swobodne cząstki o masie m

nałożmy warunki periodyczności Borna-von Karmana ($L_x = L_y = L_z$)

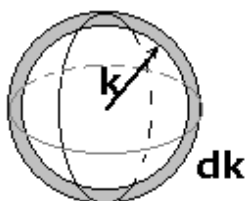
$$k_x = \frac{n2\pi}{L_x} \quad \Omega_0 = \frac{8\pi^3}{L^3} \quad \rho(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3}$$

Ω_0 - obj. elementarnej komórki w przestrzeni k

energia zależy tylko od modułu k , zatem wszystkie stany o tej samej energii (z przedz. $E, E+dE$) leżą na sferze o promieniu k , i grubości dk ,

$$\rho(k)d^3k = \frac{4\pi k^2}{8\pi^3} dk = \frac{m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} E^{1/2} dE = \rho(E)dE$$

gdyż $E = \hbar^2 k^2 / 2m \Rightarrow$



zatem w 3D

$$\rho(E) = \frac{m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} E^{1/2}$$

2. 2D – swobodne cząstki w 2 wymiarach

$$\rho(k) d^2k = \frac{2\pi k}{4\pi^2} dk = \frac{m}{\pi \hbar} dE \quad \rho(E) = \frac{m}{\pi \hbar}$$

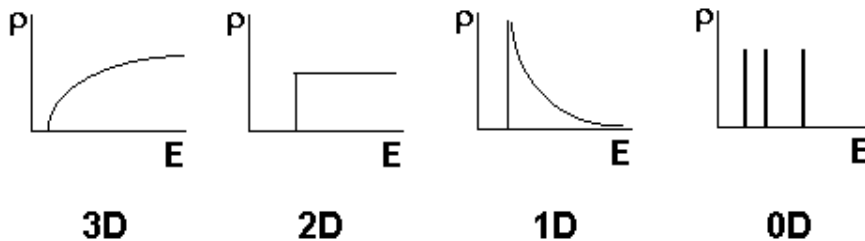
stała !

3. 1D – gaz 1-wymiarowy

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{m/2}}{\pi \hbar} E^{-1/2}$$

4. 0D widmo dyskretne

$$\rho(E) = \sum_i k_i \cdot \delta(E - E_i)$$



Co nas będzie interesowało?

- Przejścia optyczne (widmo energii [gęstości]) w obszarze bliskim brzegów pasm
- Własności elektryczne: transport (energie bliskie brzegom pasm)
- Wpływ przestrzennego ograniczenia na widma domieszek i ekscyt.
- Wpływ zewnętrznych pól

Centralne zadanie:

Znajomość $E(k)$ blisko brzegów pasm