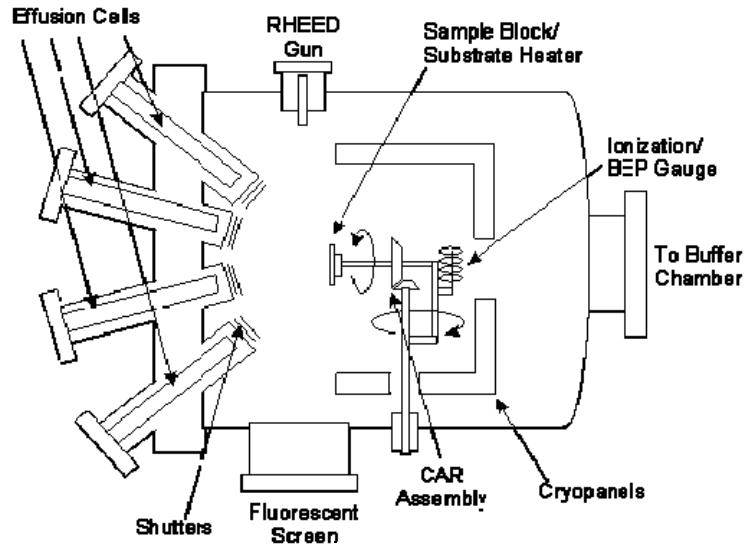


Structuri cuantice semiconductoare

1. Introducere

Utilizând epitaxia cu fascicul molecular se pot obține heterostructuri semiconductoare, având dimensiuni de ordinul 10 nm; pentru aceste dimensiuni comparabile cu λ_B asociată microparticulelor din structură apar efecte cuantice specifice.



Primele experiențe, efectuate în 1970, au pus în evidență procese de tunelare rezonantă – utilizate pentru realizarea de dispozitive cu rezistență negativă – și o localizare puternică a purtătorilor de sarcină, care a condus la îmbunătățirea performanțelor laserilor cu semiconductori.

Structurile utilizând gropile cuantice semiconductoare domină cercetările actuale din domeniul optoelectronicii (modulatoare optice performante, diode laser cu multiple aplicații – de la telecomunicații, până la stocarea optică) și al microelectronicii (tranzistori cu electroni balistici, calculatoare cuantice).

Cea mai simplă structură este groapa cuantică ("quantum well") – un "sandwich" dintr-un strat subțire ($\sim 10\text{nm}$) de material semiconductor A cu bandă interzisă E_{g1} , între două straturi de dimensiuni mari, dintr-un alt material semiconductor B, cu bandă interzisă largă, $E_{g2} > E_{g1}$ (fig.)

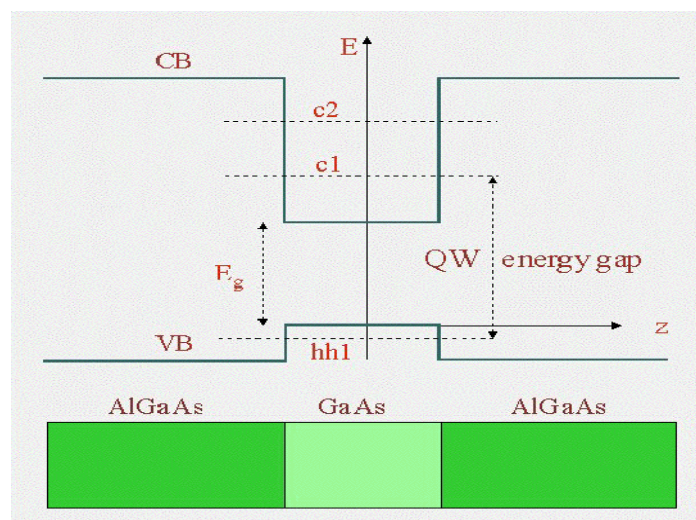


Fig. 1

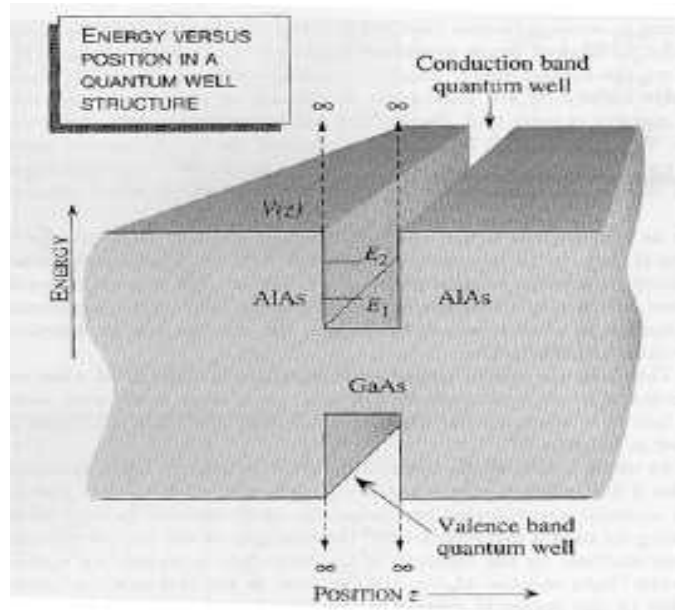


Fig. 2

Când se realizează o astfel de heterostructură nu se poate determina teoretic cum se aliniaza benzile de energie din cele două materiale. De aceea, o mărime importantă – determinată experimental – este raportul salturilor în cele două benzi, $\frac{\Delta E_C}{\Delta E_V}$. Pentru structura

GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, de exemplu, aproximativ 60% din diferența $(E_{g2} - E_{g1}) = \Delta E_g$ este în saltul benzii de conducție și 40%, în cel al benzii de valență, astfel încât raportul este 69:40. Structura obținută, reprezentată în figura 2a este un sistem de tipul I, pentru care salturile ΔE_C și ΔE_V acționează ca niște bariere cuantice, atât pentru electroni cât și pentru goluri.

În procesul de epitaxie nu apar defecte de structură dacă valorile constantelor de rețea pentru cele două materiale, A și B, sunt foarte apropiate. AlAs și GaAs au constante de rețea aproape identice (și aceeași structură cristalină), ceea ce permite obținerea de heterostructuri de foarte bună calitate. (vezi tabelul). Un alt sistem utilizat este $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ cu InP; în acest caz, proporția de In și Ga este ajustată pentru a obține o constantă de rețea a aliajului egală cu cea a InP.

Material	Constanta de rețea (Å)	$ \Delta a / a_{\text{substrat}}$
GaAs	5.653	3.7% (pe InP)
AlAs	5.661	3.5% (pe InP)
InP	5.869	3.7% (pe GaAs)

În cele ce urmează studiem structuri de tipul I, pentru care stratul subțire din materialul A acționează ca o groapă de potențial pentru electroni, respectiv pentru goluri.

2. Particula în groapa cuantică semiconductoare. Nivele de energie

Într-un semiconductor, funcțiile de undă electronice sunt funcții Bloch, astfel încât starea electronului într-o structură bidimensională (groapă cuantică) este de forma

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}}^{A,B}(\vec{r}) \chi(z) \quad (1)$$

unde \vec{k}_\perp este vectorul de undă perpendicular pe direcția de creștere (Oz), $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ este partea periodică a funcției Bloch în materialul A (sau B), iar $\chi(z)$ se numește "funcție înfășurătoare". Această alegere a funcției de undă $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ ține seama de faptul că electronii și golurile se pot deplasa liber în planul xOy (perpendicular pe direcția de creștere).

Funcția $\chi(z)$ verifică ecuația unidimensională:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \chi(z) = E \chi(z) \quad (2)$$

Proprietățile de bază ale particulei într-o groapă de potențial cu $L \geq a_B^*$ pot fi descrise, chiar la temperatura camerei, în aproximația gropii unidimensionale cu pereți înfiniți. În acest caz

$$V(z) = \begin{cases} 0; & 0 < z < L \\ \infty; & \text{in exterior} \end{cases}$$

Funcțiile înfășurătoare, verificând condițiile la limită $\chi(z) = 0$ pentru $z = 0$ și $z = L$, sunt:

$$\chi_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi z}{L}; & 0 < z < L \\ 0; & \text{in exterior} \end{cases} \quad (3)$$

cărora le corespund valorile proprii

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2; \quad n = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Pentru groapa cuantica rectangulară cu pereți finiți

$$V(z) = \begin{cases} 0; & |z| \leq \frac{L}{2} \\ V_0; & \text{in exterior} \end{cases} \quad (5)$$

unde

$$V_0 = \begin{cases} \Delta E_C & \text{pentru electroni} \\ \Delta E_V & \text{pentru goluri} \end{cases}$$

Pentru că $V(z) = V(-z)$, soluțiile vor avea paritatea precizată; în starea fundamentală, soluția este o funcție pară:

$$\chi(z) = \begin{cases} A \cos k_1 z & ; |z| < \frac{L}{2} \\ B \exp[-k_2 z] & ; z > \frac{L}{2} \\ B \exp[k_2 z] & ; z < -\frac{L}{2} \end{cases} \quad (6)$$

În prima stare excitată:

$$\chi(z) = \begin{cases} A \sin k_1 z & ; |z| < \frac{L}{2} \\ B \exp[-k_2 z] & ; z > \frac{L}{2} \\ -B \exp[k_2 z] & ; z < -\frac{L}{2} \end{cases} \quad (7)$$

unde

$$k_1^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}; \quad k_2^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2}(V_0 - E) \quad (8)$$

Dacă $m_A^* \neq m_B^*$, condițiile la limită se aleg de forma:

$$\begin{aligned} \chi(z) & \text{ continuă la interfețe } \left(z = \pm \frac{L}{2} \right) \\ \frac{1}{m^*} \frac{d\chi}{dz} & \text{ continuă la interfețe } \left(z = \pm \frac{L}{2} \right) \end{aligned} \quad (9)$$

(ultima condiție asigurând conservarea densității de curent de probabilitate).

Impunând condițiile (9) rezultă:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{k_1}{m_A^*} \operatorname{tg}\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = \frac{k_2}{m_B^*} \quad \text{pentru stări pare} \\ \frac{k_1}{m_A^*} \operatorname{ctg}\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = -\frac{k_2}{m_B^*} \quad \text{pentru stări impare} \end{array} \right. \quad (10a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{k_1}{m_A^*} \operatorname{ctg}\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = -\frac{k_2}{m_B^*} \quad \text{pentru stări impare} \\ \frac{k_1}{m_A^*} \operatorname{tg}\left(k_1 \frac{L}{2}\right) = \frac{k_2}{m_B^*} \quad \text{pentru stări pare} \end{array} \right. \quad (10b)$$

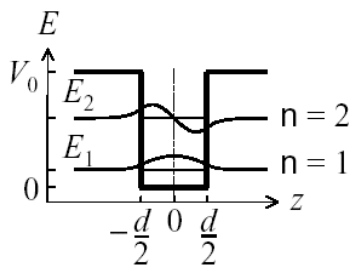
Ecuțiile se pot rezolva numeric, determinându-se energia E_1 a stării fundamentale și respectiv E_2 pentru starea excitată.

Pentru $m_A^* \cong m_B^*$, se demonstrează că numărul de stări legate este:

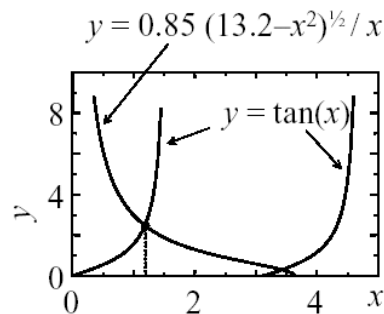
$$N = 1 + \operatorname{Int} \left[\left(\frac{2m^* V_0 L^2}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (11)$$

unde $\operatorname{Int}[x]$ este partea întreagă a lui x . Prin urmare în groapa finită există întotdeauna cel puțin o stare legată iar V_0 și L se pot alege astfel încât să existe un număr fixat de nivele de energie, poziționate convenabil.

Finite quantum well



- Wave functions tunnel into the barrier
- wave function still identified by parity and number of nodes
- Confinement energy reduced compared to infinite well
- analytical solution to find E



Example : GaAs/AlGaAs

$$V_0 = 0.3 \text{ eV}, \quad d = 10 \text{ nm}$$

$$m_w^* = 0.067m_e, \quad m_b^* = 0.092m_e$$

$$E_1 = 31.5 \text{ meV}$$

$$\text{c.f. infinite well: } E_1 = 57 \text{ meV}$$

Reducând dimensionalitatea se obțin structuri unidimensionale (fire cuantice) în care electronii se deplasează liber numai pe o direcție și respectiv zero-dimensionale (puncte cuantice, în care electronii sunt localizați într-o regiune de dimensiuni microscopice). Aceste

structuri apar în cazul în care un semiconductor cu bandă interzisă mică este intercalat într-o structură sandwich sau este înconjurat de un material cu bandă interzisă largă (fig. 1).

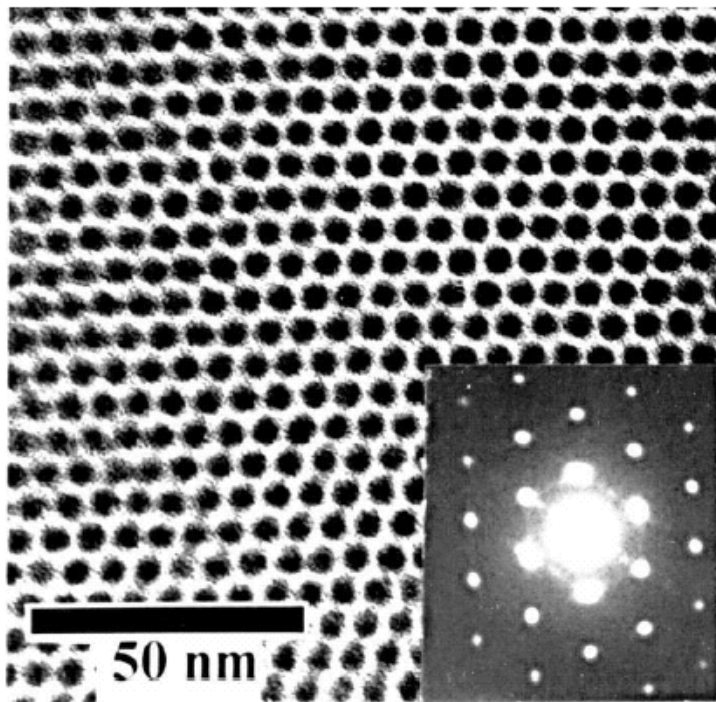
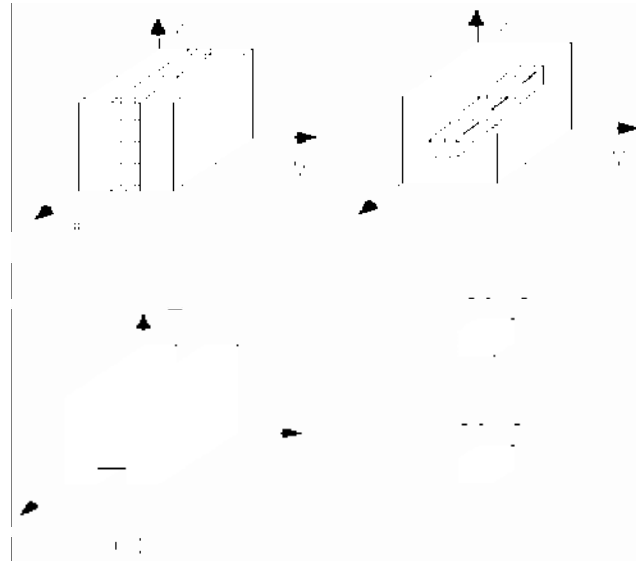


Figure 1.5: TEM micrograph of an array of colloidal CdSe quantum dots ordered into an artificial crystal. Each dark spot is an individual quantum dot. The white space in between dots is the organic ligands passivating the surface of the particle.

Observație. Se știe că efectele cuantice devin importante dacă distanța dintre două nivele consecutive este mult mai mare decât energia termică, $k_B T$, așa încât

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L_z^2} \gg k_B T.$$

Utilizând această condiție se găsește că, pentru GaAs unde $m_c^*/m_0 = 0.067$, la temperatura camerei cuantificarea nivelelor în banda de conducție devine importantă dacă $L_z \leq 150 \text{ \AA}$.

Firul cuantic

Pentru firul cuantic, presupunând localizarea bidimensională într-un dreptunghi de laturi L_x , L_y , putem scrie

$$\psi(x, y, z) = \exp[ik_z z] \chi(x, y) \quad (12)$$

Stările staționare E_{np} în firul cuantic se obțin rezolvând ecuația lui Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \chi(x, y) + V(x, y) \chi(x, y) = E_{pq} \chi(x, y) \quad (13)$$

unde

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & , \quad x \in [0, L_x]; \quad y \in [0, L_y] \\ V_0 & , \quad x < 0; \text{ si } x > L_x; \quad y < 0 \text{ si } y > L_y \end{cases} \quad (14)$$

În aproximația barierelor de potențial de înălțime infinită:

$$E_{pq} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{p^2}{L_x^2} + \frac{q^2}{L_y^2} \right) \quad (15)$$

iar energia totală este:

$$E = E(p, q, k_z) = E_c + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{p^2}{L_x^2} + \frac{q^2}{L_y^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = E_c + E_{pq} + E_{1D}(k_z) \quad (16)$$

Punctul cuantic

Pentru punctul cuantic, în care electronii sunt localizați de-a lungul celor trei axe într-un volum $L_x L_y L_z$ foarte mic, energia este:

$$E = E_c + E_{pqr} \quad (17)$$

În aproximația barierelor de potențial cu pereți infiniți E_{pqr} se scrie:

$$E_{pqr} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{p^2}{L_x^2} + \frac{q^2}{L_y^2} + \frac{r^2}{L_z^2} \right) \quad (18)$$

Gropi cuantice cuplate

Până acum am studiat o groapă semiconductoră izolată. Se pot obține însă (și aceasta este situația reală în dispozitivele electronice) structuri cu gropi cuantice multiple. Dacă bariera între două gropi vecine este suficient de subțire, tunelarea prin barieră devine apreciabilă și rezultă un sistem de *gropi cuantice cuplate*.

Pentru majoritatea semiconductorilor de interes, în structuri cu bariere având grosimea de aproximativ 10 nm (sau mai mult), cuplajul este slab și nivelele de energie ale gropilor individuale sunt foarte puțin modificate (figura 7a). În schimb, pentru o barieră cu grosimea de aproximativ 1 nm, apare un cuplaj puternic între gropile vecine (fig. 7b); funcțiile de undă corespunzătoare au o suprapunere apreciabilă, astfel încât electronul poate tunela de la o structură la alta.

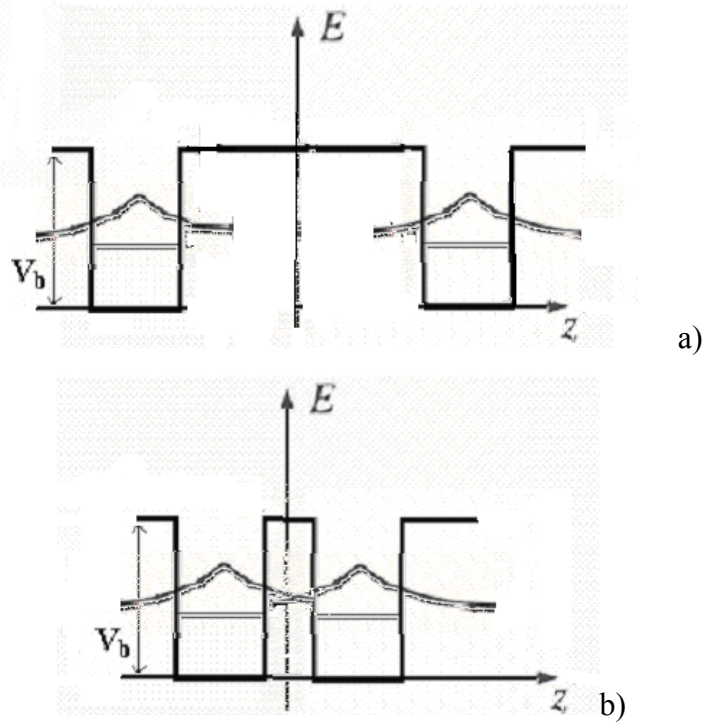


Fig.7

Pentru a determina energia E în prezența cuplajului, rezolvăm ecuația Schrödinger unielectronică:

$$H\psi(z) = E\psi(z) \quad (19)$$

unde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V^{(1)}(z) + V^{(2)}(z) \quad (20)$$

cu

$$V^{(j)}(z) = \begin{cases} 0 & \text{daca } z < z_j \text{ si } z > z_j + L \\ -V_0 & \text{pentru } z_j < z < z_j + L \end{cases}, \quad j=1,2 \quad (21)$$

(fig. 8)

În absența cuplajului, pentru fiecare groapă de potențial putem scrie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi_j}{dz^2} + V^{(j)}(z)\psi_j = E_1\psi_j, \quad j=1,2 \quad (22)$$

E_1 fiind energia stării fundamentale.

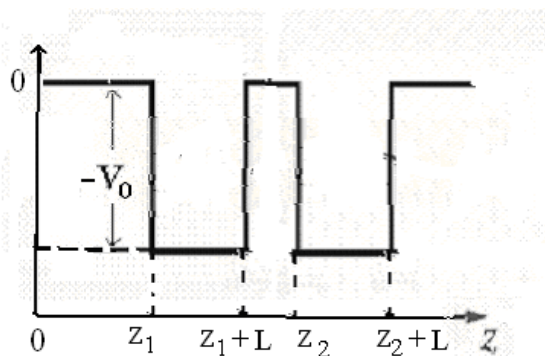


Fig.8

Se demonstrează ca energia electronului devine

$$E \cong E_1 \pm \Delta E \quad (23)$$

unde

$$-\Delta E = \langle \psi_1, V^{(1)} \psi_2 \rangle = \langle \psi_2, V^{(2)} \psi_1 \rangle \quad (24)$$

este integrala de cuplaj între funcțiile ψ_1 și ψ_2 .

Datorită cuplajului între gropile cuantice, nivelele de energie se despică simetric față de nivelul fundamental E_1 . Înlocuind valorile (12) în sistemul de ecuații (7), determinăm funcțiile de undă normate:

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2); \quad \psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2) \quad (25)$$

Aceste funcții sunt reprezentate în figura 9.

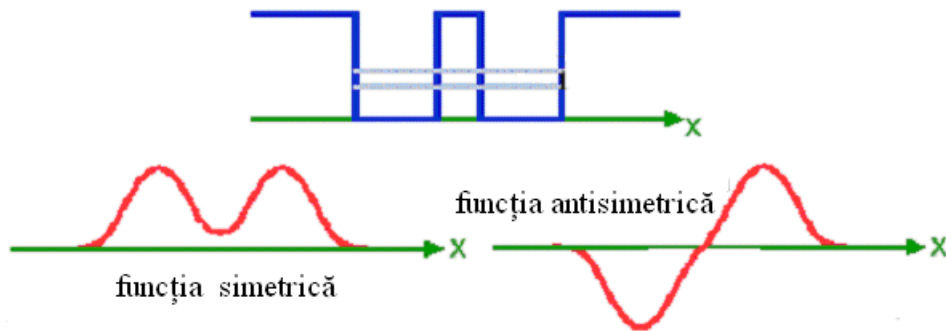


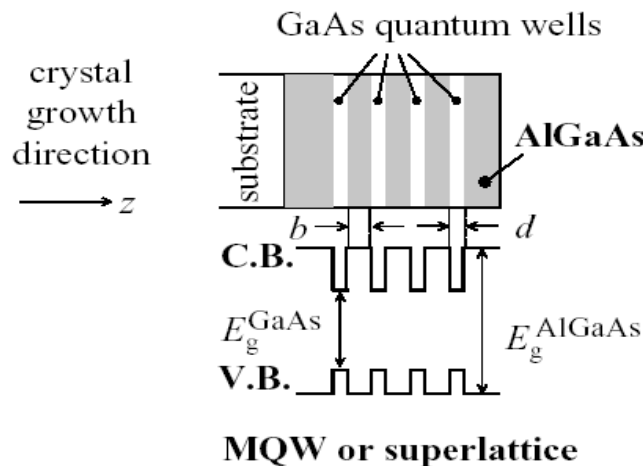
Fig.9

Se observă că stările fundamentale, cu energia $E_1 - \Delta E$, i se asociază o funcție de undă simetrică, în timp ce starea $E_1 + \Delta E$ este descrisă de o combinație liniară antisimetrică. Aceste funcții de undă nu mai descriu un electron localizat în groapa de potențial (1) sau în groapa de potențial (2); în ambele stări, electronul are aceeași probabilitate de localizare în ambele regiuni.

Superrețele

Presupunem o structură formată dintr-un număr mare de gropi de potențial, alternând cu bariere (dintr-un material semiconductor cu bandă interzisă largă).

În cazul unor bariere cu grosime L_b mare, stările electronice sunt aproximativ cele din gropile cuantice izolate; și în regiunea barierei, tunelarea este foarte slabă, așa încât nu apare un cuplaj între gropi. Aceasta este o *structură cu gropi cuantice multiple* (MQW – multiple quantum wells) fig. 10



MQW or superlattice

fig. 10

În cazul barierelor subțiri care separă N gropi cuantice, apare o extindere a funcțiilor de undă peste bariere; gropile cuantice sunt cuplate și – ca și în cazul cristalelor 3D – fiecare nivel energetic se despică în N subnivele, care formează o minibandă. Această structură se numește *superrețea* și este reprezentată în figura 11.

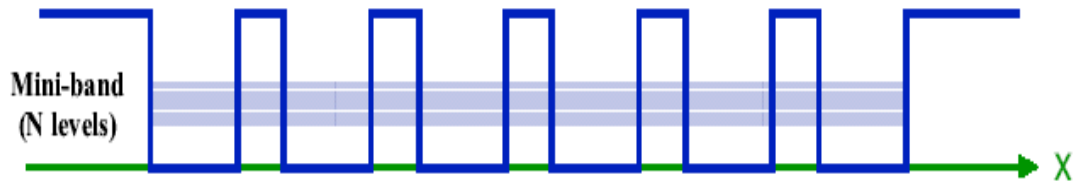


Fig.11

Modelul electronilor cvasilegați, aplicat în acest caz arată că:

- (i) stările cuantice nu mai sunt localizate în fiecare groapă cuantică, ci sunt stări "extinse" în întreaga structură;
- (ii) apar "minibenzi de energie permisă", alternând cu "minibenzi interzise";
- (iii) lărgimea minibenzilor depinde de cuplajul dintre gropile adiacente.