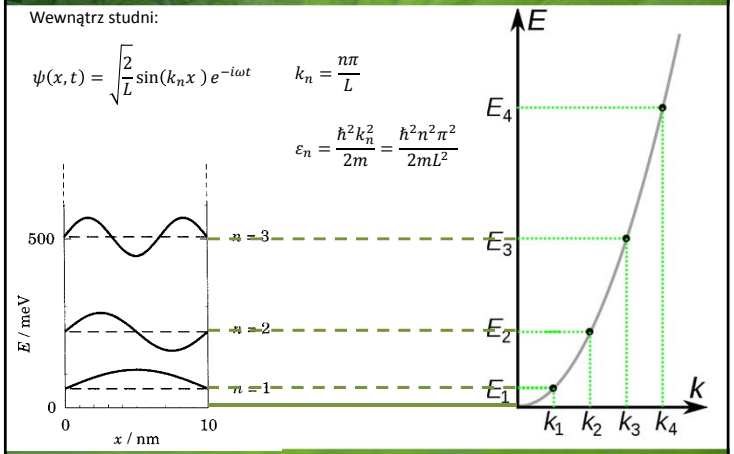
Heterostruktury półprzewodnikowe – studnie kwantowe (cd)

Studnia nieskończona

Wewnątrz studni:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)\, e^{-i\omega t} \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}$$

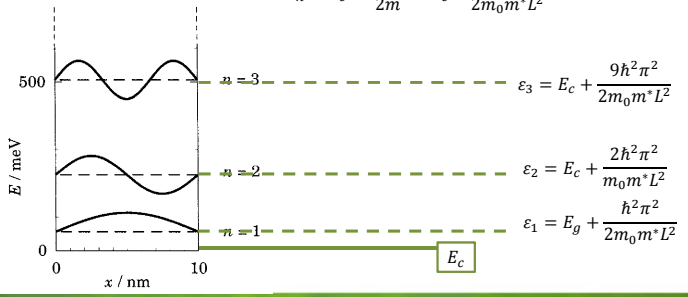


Studnia nieskończona

Wewnątrz studni:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)\, e^{-i\omega t} \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\varepsilon_n = E_c + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = E_c + \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_0 m^* L^2}$$

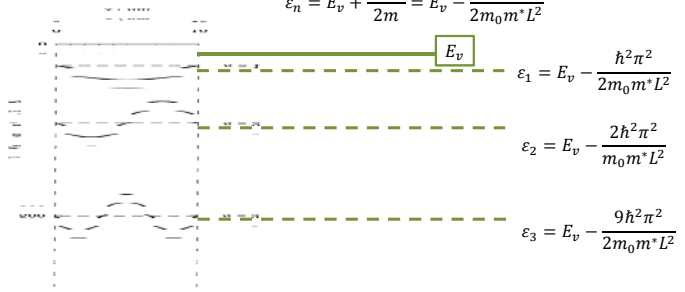


Studnia nieskończona

Wewnątrz studni:

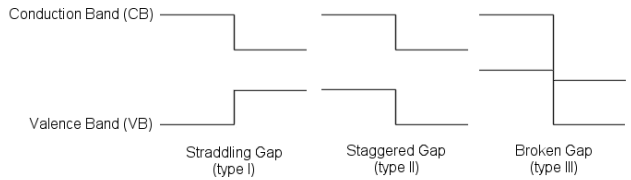
$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(k_n x)\, e^{-i\omega t} \qquad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\varepsilon_n = E_v + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = E_v - \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_0 m^* L^2}$$



Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:
- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład (binary, ternary, quaternary, quiternary alloys)
- kontrolując naprężenie



Jak się robi heterostruktury?

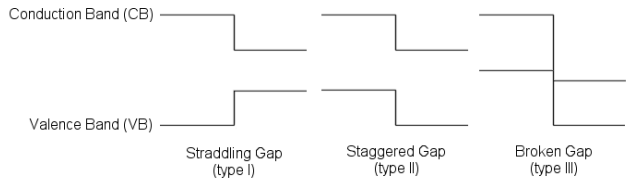
Liquid-phase (LPE)
wzrost z fazy ciekłej na podłożu w temperaturach niższych od temperatury topnienia hodowanego materiału. Półprzewodnik jest rozpuszczony w cieczy innego materiału, wzrost w warunkach bliskich równowagi roztworu i depozycji; prędkości wzrostu 0.1 to 1 μm/min.

Vapor-phase (VPE, CVD)
wzrost z fazy gazowej dzięki reakcjom chemicznym prekursorów na powierzchni, często dzielony ze względu na źródłowe gazy na wodorkową VPE i metalorganiczną VPE (MOCVD); prędkości wzrostu >10 -20 nm/min.

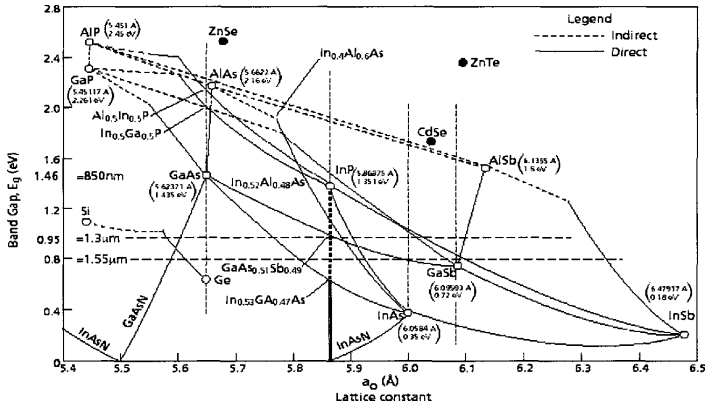
Molecular-beam (MBE)
Materiał źródłowy podgrzewany w komórkach produkuje strumień cząsteczek. W wysokiej próżni (10^{-8} Pa) cząsteczki docierają do podłoża i osadzają się na nim; prędkości wzrostu < 1 monowarstwa/s (1 μm/h).

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:
- wybierając materiał
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie



Heterostruktury półprzewodnikowe



Investigation of high antimony-content gallium arsenic nitride-gallium arsenic antimonide heterostructures for long wavelength application

Bandgap enginee

Valence band offset

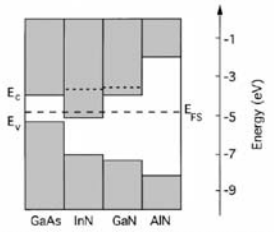


Fig. 4. Band offsets for group III-Nitrides. The dashed lines represent the Fermi energy for the maximum achievable free electron concentration in GaN and InN.

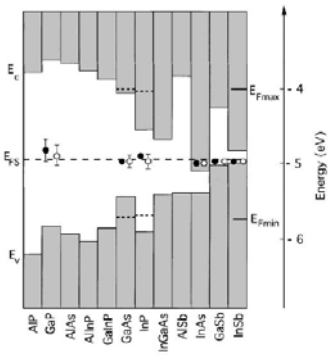
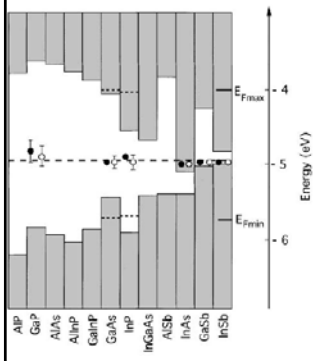


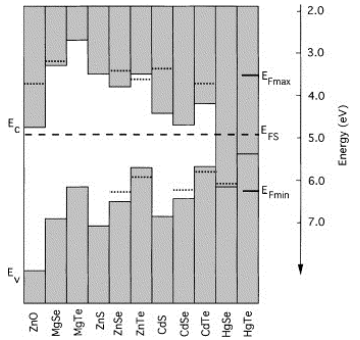
Fig. 1. Band offsets and the Fermi level stabilization energy (E_{FS}) in III–V compounds. The energy is measured relative to the vacuum level. The filled circles represent stabilized Fermi energies in heavily damaged materials, exposed to high energy radiation. The open circles correspond to the location of the Fermi energy on pinned semiconductor surfaces and at metal/semiconductor interfaces. The dashed lines show the location of the Fermi energy for a maximum equilibrium n- and p-type doping in GaAs and InP.

Walukiewicz Physica B 302–303 (2001) 123–134

Bandgap engineering

Valence band offset





Band offsets and the Fermi level stabilization energy
III–V compounds. The energy is measured relative to
uum level. The filled circles represent stabilized Fermi
in heavily damaged materials, exposed to high energy

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

Prawo Vegarda:
określa stałą sieci stopu dwóch kryształów „binarnych” A i B (np. GaAs i GaP albo GaN i AlN)

$$a = a_A(1-x) + a_B x$$

„prawo empiryczne”

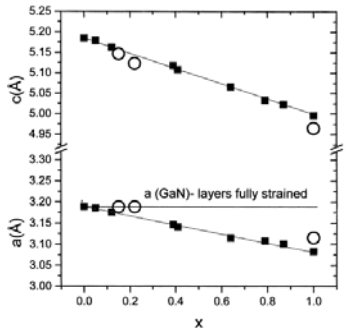


Fig. 5. Lattice parameters of 0.15–0.20 μm $Al_xGa_{1-x}N$ layers. Lines–Vegard's law between values for the AlN and GaN single crystals. Solid squares– layers on SiC. Open circles– layers on bulk GaN.

Bandgap engineering

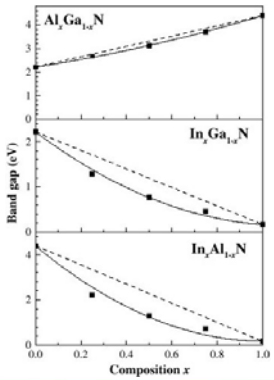
W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

Prawo Vegarda:
dot. przerwy energetycznej stopu „binarnego”:

$$E = E_A(1-x) + E_B x - bx(1-x)$$

b - tzw. „bowing” przerwy energetycznej



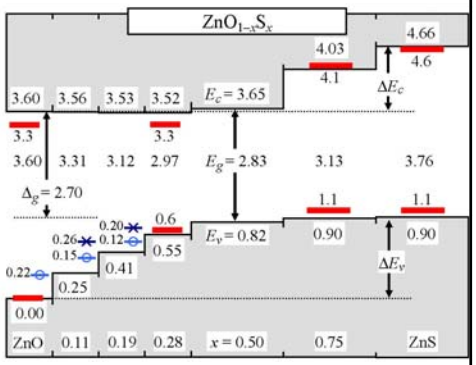
Z Dridi et al. Semicond. Sci. Technol. **18** No 9 (September 2003) 850-856

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

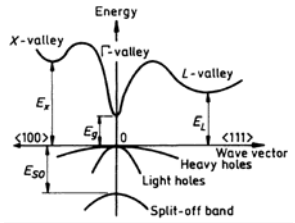
Valence band offset



Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie



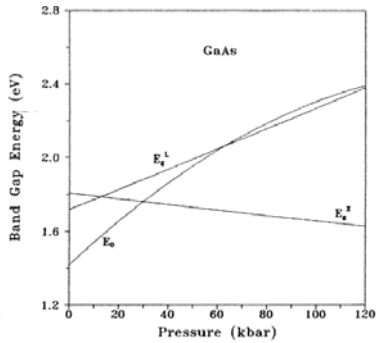
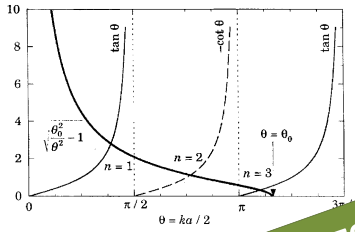


Fig. 2. Direct and indirect band gaps in GaAs as a function of pressure.

Studnia skończona

Prosty przypadek był…



Na ćwiczeniach

Studnia skończona

Heterostruktury mogą mieć różne masy efektywne w różnych obszarach:

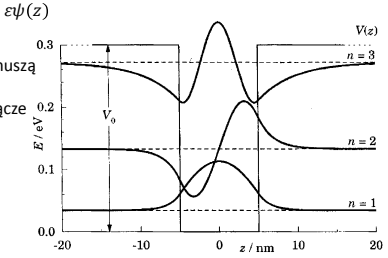
$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 m^*}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + \mathrm{V}_0(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z)$$

Okazuje się, że zamiana $m^* \to m(z)$ nie jest dobrym rozwiązaniem problemu (równanie przestaje być hermitowskie). Trzeba to zrobić inaczej, np.:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}\right]\psi(z) + \mathrm{V}_0(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z)$$

Warunki zszycia na granicy heterostruktur muszą być zmodyfikowane (z rozważań na temat zachowania ładunku prądy płynące przez złącze $I_W = I_B$ wtedy $v_W = v_B$):

$$\frac{1}{m_B}\frac{d\psi}{dz}\bigg|_{z=\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_W}\frac{d\psi}{dz}\bigg|_{z=\frac{a}{2}}$$



Studnia skończona

Wewnątrz studni: $-\frac{a}{2} < z < \frac{a}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0 m_W}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) = (E_n - E_W)\psi(z)$$

$$\psi(z,t) = C\begin{cases}\cos(k_n z)\\ \sin(k_n z)\end{cases} e^{-i\omega_n t}$$

$$k_n = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0 m_W (E_n - E_W)}$$

$$\kappa_n = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_0 m_B (E_B - E_n)}$$

Bariera:

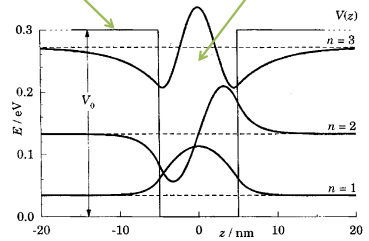
$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m\, m_B} = E_B - E_n = B$$

$$\psi(z) = D\exp(\pm\kappa_n z)$$

Warunki zszycia:

$$\frac{1}{m_B}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_W}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=\frac{a}{2}}$$

$$\frac{Ck}{m_W}\begin{cases}-\sin\left(k_n\frac{a}{2}\right)\\ \cos\left(k_n\frac{a}{2}\right)\end{cases} = -\frac{D\kappa}{m_B}\exp\left(k_n\frac{a}{2}\right)$$



Studnia skończona

Obliczamy:

$$\begin{cases}\psi_B(z)\big|_{z=\frac{a}{2}} = \psi_W(z)\big|_{z=\frac{a}{2}}\\ \frac{1}{m_B}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=\frac{a}{2}} = \frac{1}{m_W}\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=\frac{a}{2}}\end{cases}$$

$$\frac{Ck}{m_W}\begin{cases}-\sin\left(k_n\frac{a}{2}\right)\\ \cos\left(k_n\frac{a}{2}\right)\end{cases} = -\frac{D\kappa_n}{m_B}\exp\left(\kappa_n\frac{a}{2}\right)$$

$$\begin{cases}\tan\left(k_n\frac{a}{2}\right)\\ -\cot\left(k_n\frac{a}{2}\right)\end{cases} = \frac{m_W\kappa_n}{m_B k_n} = \sqrt{\frac{m_W}{m_B}\left(\frac{2m_0 m_W V_0}{\hbar^2 k_n^2} - 1\right)}$$

Oznaczamy $\theta = \frac{k_n a}{2}$, oraz $\theta_0^2 = \frac{m_0 m_W V_0 a^2}{2\hbar^2}$ (zależy tylko od m_W)

$$\begin{cases}\tan\theta\\ -\cot\theta\end{cases} = \sqrt{\frac{m_W}{m_B}\left(\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1\right)}$$

Studnia skończona

TA SAMA masa w barierze i studni:

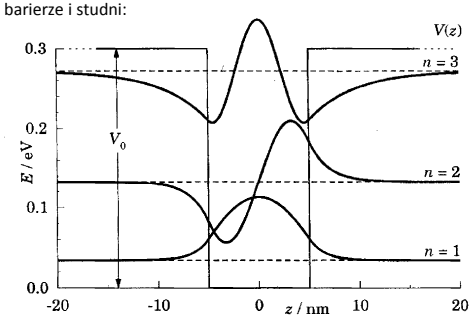


FIGURE 4.1. Finite square well in GaAs of depth $V_0 = 0.3$ eV and width $a = 10$ nm, showing three bound states.

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:

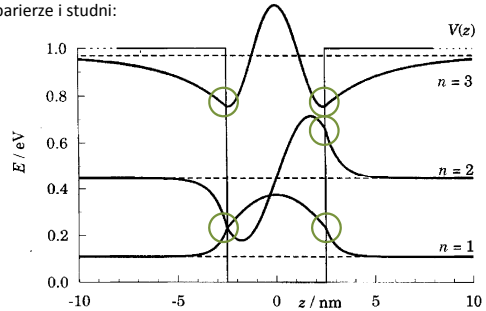
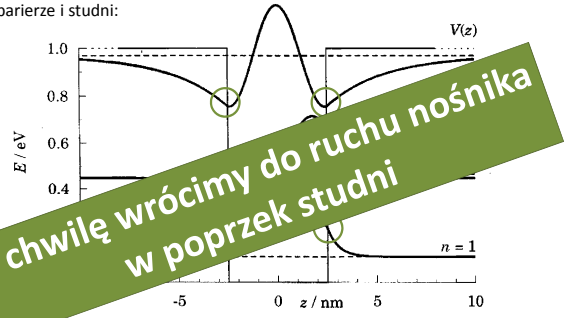


FIGURE 4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z, and effective masses $m_W = 0.067$ in the well and $m_B = 0.15$ in the barrier.

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:



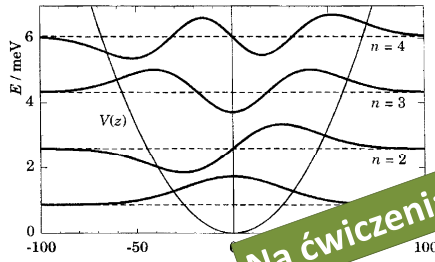
Za chwilę wrócimy do ruchu nośnika w poprzek studni

4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z, and effective masses $m_W = 0.067$ in the well and $m_B = 0.15$ in the barrier.

Potencjał harmoniczny

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]\psi(z) = \varepsilon\psi(z) \qquad V(z) = \frac{1}{2}Kz^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2 \qquad \varepsilon_n = \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$



Na ćwiczeniach

FIGURE 4.4. Potential well $V(z)$, energy levels, and [illegible] functions of a harmonic oscillator. The potential is generated by a magnetic field of 1 T acting on electrons in GaAs.

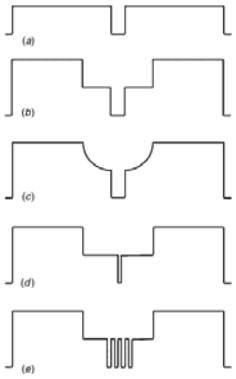


Figure 5. Schematic diagrams depicting the evolution of the conduction band structure in the transverse direction: (*a*) double heterostructure, (*b*) separate confinement heterostructure (SCH), (*c*) graded-index separate confinement heterostructure (GRIN-SCH), (*d*) single quantum well heterostructure (QWH), and (*e*) multiple quantum well (MQW).

The development of the semiconductor laser diode after the first demonstration in 1962 J J Coleman Semicond. Sci. Technol. 27 (2012) 090207

Potencjał harmoniczny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+\frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2\right]\psi(z)=\varepsilon\psi(z) \qquad \varepsilon_n=\left(n-\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$

Funkcja falowa

$$\phi_{n+1}(z)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left[\frac{m\omega_0}{\hbar\pi}\right]^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega_0 z^2}{2\hbar}\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}z\right)$$

Wielomiany Hermita

$$H_0(t)=1$$
$$H_1(t)=t$$
$$H_2(t)=4t^2-2$$
$$H_3(t)=8t^3-12t$$

Stanem podstawowym jest pakiet Gaussa – czy ten pakiet się rozmywa?

$$|\phi_1(z)|^2=\sqrt{\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{m\omega_0 z^2}{\hbar}\right)$$

Potencjał harmoniczny

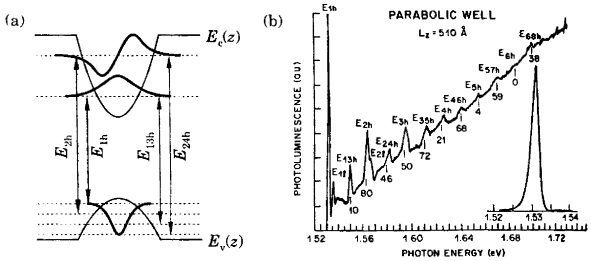


FIGURE 4.5. (a) Parabolic potential in both conduction and valence bands grown into GaAs by a graded composition of $Al_xGa_{1-x}As$. The band gap has been reduced in this sketch, and only heavy holes are shown. (b) Photoluminescence in parabolic wells. [From Miller et al. (1984).]

Studnia trójkątna

Studnia trójkątna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+eFz\right]\psi(z)=\varepsilon\psi(z)$$

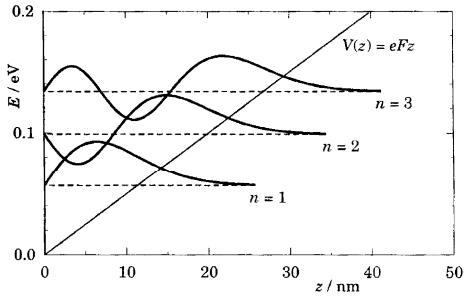


FIGURE 4.6. Triangular potential well $V(z)=eFz$, showing the energy levels and wave functions. The scales are for electrons in GaAs and a field of 5 MV m^{-1}.

Studnia trójkątna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+eFz\right]\psi(z)=\varepsilon\psi(z)$$

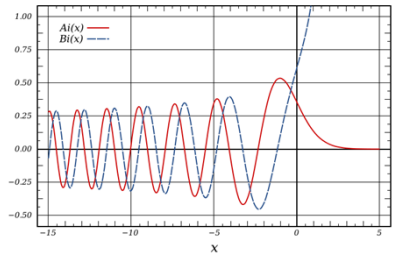
Przekształcenie:

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z)=\frac{2m}{\hbar^2}(eFz-\varepsilon)\psi(z)$$

Podstawiamy: $z_0=\left(\frac{\hbar^2}{2meF}\right)^{1/3}$

$$\varepsilon_0=eFz_0=\left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m}\right]^{1/3},\ \bar{z}=\frac{z}{z_0},\ \bar{\varepsilon}=\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$$

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z)=\frac{2m}{\hbar^2}(eFz-\varepsilon)\psi(z)$$



Równanie typu:

$$\frac{d^2}{dz^2}f(z)=zf(z)$$

Rozwiązaniem są funkcje Airy $Ai(z)$ i $Bi(z)$. Rozwiązaniami równania są miejsca zerowe funkcji $Ai(z)$ (trzeba tylko najpierw nieco uporządkować równanie).

Studnia trójkątna

$V(z)=eFz$ $\qquad$ $\varepsilon_n=c_n\left[\frac{(eFz)^2}{2m}\right]^{1/3}$

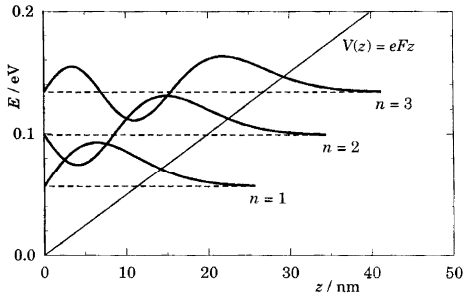


FIGURE 4.6. Triangular potential well $V(z)=eFz$, showing the energy levels and wave functions. The scales are for electrons in GaAs and a field of 5 MV m^{-1}.

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

Nazywana też metodą LG (Liouville–Green) **lub** JWKB / WKBJ (od Jeffreys-WKB) **lub** *phase integral method* **lub** przybliżenie półklasyczne (*semi-classical approximation*).

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

Co to jest potencjał wolnozmienny? Na pewno $V(x)=V_0=const$ jest. Rozwiązaniem dla tego potencjału jest fala płaska $\psi(x)=e^{ikx}$ - faza funkcji falowej $k(x)=k=const$ jest stała w całej przestrzeni $k^2=\frac{2m}{\hbar}[E-V_0]$

Zdefiniujmy $k^2(x)=\frac{2m}{\hbar}[E-V(x)]$ - chcemy, by faza $k(x)$ powoli zmieniała się w przestrzeni, tzn.

$$\left|\frac{dk}{dx}\right|\ll k^2$$

(taki warunek).

Szukamy rozwiązania w postaci $\psi(x)=e^{i\chi(x)}$ gdzie $\chi(x)$ to faza funkcji falowej.

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

Zdefiniujmy $k^2(x)=\frac{2m}{\hbar}[E-V(x)]$ - chcemy, by $k(x)$ powoli zmieniało się w przestrzeni.

Szukamy rozwiązania w postaci $\psi(x)=e^{i\chi(x)}$ gdzie $\chi(x)$ to faza funkcji falowej. Wstawiamy do równania Schrodingera:

$[\chi'(x)]^2-i\chi''(x)=\frac{2m}{\hbar}[E-V(x)]\equiv k^2(x)$ - to jest jeszcze równanie ścisłe.

Zerowe przybliżenie WKB zakłada, że $[\chi'(x)]^2\gg|\chi''(x)|$ czyli $\chi''(x)\approx 0$

$[\chi'(x)]^2=k^2(x)$ czyli $\qquad \chi(x)=\pm\int^x k(x')dx'$

Zwykle w metodzie WKB rozwija się dalej

$$[\chi'(x)]^2=k^2(x)+i\chi''(x)=k^2(x)+i[\chi'(x)]'\approx k^2(x)\pm i[k(x)]'$$

Stąd:

$$\chi'(x)\approx\pm k(x)\sqrt{1+\frac{ik'(x)}{k^2(x)}}\approx\pm k(x)+\frac{ik'(x)}{2k(x)}$$

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

Zwykle w metodzie WKB rozwija się dalej

$$[\chi'(x)]^2 = k^2(x) + i\chi''(x) = k^2(x) + i[\chi'(x)]' \approx k^2(x) \pm i[k(x)]'$$

Stąd:

$$\chi'(x) \approx \pm k(x)\sqrt{1+\frac{ik'(x)}{k^2(x)}} \approx \pm k(x) + \frac{ik'(x)}{2k(x)}$$

a stąd:

$$\chi(x) = \pm\int^x k(x')dx' + \frac{i}{2}\ln k(x)$$

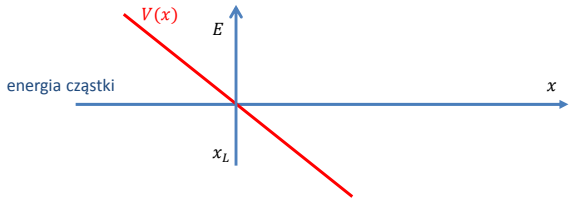
Dostajemy:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\exp\left[\pm i\int^x k(x')dx'\right]$$

Człon $1/\sqrt{k(x)}$ - gęstość prawdopodobieństwa szybko poruszającej się cząstki jest mała dla dużych k – dobrze!

Metoda WKB

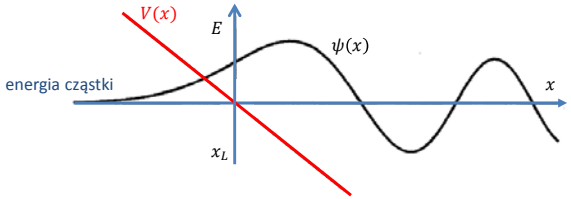
Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*



W przypadku punktów zwrotnych (np. krawędzi barier, studni) potencjał zmienia się szybko w porównaniu z długością fali $k(x)$ - trzeba rozszerzyć stosowanie metody WKB (daje się to zrobić przez przejście w punktach zwrotnych na płaszczyznę zespoloną). Innym sposobem jest rozwinięcie liniowe potencjału wokół punktu zwrotnego Δx_L - ścisłym rozwiązaniem dla potencjału liniowego są funkcje Airy. Trzeba potem zszyć rozwiązanie WKB z funkcjami Airy daleko od x_L.
Brzmi skomplikowanie, ale rozwiązanie jest dość proste (pojawia się dodatkowa faza).

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*



$$\psi(x) \sim \frac{2}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_L}^x k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right], \qquad x \gg x_L$$

$$\psi(x) \sim \frac{1}{\sqrt{\kappa(x)}}\exp\left[-\int_{x_L}^x \kappa(x')dx'\right], \qquad x \ll x_L$$

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

$$\psi(x) \sim \frac{2}{\sqrt{k(x)}}\cos\left[\int_{x_L}^x k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right], \qquad x \gg x_L$$

Przykłady:
1. Studnia o „twardych" ścianach – funkcja falowa musi znikać w punktach zwrotnych co daje warunek na całkowitą liczbę połówek fali

$$\int_{x_L}^{x_R} k(x')dx' = n\pi$$

Dla: $k(x) = const$ mamy $k_n = \frac{n\pi}{L}$

2. Studnia o „miękkich" ścianach – funkcja falowa na granicy x_L ma dodatkową fazę $\left(-\frac{\pi}{4}\right)$ i to samo na granicy x_R - kolejne $\left(-\frac{\pi}{4}\right)$. W sumie:

$$\int_{x_L}^{x_R} k(x')dx' = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi$$

Metoda WKB

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

$$\psi(x) \sim \frac{2}{\sqrt{k(x)}} \cos\left[\int_{x_L}^{x} k(x')dx' - \frac{\pi}{4}\right], \qquad x \gg x_L$$

3. Studnia trójkątna o „twardej" i „miękkiej" ścianie: $\int_{x_L}^{x_R} k(x')dx' = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi$

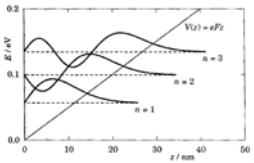
Np. studnia trójkątna: $V(x) = eFx$ wtedy $k_n(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_n - V(x))} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_n - eFx)}$

$$\int_{x_L}^{x_R} k_n(x')dx' = \int_0^{E_n/eF} \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E_n - eFx')}dx' = \left[\frac{2mE_n}{\hbar^2}\right]^{1/2} \frac{E_n}{eF} \int_0^1 \sqrt{1-s}\, ds = \quad s = \frac{x}{x_R}$$

$$\left[\frac{2mE_n}{\hbar^2}\right]^{1/2} \frac{E_n}{eF} \int_0^1 \sqrt{1-s}\, ds = \frac{2}{3}\left[\frac{2mE_n}{\hbar^2}\right]^{1/2} \frac{E_n}{eF}$$

$$\int \sqrt{1-x}\, dx = -\frac{2}{3}(1-x)^{3/2} + \text{constant}$$

$$E_n = \left[\frac{3}{2}\pi\left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3} \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m}\right]^{1/3}$$



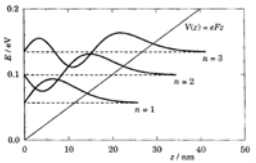
Studnia trójkątna

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*

TABLE 7.1 A comparison of various approximate methods for energy levels in a triangular potential, in units of $\varepsilon_0 = [(eF\hbar)^2/(2m)]^{1/3}$, and the exact results from the Airy function.

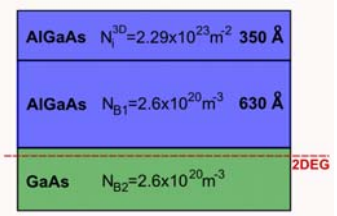
n	Airy function (exact)	WKB	Variational (Fang–Howard)	Variational (Gaussian)
1	2.3381	2.3203	2.4764	2.3448
2	4.0879	4.0818		
3	5.5206	5.5172		
⋮	⋮	⋮		
10	12.8288	12.8281		

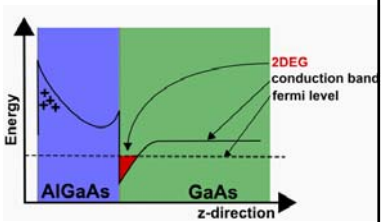
$$E_n = \left[\frac{3}{2}\pi\left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3} \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m}\right]^{1/3}$$



Studnia trójkątna

Metoda przybliżona WKB (Wentzel – Krammers – Brillouin) – dla potencjału *wolnozmiennego*





http://www.phys.unsw.edu.au/QED/research/2D_scattering.htm

$$E_n = \left[\frac{3}{2}\pi\left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{2/3} \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m}\right]^{1/3}$$

Metoda WKB

$$V(x) = V_b\left[1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2\right]$$

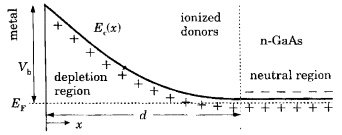


FIGURE 7.7. Schottky barrier in the conduction band $E_c(x)$ between a metal and n-GaAs. The potential is parabolic with height V_b and thickness d.

$$k_n(x) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV(x)} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_b\left[1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2\right]}$$

Wrócimy przy transporcie

TU 2012-10-27

131

Struktury niskowymiarowe

Pełen Hamiltonian w naszym wszechświecie ma 3 wymiary przestrzenne $(x, y, z, t) = (\vec{R}, t)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{R})\right]\psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dla $V(\vec{R}) = V(z)$ mamy:

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

Wzdłuż kierunków x i y mamy ruch swobodny:

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_x x)\exp(ik_y y)\,u(z)$$

Można pokazać (przy tablicy!), że ostatecznie energie własne potencjału $V(z)$ są w postaci:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]u(z) = \varepsilon u(z) \qquad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

131

Struktury niskowymiarowwe

$$\psi_{k_x,k_y,n}(x,y,z) = \exp(ik_x x)\exp(ik_y y)\,u_n(z) = \psi_{\boldsymbol{k},n}(\boldsymbol{r},z) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,u_n(z)$$

$$E_n(k_x,k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \qquad E_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$$

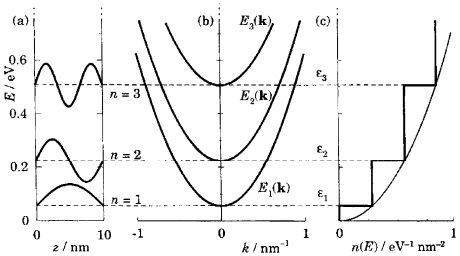


FIGURE 4.7. (a) Potential well with energy levels, (b) total energy including the transverse kinetic energy for each subband, and (c) steplike density of states of a quasi-two-dimensional system. The example is an infinitely deep square well in GaAs of width 10 nm. The thin curve in (c) is the parabolic density of states for unconfined three-dimensional electrons.

Struktury niskowymiarowwe

$$\psi_{k_x,k_y,n}(x,y,z) = \exp(ik_x x)\exp(ik_y y)\,u_n(z) = \psi_{\boldsymbol{k},n}(\boldsymbol{r},z) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,u_n(z)$$

$$E_n(k_x,k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \qquad E_n(\boldsymbol{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$$

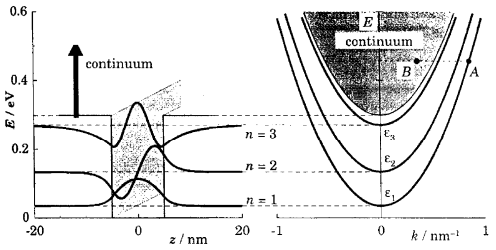


FIGURE 4.9. Quasi-two-dimensional system in a potential well of finite depth. Electrons with the same total energy can be bound in the well (A) or free (B).

Studnia skończona

INNA masa w barierze i studni:

Za chwilę wrócimy do ruchu nośnika w poprzek studni

4.12. Finite square well of depth $V_0 = 1$ eV, width $a = 5$ nm along z, and effective masses $m_W = 0.067$ in the well and $m_B = 0.15$ in the barrier.

Struktury niskowymiarowwe

Masa efektywa w barierze m_B i w studni m_W

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_{W,B}}\nabla^2 + V(\vec{R})\right]\psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dla rozseparowanej funkcji falowej: $\psi(\vec{R}) = \psi_{\boldsymbol{k},n}(\boldsymbol{r}, z) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\, u_n(z)$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_W}\nabla^2 + E_W\right]\psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_B}\nabla^2 + E_B\right]\psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$

Dostajemy (przy tablicy!):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_W}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_W} + E_W\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_B}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_B} + E_B\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

Struktury niskowymiarowwe

Czyli cząstka porusza się w studni, której potencjał zależy od $\boldsymbol{k}$, a właściwie $k = |\boldsymbol{k}|$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_W}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_W} + E_W\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_B}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_B} + E_B\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$V_0(k) = (E_B - E_W) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}\left(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_W}\right)$$

Np. w strukturze GaAs-AlGaAs $m_B > m_W$ więc studnia robi się „płytsza"

Cząstka „nabiera" częściowo masy efektywnej bariery:

$$E_n(k) = \varepsilon_n(k) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0m_W} \approx \varepsilon_n(k=0) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0m_{eff}}$$

$$m_{eff} \approx m_W P_W + m_B P_B$$

prawdopodobieństwo znalezienia cząstki

Struktury niskowymiarowwe

Czyli cząstka porusza się w studni, której potencjał zależy od $\boldsymbol{k}$, a właściwie $k = |\boldsymbol{k}|$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_W}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_W} + E_W\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0\, m_B}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m_0\, m_B} + E_B\right]u_n(z) = \varepsilon u_n(z)$$

$$V_0(k) = (E_B - E_W) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_0}\left(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_W}\right)$$

Np. w strukturze GaAs-AlGaAs $m_B > m_W$ więc studnia robi się „płytsza"

TABLE 4.2 Dependence on transverse wave vector $\mathbf{k}_\perp$ of the energies of the states bound in a well 5 nm wide and 1 eV deep, with effective mass $m_W = 0.067$ inside the well and $m_B = 0.15$ outside.

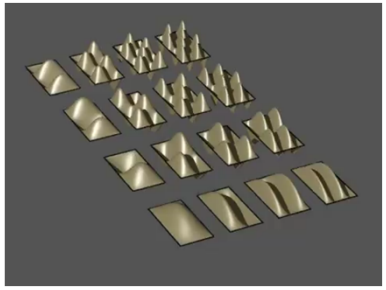
k (nm^{-1})	$\frac{\hbar^2k^2}{2m_0m_W}$ (eV)	$\frac{\hbar^2k^2}{2m_0m_B}$ (eV)	$V_0(k)$ (eV)	ε_1 (eV)	ε_2 (eV)	ε_3 (eV)	m_{eff}
0.0	0.000	0.000	1.000	0.108	0.446	0.969	0.067
0.5	0.142	0.064	0.921	0.106	0.435	0.919	0.069
1.0	0.570	0.254	0.685	0.096	0.397	—	0.076

Studnie 2D i 3D

Studnie 2D i 3D

Drut prostokątny $(a \times b)$– rozwiązania typu:

$$\varepsilon_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}\right)$$



http://wn.com/2d_and_3d_standing_wave

Studnie 2D i 3D

Studnia cylindryczna (o nieskończonych ścianach)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)\psi(r,\theta) = E\psi(r,\theta)$$

$$\psi(r,\theta) = u(r)\exp(il\theta)$$

głębokość potencjału zależy od l^2

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hbar^2 l^2}{2mr^2}\right]u(r) = Eu(r)$$

Co daje rozwiązania w postaci f. Bessla

$$r^2\frac{d^2u}{dr^2}+r\frac{du}{dr}+[(kr)^2-l^2]u = 0 \qquad J_l(kr)\sim\sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\cos\left(kr-\frac{1}{2}l\pi-\frac{1}{4}\pi\right)$$

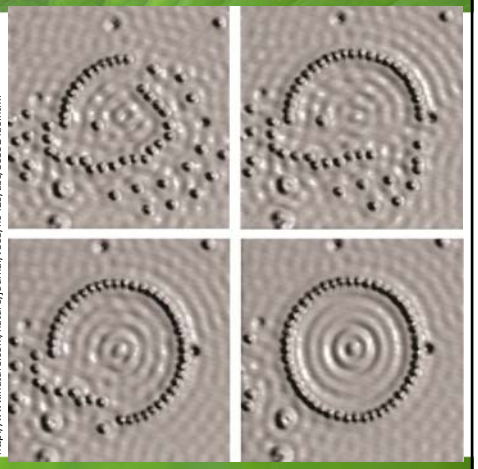
$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\phi_{nl}(r)\propto J_l\left(\frac{j_{l,n}r}{a}\right)\exp(il\theta) \qquad \varepsilon_{nl} = \frac{\hbar^2 j_{l,n}^2}{2ma}$$

Miejsca zerowe f. Bessela są w $j_{l,n}$

Studnie 2D i 3D

Studnia Cylindryczna



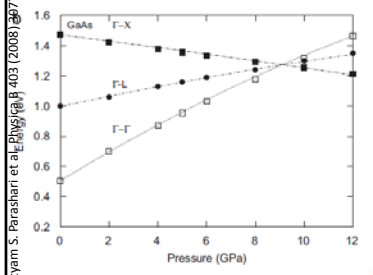
http://www.nature.com/nature/journal/v363/n6429/abs/363524a0.html

Studnia trójkątna

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie



Satyam S. Parashari et al. Physica B 403 (2008) 3077–3088

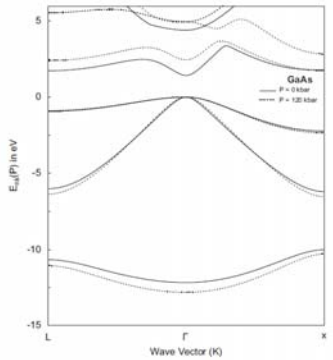


Fig. 3. Variation of the pressure dependent electronic energy band structure, $E_{nk}(P)$ for GaAs, at two different pressures, 0 kbar (solid line) and 120 kbar (dashed line).

Elabsy et al. Physica B 405 (2010) 3709–3713

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:

- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

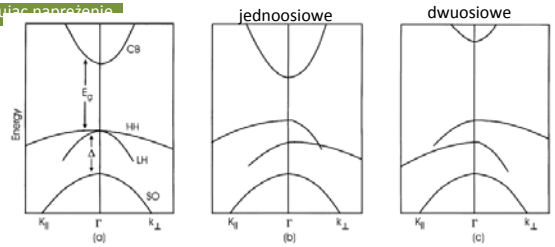


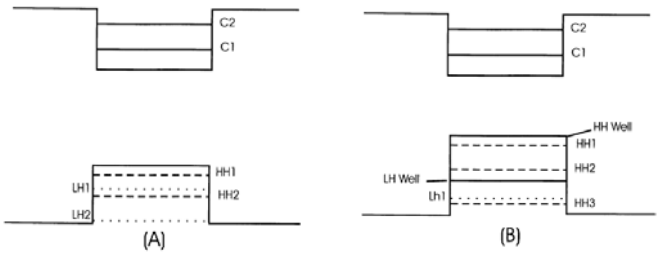
FIG. 6. (a) Schematic representation of the band structure of an unstrained direct-gap tetrahedral semiconductor (as in Fig. 2). (b) Under bi-axial tension, the hydrostatic component of the tension reduces the mean band gap, while the axial component splits the degeneracy of the valence band maximum and introduces an anisotropic valence band structure, with the highest band being light along the strain axis ($k_\perp$) and comparatively heavy perpendicular to that axis. (c) Under bi-axial compression the mean band gap increases and the valence splitting is reversed so the highest band is now heavy along the strain axis ($k_\perp$) and comparatively light perpendicular to it (reprinted with permission of[167], ©1989 Institute of Physics).

Prog. Quant. Electr. Vol. 21, No. 5, pp. 361-419, 1998

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:
- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

jednoosiowe

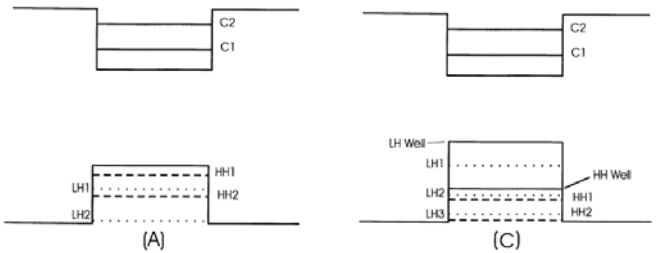


Prog. Quant. Electr. Vol. 21, No. 5, pp. 361±419, 1998

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:
- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład
- kontrolując naprężenie

dwuosiowe

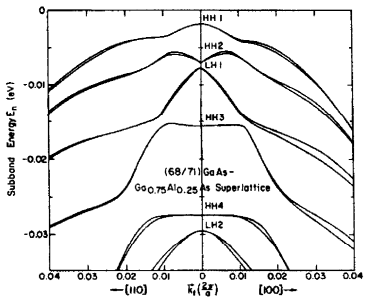


Prog. Quant. Electr. Vol. 21, No. 5, pp. 361±419, 1998

Pasma w krysztale

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



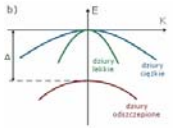
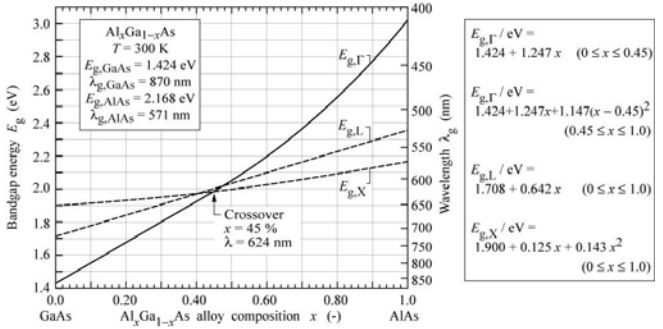


FIGURE 10.4. Valence-band structure in a multiquantum well as a function of **k** along two directions. The wells comprise 68 atomic layers of GaAs with barriers of 71 atomic layers of $Al_{0.25}Ga_{0.75}As$. [From Chang and Schulman (1985).]

D. Wasik.

TU 2012.10.10

Przejścia optyczne



$E_{g,\Gamma}$ / eV = $1.424 + 1.247\,x$ $(0 \le x \le 0.45)$

$E_{g,\Gamma}$ / eV = $1.424+1.247x+1.147(x-0.45)^2$ $(0.45 \le x \le 1.0)$

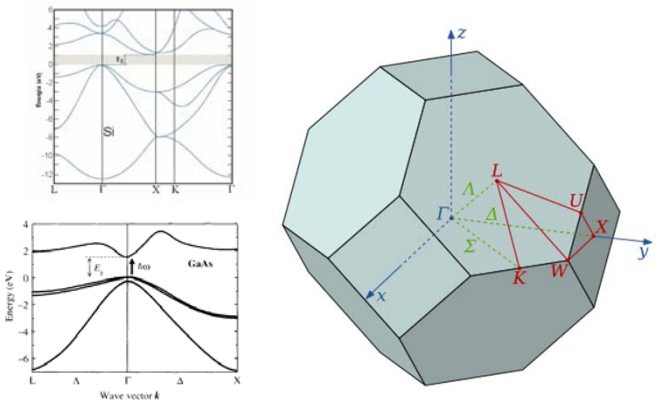
$E_{g,L}$ / eV = $1.708 + 0.642\,x$ $(0 \le x \le 1.0)$

$E_{g,X}$ / eV = $1.900 + 0.125\,x + 0.143\,x^2$ $(0 \le x \le 1.0)$

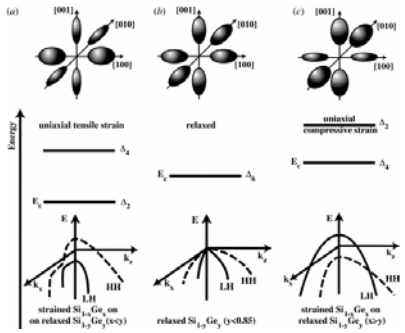
Fig. 12.7. Bandgap energy and emission wavelength of AlGaAs at room temperature. E_Γ denotes the direct gap at the Γ point and E_L and E_X denote the indirect gap at the L and X point of the Brillouin zone, respectively (adopted from Casey and Panish, 1978).

http://www.ecse.rpi.edu/~schubert/Light-Emitting-Diodes-dot-org/

Bandgap engineering



Trochę więcej na temat pasm



Trochę więcej na temat pasm

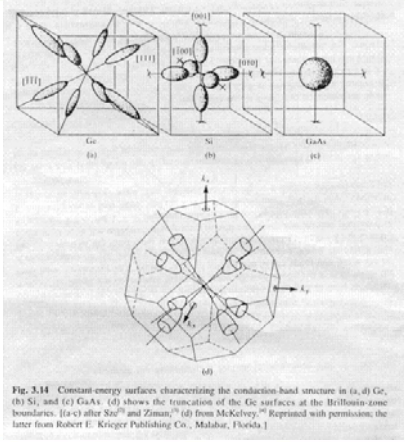


Fig. 3.14 Constant-energy surfaces characterizing the conduction-band structure in (a, d) Ge, (b) Si, and (c) GaAs. (d) shows the truncation of the Ge surfaces at the Brillouin-zone boundaries. [(a-c) after Sze[3] and Ziman,[4] (d) from McKelvey.[5] Reprinted with permission; the latter from Robert E. Krieger Publishing Co., Malabar, Florida.]

Przejścia optyczne

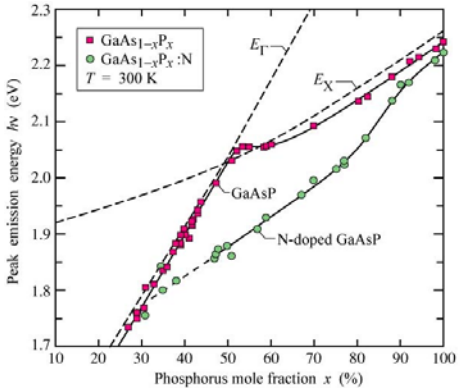


Fig. 12.2. Room-temperature peak emission energy versus alloy composition for undoped and nitrogen-doped GaAsP LEDs injected with a current density of 5 A/cm^2. Also shown is the energy gap of the direct-to-indirect ($E\Gamma$-to-E_X) transition. The direct–indirect crossover occurs at $x \approx 50\,\%$ (after Craford *et al.*, 1972).

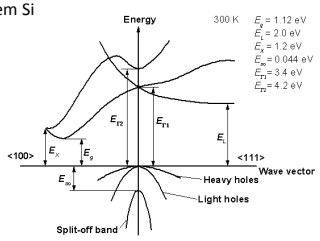
E. F. Schubert
Light-Emitting Diodes (Cambridge Univ. Press)
www.LightEmittingDiodes.org

http://www.ecse.rpi.edu/~schubert/Light-Emitting-Diodes-dot-org/

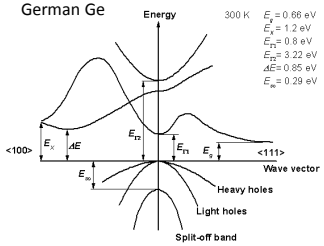
Trochę więcej na temat pasm

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si



German Ge



$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_\perp}\left[(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2\right] + \frac{\hbar^2}{2m_\parallel}(k_z - k_{0z})^2$$

http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe/bandstr.html

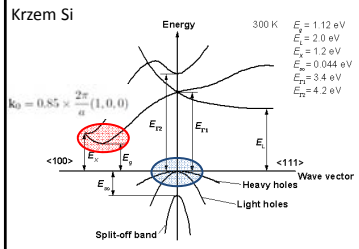
Trochę więcej na temat pasm

Komórka Vignera-Seitza

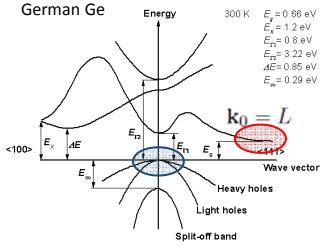
Trochę więcej na temat pasm

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si



German Ge



$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_\perp}\left[(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2\right] + \frac{\hbar^2}{2m_\parallel}(k_z - k_{0z})^2$$

http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe/bandstr.html

Trochę więcej na temat pasm

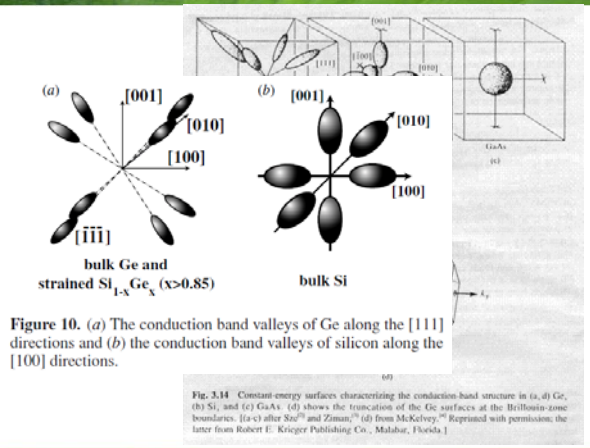


Figure 10. (*a*) The conduction band valleys of Ge along the [111] directions and (*b*) the conduction band valleys of silicon along the [100] directions.

Fig. 3.14 Constant-energy surfaces characterizing the conduction-band structure in (a, d) Ge, (b) Si, and (c) GaAs. (d) shows the truncation of the Ge surfaces at the Brillouin-zone boundaries. [(a-c) after Sze[29] and Ziman,[30] (d) from McKelvey.[30] Reprinted with permission; the latter from Robert E. Krieger Publishing Co., Malabar, Florida.]

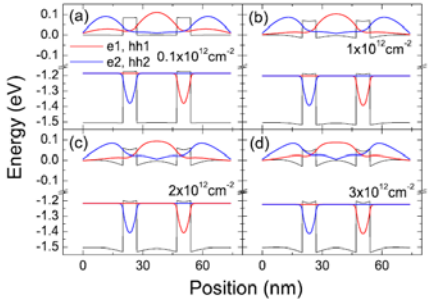


Figure 3. Calculated band structure of the $GaAs_{0.8}Sb_{0.2}/GaAs$ QW illustrated for a four different carrier densities of: (a) $n_{QW} = 0.1 \times 10^{-12}$ cm^{-2}, (b) 1×10^{-12} cm^{-2}, (c) 2×10^{-12} cm^{-2}, and (d) 3×10^{-12} cm^{-2}. The magnitudes of the single-particle electron and hole envelope wavefunctions of the two first states are also plotted.

Bandgap engineering

W jaki sposób możemy zmieniać strukturę pasmową heterostruktury:
- wybierając materiał (np. GaAs/AlAs)
- kontrolując skład (ternary, quaternary, quiternary alloys)
- kontrolując naprężenie