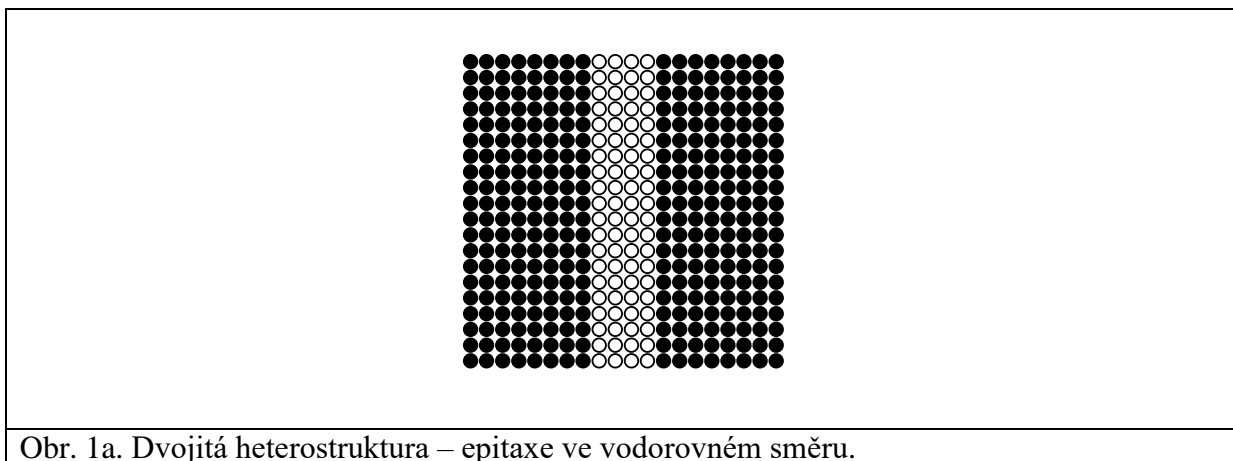


13. Heterostrukтуры I

„Atomárně přesné“ navázání různých materiálů je možné, díky moderním epitaxním technologiím.

Umístění atomů do předepsaných krystalových poloh

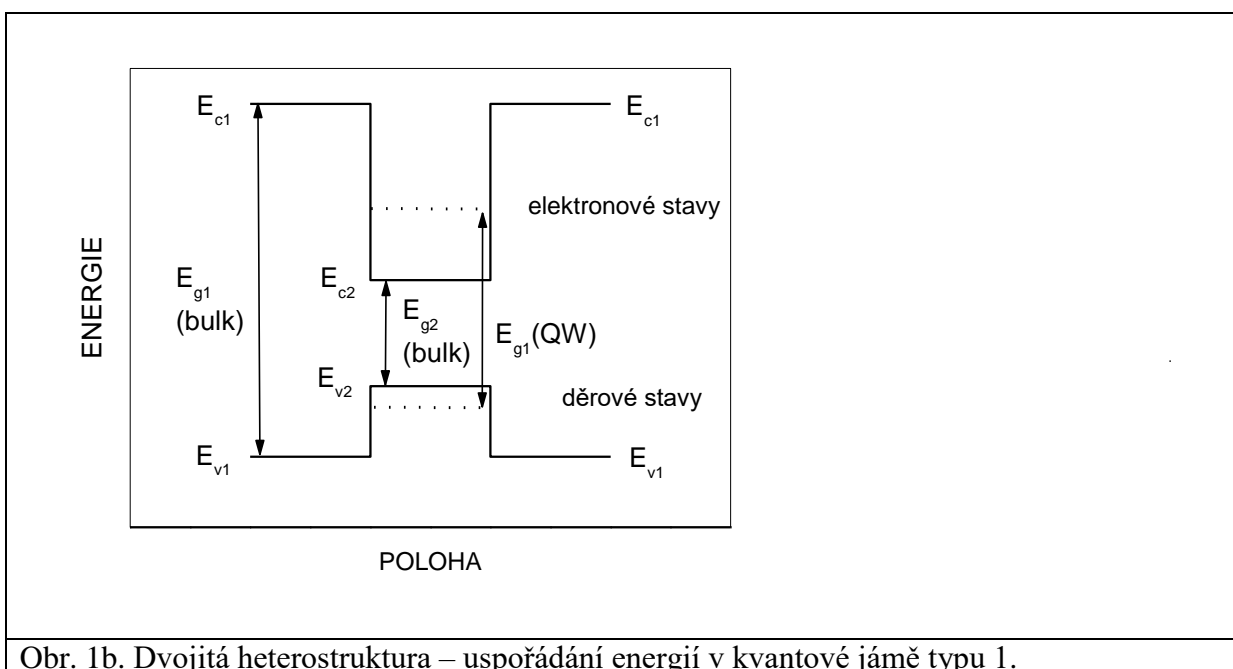


Obr. 1a. Dvojitá heterostruktura – epitaxe ve vodorovném směru.

V mřížkově nepřizpůsobených systémech: deformace a napětí až do kritické tloušťky.

Energie dna vodivostního a vrcholu valenčního pásu

Je-li gap v tenké střední vrstvě („jáma“) menší než v okolním materiálu („bariéra“), mohou se nespojitosti energií na rozhraní rozdělit podle následujícího obrázku. Je dobré se přesvědčit, že zvýšení energií valenčních stavů ve střední vrstvě znamená potenciálovou jámu pro díry.



Obr. 1b. Dvojitá heterostruktura – uspořádání energií v kvantové jámě typu 1.

Hrubý pohled na pásové offsety: dielektrické stínění a Pennův gap

Schopnost elektronů přesouvat se ve vnějším poli s frekvencí ω je dána permitivitou

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pc}^2}{\omega(\omega + i\gamma_c)} + \frac{e^2}{m\pi^2} \sum_{l,l'} \int_{BZ} d^3k \frac{F_{ll'}(k)}{\omega_{ll'}^2(k) - [\omega + i\gamma_{ll'}(k)]^2}, \quad (13.1)$$

kde

$$\omega_{pc}^2 = \frac{4\pi N_c e^2}{m_c}, \quad (13.1a)$$

$$\omega_{ll'}(k) = \frac{E_{l'}(k) - E_l(k)}{\hbar}, \quad (13.1b)$$

$$F_{ll'}(k) = \frac{2|\langle l', k | p | l, k \rangle|^2}{Vm\hbar\omega_{ll'}(k)}. \quad (13.1c)$$

Pro nulovou frekvenci a zanedbatelné tlumení γ je stínící schopnost elektronového systému dána součtem členů nepřímo úměrných kvadrátu mezipásových energií,

$$\varepsilon(0) \equiv \varepsilon_\infty = 1 + \frac{2e^2}{V\hbar m\pi^2} \sum_{l,l'} \int_{BZ} d^3k \frac{|\langle l', k | p | l, k \rangle|^2}{\omega_{ll'}^2(k)}. \quad (13.2)$$

Pro nejhrubší odhady použijeme Pennův model pro souvislost dlouhovlnné permitivity a mezipásové energie:

$$\varepsilon_\infty = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_g^2}, \quad (13.3)$$

kde

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi N_{val} e^2}{m}. \quad (13.3a)$$

Frekvence ω_p je analogií plasmové frekvence volně pohyblivých nábojů ze vztahu (13.1a), ovšem s koncentrací všech valenčních elektronů, hmotnost m je hmotností volného elektronu. V diamantové struktuře s kubickou mřížkovou konstantou a_0 je tato koncentrace rovna

$$N_{val} = \frac{8(\text{atomů}) \times 4(\text{elektrony})}{a_0^3}. \quad (13.3b)$$

Druhým parametrem ve formuli (13.3) je Pennův gap ω_g , reprezentující efektivní hodnotu mezipásových odstupů. Jeho hodnotu můžeme dostat z naměřené dlouhovlnné (elektronové) permitivity a z mřížkové konstanty. Následující tabulka obsahuje relevantní hodnoty pro několik polovodivých krystalů

Parametry vybraných kubických krystalů

a ... kubická mřížková konstanta
Eps8 ... statická dielektrická konstanta (elektronová)
Nval ... hustota valenčních elektronů
Ep ... plasmová energie valenčních elektronů
E-Penn ... Pennův gap

	a (Å)	eps8	Nval (10 ²³ cm ⁻³)	Ep (eV)	E-Penn (eV)
Si	5.43	11.70	2.00	16.6	5.07
Ge	5.65	16.00	1.77	15.6	4.04
Sn	6.47	24.00	1.18	12.8	2.66
GaP	5.44	9.10	1.99	16.5	5.81
AlAs	5.66	8.16	1.76	15.6	5.83
GaAs	5.66	10.90	1.76	15.6	4.96
InP	5.86	9.50	1.59	14.8	5.08
InAs	6.05	12.30	1.45	14.1	4.20
GaSb	6.10	14.40	1.41	13.9	3.81
InSb	6.47	15.70	1.18	12.8	3.33
ZnSe	5.65	5.90	1.77	15.6	7.06
ZnTe	6.10	7.30	1.41	13.9	5.55
CdTe	6.48	7.20	1.18	12.7	5.11
HgTe	6.48	9.30	1.18	12.7	4.42

Pozoruhodným rysem pásové struktury většiny běžných polovodivých materiálů je podobnost valenčních pásů. Tento fakt je podkladem pro následující předpověď uspořádání pásů na rozhraní dvou materiálů: nastavení vrcholu valenčního pásu mezi materiály 1 a 2 vede k odstupům energií (valenčnímu offsetu) rovnému polovině Pennových gapů,

$$\Delta E_v^* \approx \frac{\hbar(\omega_{g2} - \omega_{g1})}{2}. \quad (13.4)$$

Tyto hodnoty, spočtené z dat v předchozí tabulce, jsou ve třetím sloupci následující tabulky pro několik rozhraní mřížkově přizpůsobených heterostruktur. Zároveň uvádíme výsledky (dosti náročných) výpočtů SCIC (Self-Consistent Interface Calculations) s použitím pseudopotenciálů a výběr experimentálních dat.

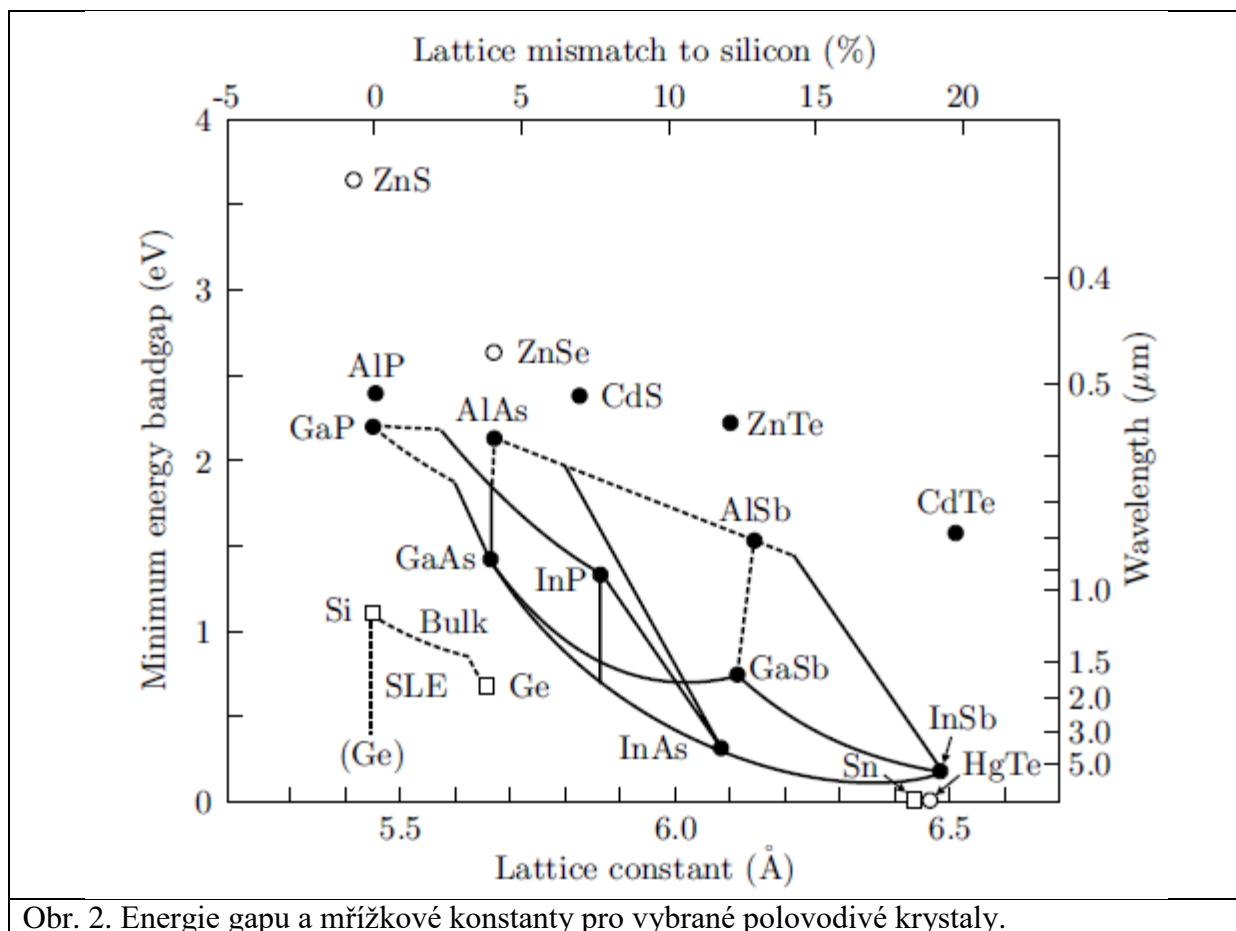
Valenční offsety pro mřížkově přizpůsobené heteropřechody

valenční pás níže	pás výše	Delta E_v^* (eV)	SCIC (eV)	výběr expt. (eV)
AlAs	GaAs	0.44	0.37	0.42, 0.55
InAs	GaSb	0.20	0.38	0.51, 0.57
GaP	Si	0.37	0.61	0.80
GaAs	Ge	0.46	0.63	0.56
AlAs	Ge	0.90	1.05	0.95
ZnSe	Ge	1.51	2.17	1.25, 1.52
CdTe	Sn	1.22		1.0
ZnSe	GaAs	1.05	1.59	1.10
CdTe	InSb	0.89		0.87
CdTe	HgTe	0.35	0.23	0.12, 0.35

Mřížkové přizpůsobení (podobnost mřížkových konstant) je důležitým faktorem ovlivňujícím kvalitu rozhraní a spolehlivost měření pásových energií. Je vidět, že ani v těchto relativně jednoduchých případech nejsou experimentální data z různých zdrojů v souladu. Vzhledem k extrémní jednoduchosti jsou odhady offsetů založené na Pennově gapu překvapivě dobré.

Mřížková konstanta a energie gapu

Trendy v závislosti gapu na mřížkové konstantě (zvážit také závislost na hydrostatickém a uniaxiálním/biaxiálním tlaku). „Bandstructure engineering“ s ternárními/kvaternárními sloučeninami.



Obr. 2. Energie gapu a mřížkové konstanty pro vybrané polovodivé krystaly.

Heteroepitaxní růst je relativně snadný pro materiály s blízkou mřížkovou konstantou.

Jednotlivé materiály mají vyznačený přímý nebo nepřímý gap.

Lokalizace nosičů

v jedné dimenzi – dvojrozměrná struktura (2D, kvantová jáma, QW)

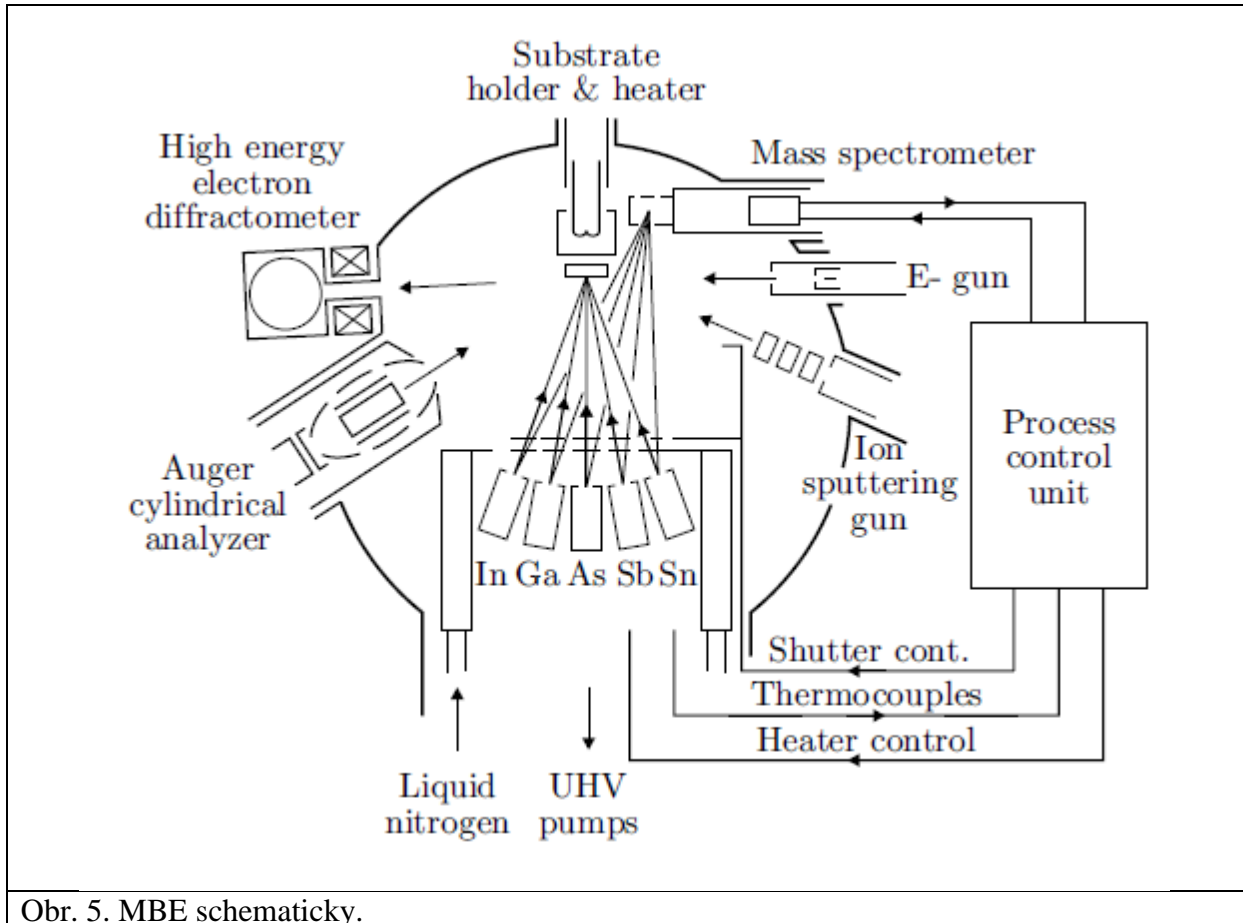
ve dvou dimenzích – jednorozměrná struktura (1D, kvantový drát, quantum wire)

ve třech dimenzích – nulazoměrná struktura (0D, kvantová tečka, QD)

Růst z molekulárních svazků v ultravysokém vakuu

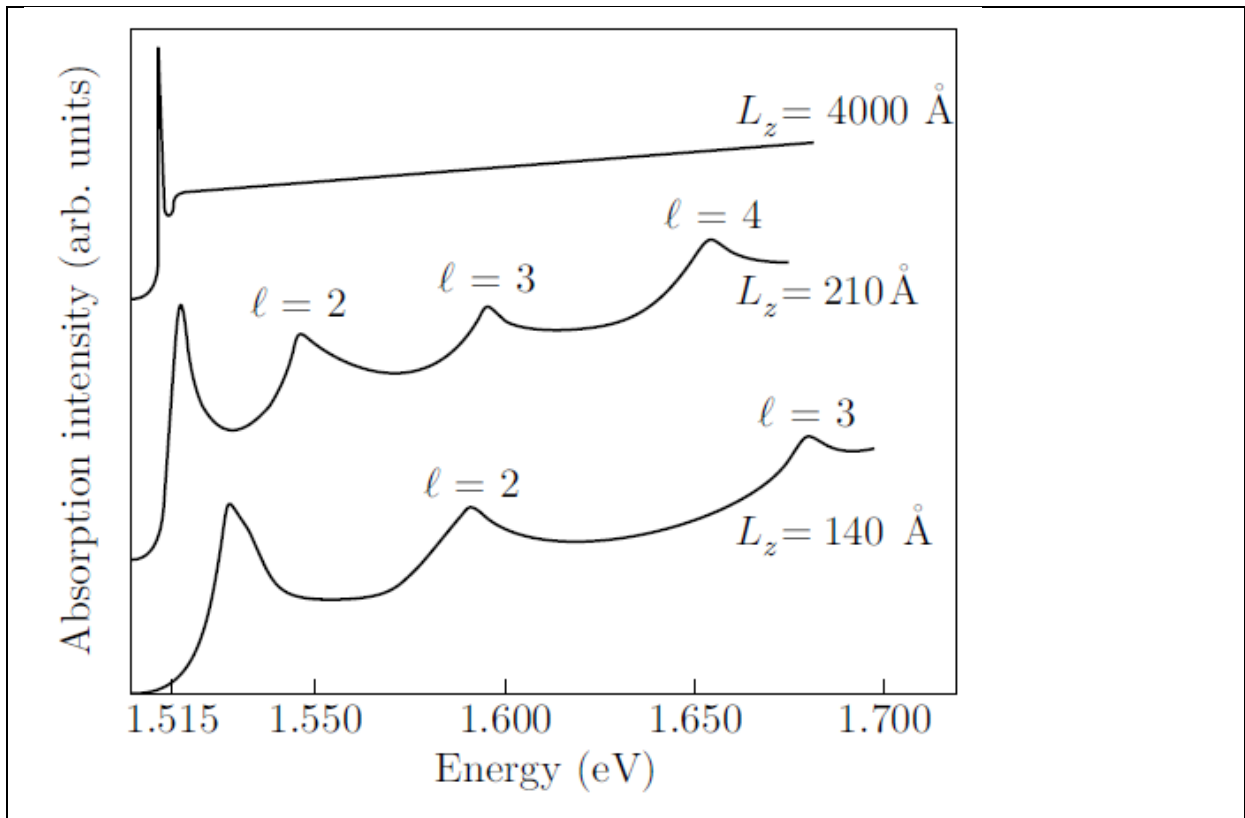
Pionýrská práce

L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61 (1970).



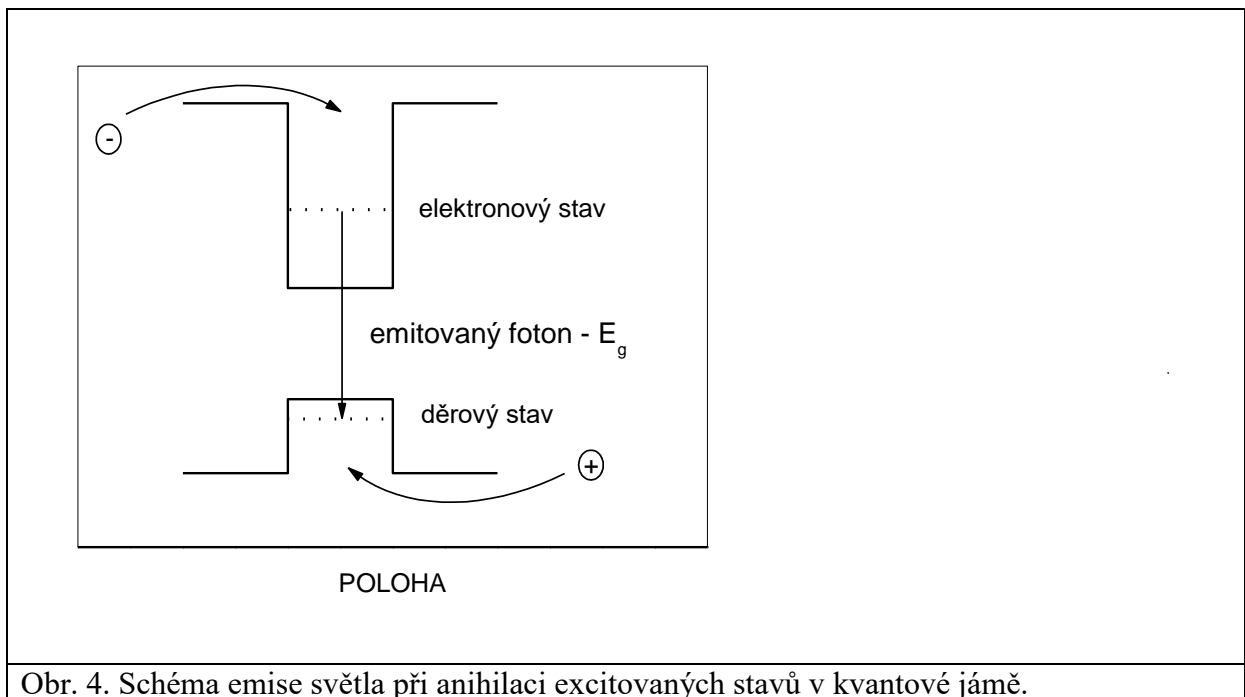
Obr. 5. MBE schematicky.

Jednou z nejdůležitějších metod experimentálního studia lokalizovaných stavů v kvantových jamách je optická absorpční/ reflexní a emisní spektroskopie.



Obr. 3. Absorpce v kvantových jamách AlGaAs/GaAs/AlGaAs při 4.2 K (Dingle et. al, 1974).

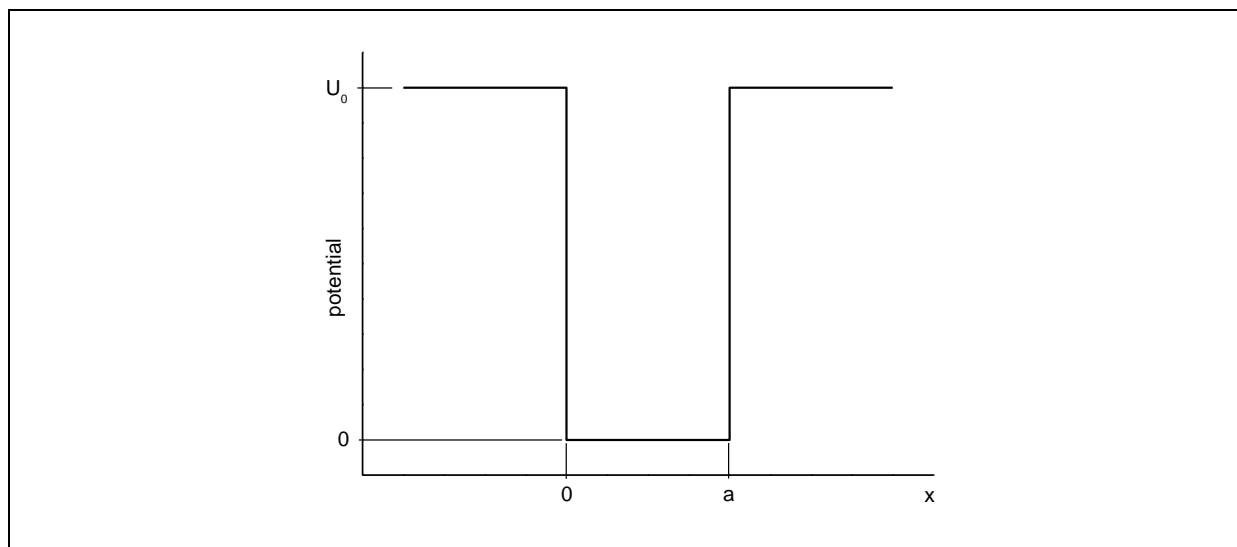
Schematicky je (elektro)luminiscence znázorněna v obr. 4.



Obr. 4. Schéma emise světla při anihilaci excitovaných stavů v kvantové jámě.

Orientační výpočet stavů v pravoúhlé kvantové jámě

Výpočet jednočásticových stavů v pravoúhlé jámě podle obr. 5 je snadný a instruktivní.



Obr. 5. Profil potenciálu pravoúhlé jámy.

Pro vázané stavy (kvazi)částice s hmotností m^* a energií E splníme stacionární Schroedingerovu rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (13.5)$$

následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A_1 e^{Qx} && \text{pro } x < 0 ; \\ \psi(x) &= B_3 e^{-Q(x-a)} && \text{pro } x > a ; \\ \psi(x) &= A_2 \cos(Kx) + B_2 \sin(Kx) && \text{pro } 0 \leq x \leq a . \end{aligned} \quad (13.6)$$

Zde musí být

$$Q^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (U_0 - E) , \quad K^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} E . \quad (13.7)$$

Spojitost vlnové funkce v $x=0, a$ vyžaduje splnění transcendentní rovnice

$$\tan(Ka) = \frac{-2(Qa)(Ka)}{(Qa)^2 - (Ka)^2} \quad (13.8)$$

s bezrozměrnými hodnotami

$$(Ka)^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} a^2 E, \quad (Qa)^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} U_0 a^2 - (Ka)^2 = C^2 - (Ka)^2. \quad (13.9)$$

Zde jsme zavedli symbol C pro bezrozměrnou veličinu, kterou by mohl charakterizovat název „kvantový obsah“ jámy“:

$$C = a \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} U_0}. \quad (13.10)$$

Tato veličina vystupuje v následujících souvislostech energie stavu E a parametrů vlnové funkce,

$$\frac{E}{U_0} = \frac{(Ka)^2}{C^2}, \quad Ka = C \sqrt{\frac{E}{U_0}}, \quad Qa = C \sqrt{1 - \frac{E}{U_0}}. \quad (13.11)$$

Rovnici (13.8) můžeme v této notaci převést na tvar

$$\tan(Ka) = \frac{-2 \frac{Ka}{C} \sqrt{1 - \left(\frac{Ka}{C}\right)^2}}{1 - 2 \left(\frac{Ka}{C}\right)^2} = \tan\left(\frac{Ka}{C} C\right), \quad (13.12)$$

odkud vyjde, s uvážením prvního ze vztahů (13.11) explicitní závislost veličiny C na relativní energii E/U_0 :

$$\tan(Ka) = \frac{-2 \frac{Ka}{C} \sqrt{1 - \left(\frac{Ka}{C}\right)^2}}{1 - 2 \left(\frac{Ka}{C}\right)^2} = \tan\left(\frac{Ka}{C} C\right), \quad (13.13)$$

odkud vyjde explicitní závislost veličiny C na relativní energii E/U_0 :

$$C = \frac{1}{\sqrt{\frac{E}{U_0}}} \tan^{-1} \frac{-2 \sqrt{\frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)}}{1 - 2 \frac{E}{U_0}}. \quad (13.14)$$

Vzhledem k periodicitě inverzní tangenty můžeme snadno spočítat sérii hodnot C , pro které mají (vázané) stavy zadanou energii $E/U_0 \leq 1$:

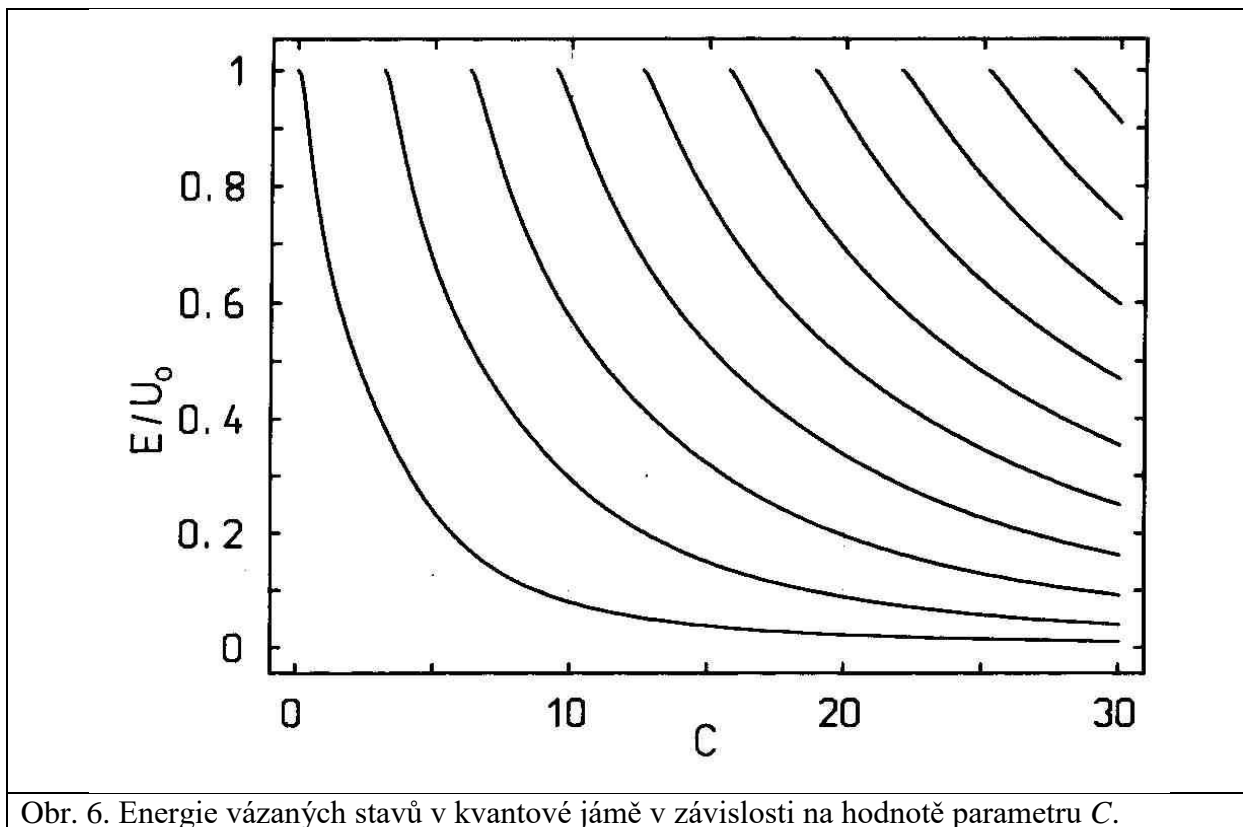
$$C_m = C_0 + \frac{m\pi}{\sqrt{\frac{E}{U_0}}}, \quad m = 0, 1, \dots \quad (13.15)$$

Počet vázaných stavů je

$$n = 1 + \text{int} \frac{C}{\pi}; \quad (13.16)$$

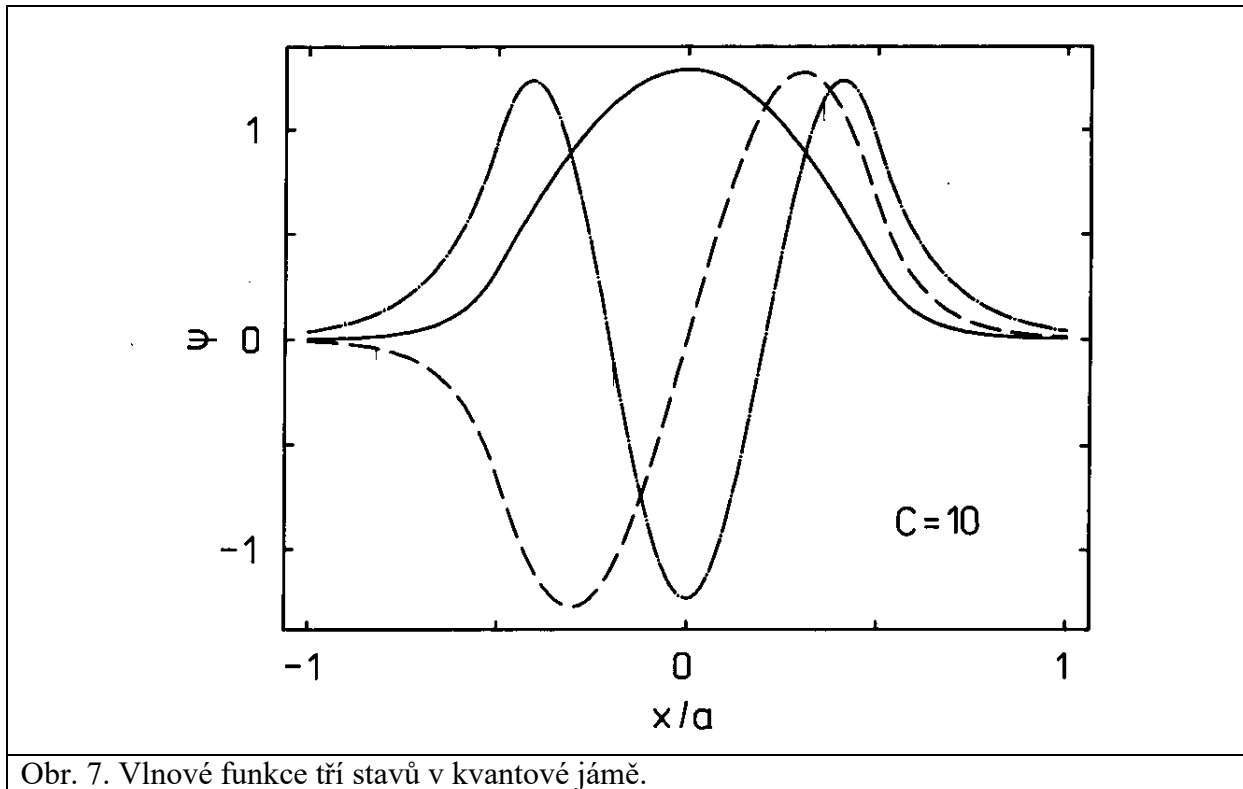
každá jáma tedy má alespoň jeden vázaný stav a jejich počet se zvětší o jedničku při vzrůstu hodnoty C o π .

Výsledek výpočtu závislosti energie na parametru C je v obr. 6.



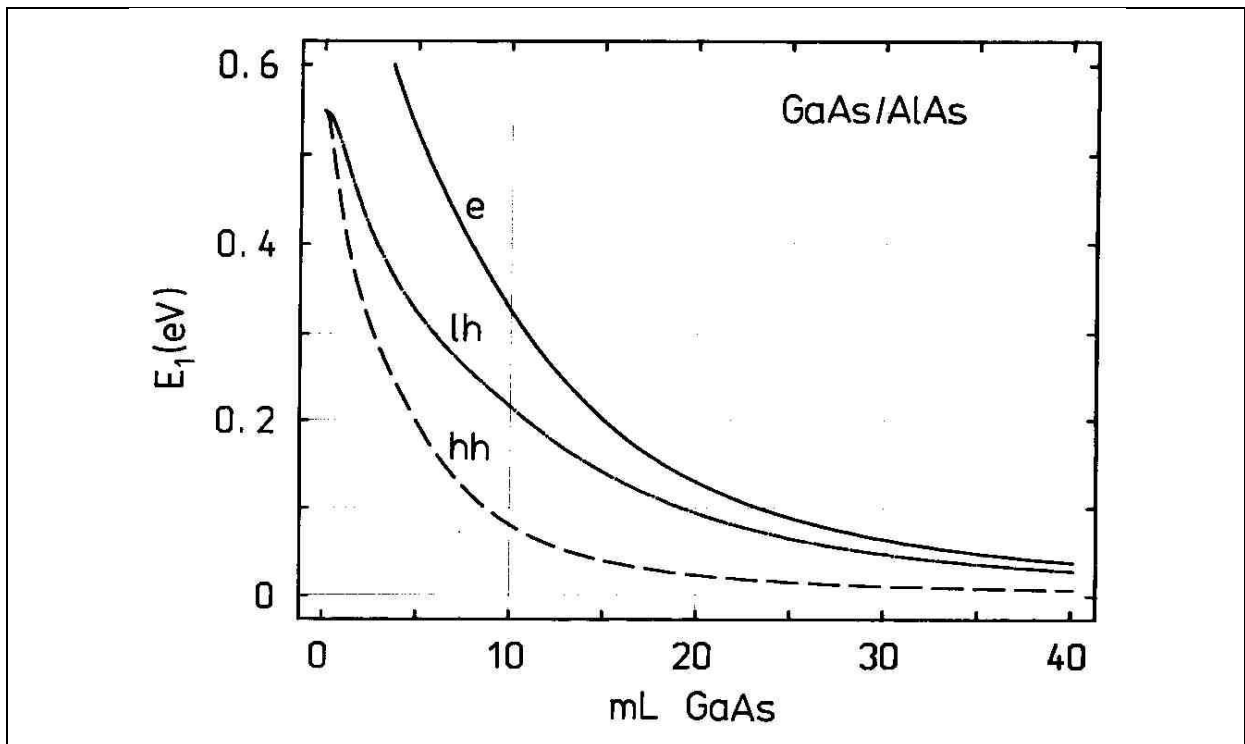
Obr. 6. Energie vázaných stavů v kvantové jámě v závislosti na hodnotě parametru C .

Normalizované vlnové funkce tří nejnižších stavů jámy s $C=10$ jsou znázorněny v obr. 7 (střed symetrie jámy byl v počátku souřadnice x , šířka jámy je a). Všimneme si symetrie (antisymetrie) vlnových funkcí pro sudé (liché) indexy energiových pásů.



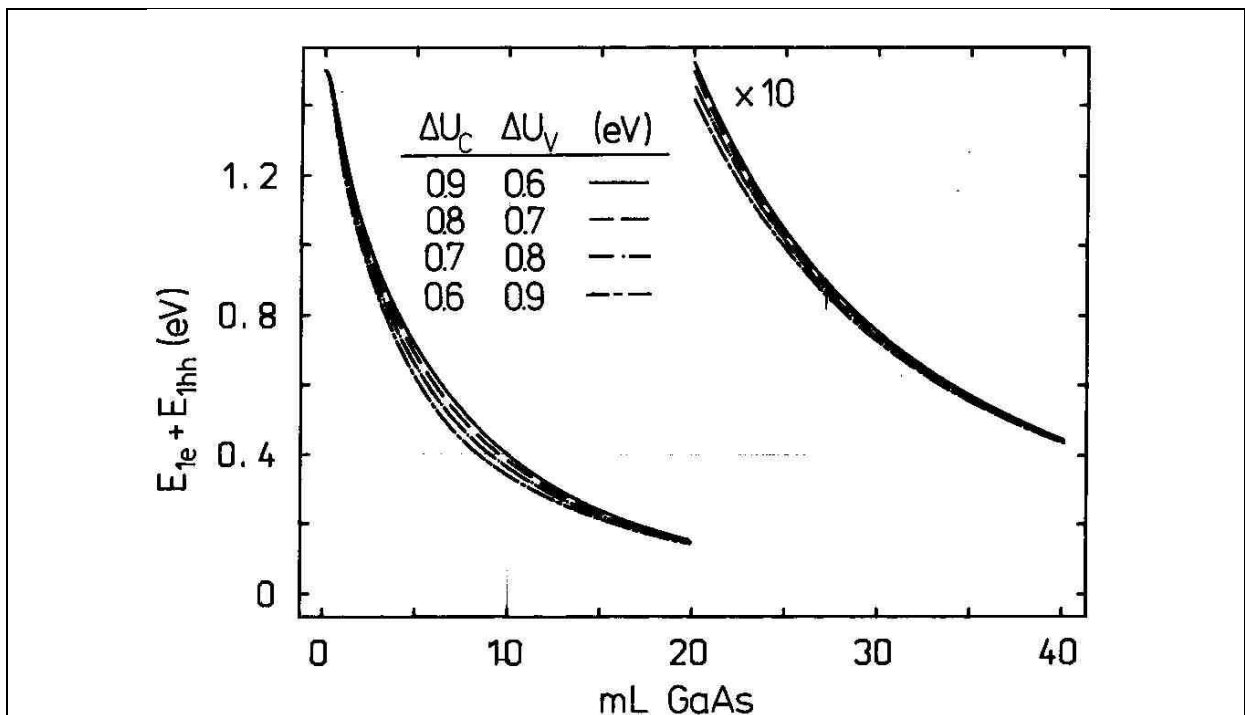
Obr. 7. Vlnové funkce tří stavů v kvantové jámě.

Pro oblíbený systém s jámou GaAs a bariérami AlAs jsou předpověděné lokalizační energie nakresleny v obr. 8, odděleně pro elektrony (e), těžké (hh) a lehké (lh) díry. Šířka jámy je vyjádřena v počtu monovrstev (mL), přitom předpokládáme orientaci (100).



Obr. 8. Vlnové funkce tří stavů v kvantové jámě.

Závislost energie nejnižšího (těžkoděrového) přechodu na šířce jámy je v obr. 10 pro různé rozdělení rozdílu gapů na valenční a vodivostní offset.



Obr.9. Energie nejnižšího přechodu v kvantové jámě.