

Introducere :

- În cursul precedent au fost abordate teme legate de structura energetică a solidului-bulk, cum ar fi:

- structura de benzi

- densitatea de stări în sisteme 3D

- concentrația de electroni și goluri în semiconductori

- Astăzi vom aborda sisteme cu dimensionalitate redusă (2D, 1D, 0D) și vom deduce

- spectrul energetic

- densitatea de stări corespunzătoare fiecărui sistem în parte;

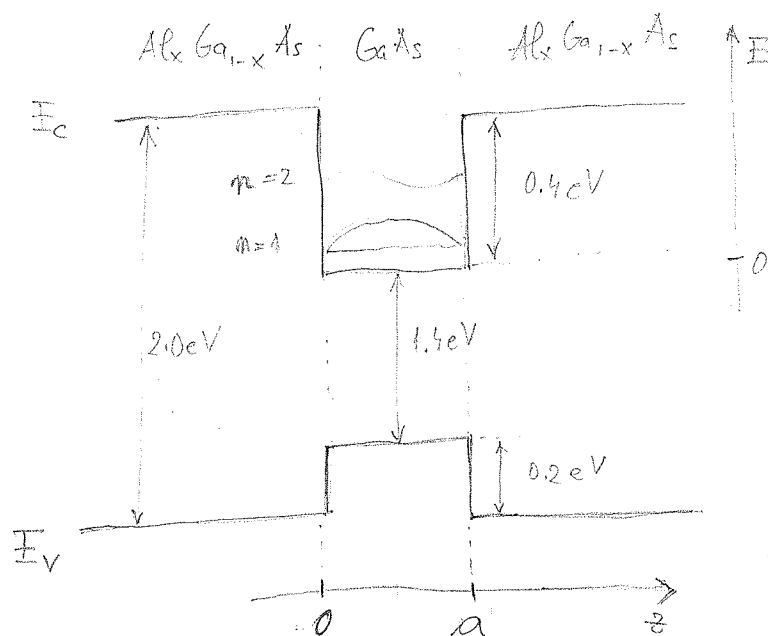
- concentrația de electroni pentru cazul în care semiconductorul este nedegenerat;

În final vom discuta efectele generate de confinare, în particular efecte asupra energiei de legătură a excitonului.

1) Sistem 2D:

Ca un prim exemplu de sistem 2D vom considera o structură tip "sandwich", formată dintr-un strat subțire de GaAs (de ordinul nanometrilor) aflat între două straturi mai groase de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Cele două materiale au benzi interzise diferite, 1.4 eV (GaAs), respectiv 2.0 eV ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $x \approx 0.3$)



a) Spectrul energetic:

Soluția ecuației Schrödinger în groapă de potențial:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(\vec{r}) \right] \cdot \Psi(\vec{r}) = E \cdot \Psi(\vec{r})$$

se poate scrie $\Psi(\vec{r}) = \Psi_x(x) \cdot \Psi_y(y) \cdot \Psi_z(z)$, deoarece potențialul $V(\vec{r})$ este separabil: $V(\vec{r}) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$,

Structura este invariantă în planul xOy , pentru un z fixat, așa încât putem alege:

$$V_x(x) = V_y(y) = 0, \quad (\forall) (x, y)$$

$$\text{i\c{a}r } V(\vec{r}) \equiv V_z(z)$$

Considerăm într-o prima aproximație ca Ψ_z corespunde soluțiilor din grupa rectangulară cu pereți infiniti

Avem:

$$\Psi(\vec{r}, E) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \cdot e^{ik_x \cdot x} \cdot \frac{1}{\sqrt{L_y}} \cdot e^{ik_y \cdot y} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} \cdot z\right)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot n^2 \cdot \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

- k_x, k_y se determină din condițiile de periodicitate impuse funcțiilor de undă

$$\Psi_x, \Psi_y, \quad \Psi_x(0) = \Psi_x(L_x) \rightarrow k_{x,i} = i \cdot \frac{2\pi}{L_x}$$

$$\Psi_y(0) = \Psi_y(L_y) \rightarrow k_{y,j} = j \cdot \frac{2\pi}{L_y}$$

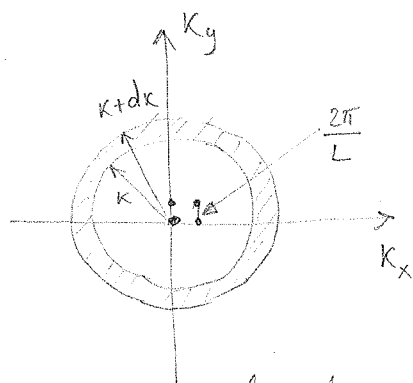
(normarea la cutie pe x, y)
 k_x, k_y variază practic continuu. $i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

- $E_{z,n} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot n^2 \cdot \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$ definesc subbenzile

$$k_{z,n} = n \cdot \frac{\pi}{a}, \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{variază discret}$$

b) Densitatea de stări 2D:

Pentru un $k_{z,n}$ fixat, avem următoarea reprezentare bi-dimensională a stărilor (k_x, k_y) :



Numărul de stări dN cu energii între E și $E+dE$, pe unitatea de arie:

$$dN = g_{2D}(E) \cdot dE = g_{2D}(k) \cdot dk = \frac{1}{L^2} \frac{2\pi k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} dk = \frac{k}{2\pi} \cdot dk$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot k^2 \quad \rightarrow \quad dE = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot 2k \cdot dk \quad \rightarrow \quad \frac{dk}{dE} = \frac{m^*}{\hbar^2 \cdot k}$$

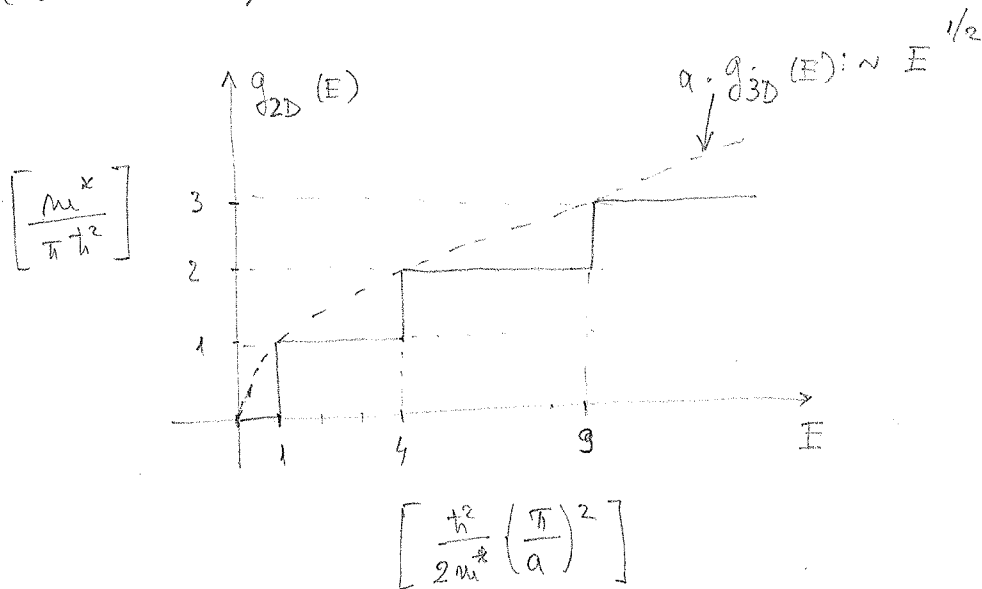
$$g_{2D}(E) = \frac{k}{2\pi} \cdot \frac{dk}{dE} = \frac{m^*}{2\pi \hbar^2}$$

Dacă luăm în considerare spinul, densitatea de stări se dublează:

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$$

Observație: $g_{2D}(E)$ este constantă!

Pentru celelalte subbenzi (nr. cuantice n) se obține câte o treaptă în densitatea de stări:



Comentarii:

- $g_{2D}(E) > 0$, pt $E > E_{z,1} > 0$, spre deosebire de cazul 3D.
- pe măsură ce a se mărește, nivelele $E_{z,n}$ se îndepărtă, astfel încât în limita $a \rightarrow \infty$ se obține cazul 3D, cu dependența $g_{3D} \sim E^{1/2}$

Caracterul 2D poate fi pus în evidență în experimente de absorbție optică sau transport electronic.

c) Alte exemple :

- groapa de potential parabolica (realizată prin ajustarea treptată a coeficientului x în $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)

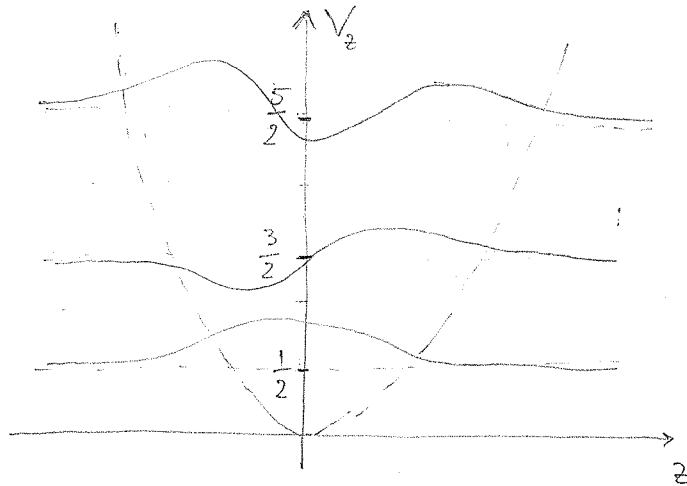
$$V_z(z) = \frac{1}{2} K \cdot z^2 \quad (\text{oscilator armonic})$$

$$E_{z,m} = \left(m - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, \quad \omega_0 = (K/m^*)^{1/2}$$

$$m = 1, 2, \dots$$

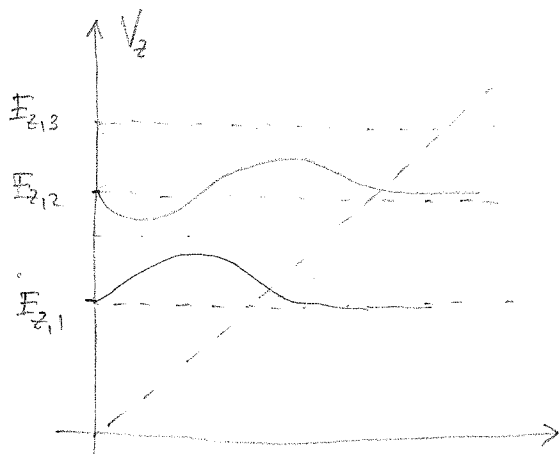
Nivelele sunt echidistante.

$$\psi_z(z) = e^{-\gamma^2/2} \cdot H(\gamma), \quad \gamma^2 = \frac{m^* \omega_0}{\hbar} \cdot z^2$$



- groapa de potential triunghiulară.

(apare în heterojuncțiuni $\text{AlGaAs} - \text{GaAs}$ dopate, în structuri MOS(FET))



$$V_z(z) = eFz, \quad F = \text{câmp electric}$$

$$E_z \approx \left[\frac{3}{2} \pi \left(m - \frac{1}{4}\right) \right]^{2/3} \cdot \left(\frac{e^2 F^2 \hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3}$$

$$m = 1, 2, \dots$$

$$E_z \sim \left(m - \frac{1}{4}\right)^{2/3}$$

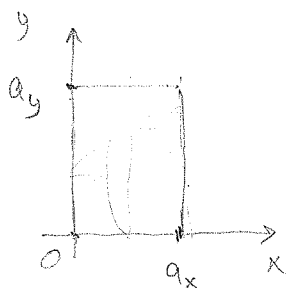
Distanta dintre nivele se micșorează cu creșterea indicelui m .

2) Sisteme 1D:

În cazul sistemelor 1D, electronii sunt confinați în două direcții, mișcându-se liber pe cea de a treia direcție.

Un exemplu de sistem 1D este firul cuantic, care este asemănător ghidului de unde electromagnetice.

a) Firul cuantic cu secțiune dreptunghiulară:



$$D = \left\{ (x, y, z) \mid \begin{array}{l} 0 < x < a_x, \\ 0 < y < a_y, \\ \neq z \end{array} \right\}$$

$$V(x, y, z) = V_{xy}(x, y), \quad (x, y, z) \in D$$

$$V(x, y, z) = \infty, \quad (x, y, z) \notin D$$

$$\Psi(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ik_z z} \cdot \Psi_{xy}(x, y) \quad \text{soluția ec. S. 3D.}$$

Introducând soluția ec. S. 3D în ec. S., după separarea variabilelor, obținem ec. 2D în planul xOy .

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_{xy}(x, y) \right] \cdot \Psi_{xy}(x, y) = E_{xy} \cdot \Psi_{xy}(x, y)$$

Dacă $V_{xy}(x, y) = \text{constant} = 0$:

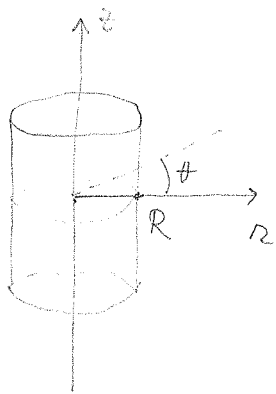
$$E_{xy, n_1, n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2}{a_x^2} + \frac{n_2^2}{a_y^2} \right) \quad \text{în planul } xOy$$

$$\Psi_{xy, n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{a_x}} \sin\left(n_1 \frac{\pi}{a_x} x\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{a_y}} \sin\left(n_2 \frac{\pi}{a_y} y\right)$$

Energia totală 3D:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + E_{xy, n_1, n_2}$$

b) Fin cuantic cilindric:



$$D = \left\{ (r, \theta, z) \mid 0 < r < R \right\}$$

$$V(r, \theta, z) = V_R(r), \quad (r, \theta, z) \in D$$

$$V(r, \theta, z) = \infty, \quad (r, \theta, z) \notin D$$

Soluția ec. Schrödinger 3D:

$$\Psi(r, \theta, z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ik_z z} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} \cdot \Psi_R(r), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

După separarea variabilelor se obține ec. S. 1D:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) + V_R(r) \right] \cdot \Psi_R(r) = E_{R\theta} \cdot \Psi_R(r)$$

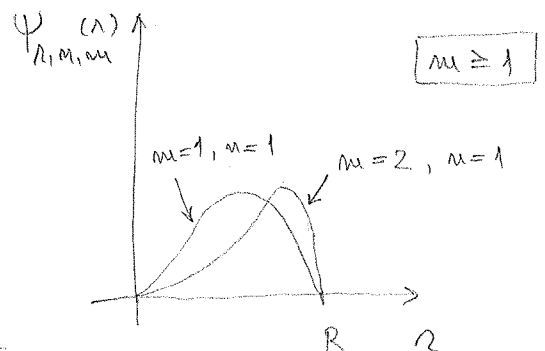
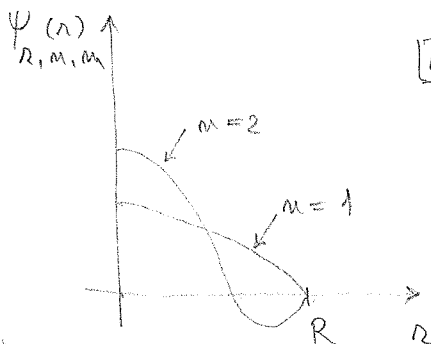
Dacă $V_R(r) = \text{constant} = 0$

$$E_{R\theta, m, m} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \left(\frac{\alpha_{mm}}{R} \right)^2, \quad m = 1, 2, \dots$$

α_{mm} = zero-ul de ordin m al funcției

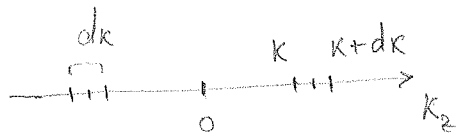
Bessel de ordinul m , $J_m(r)$

$$\Psi_{R, m, m}(r) = \frac{\sqrt{2}}{R \cdot J_{|m|+1}(\alpha_{mm})} \cdot J_m\left(\alpha_{mm} \cdot \frac{r}{R}\right)$$



c) Densitatea de stări 1D:

Pentru k_{x,m_1} și k_{y,m_2} fixate, numai vectorul de undă k_z poate varia (când energia variază):



Numarul de stări dN cu energie între E și $E+dE$, pe unitatea de lungime:

$$dN = g_{1D}(E) \cdot dE = g_{1D}(k) \cdot dk = \frac{1}{L} \cdot \frac{2}{\frac{2\pi}{L}} \cdot dk = \frac{1}{\pi} dk$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \rightarrow dE = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot 2k dk \rightarrow$$

$$\rightarrow dk = \frac{m^*}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{k} dE = \frac{m^*}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2m^* E}} dE$$

Rezultă, dacă includem și spinul

$$dN = g_{1D}(E) \cdot dE = \frac{1}{\pi \hbar} \cdot \sqrt{\frac{2m^*}{E}} \cdot dE$$

$$\text{Asadar, } g_{1D}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}}, \quad E \equiv E_z$$

Comentarii:

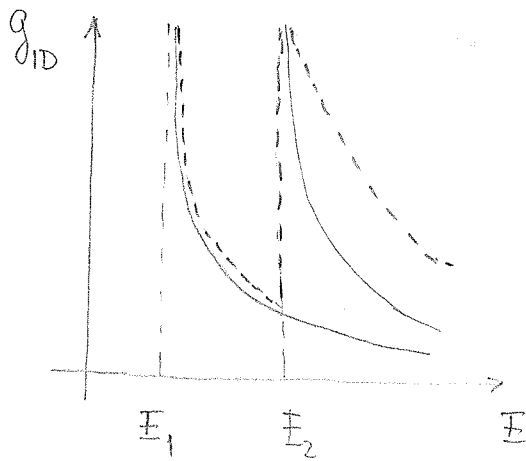
- E este de fapt componenta pe z a energiei (E_z), iar dacă includem mai multe nivele (k_{x,m_1} , k_{y,m_2}) obținem

$$g_{1D}(E) = \sum_{m_1, m_2} \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_{m_1, m_2}}}$$

- curentul pe direcția z este constant și proporțional cu $g_{ID}(E)$:

Viteza de grup $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$

$$g_{ID}(E) = \frac{2}{\pi \hbar \cdot v_g} \rightarrow g_{ID}(E) \cdot v_g = \text{constant}$$

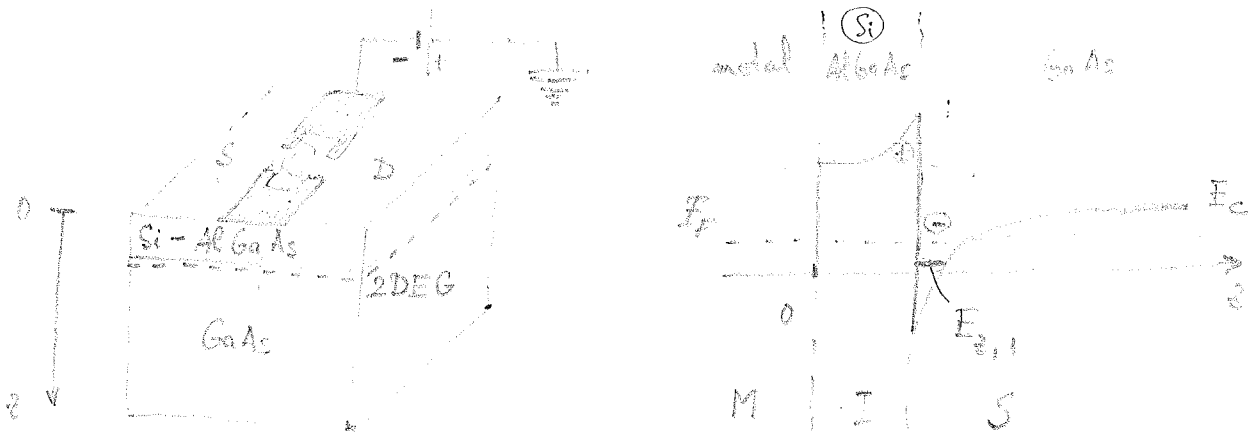


3) Sisteme OD :

Sistemele OD sunt structuri în care dimensiunile pe toate cele trei direcții (x, y, z) sunt de ordinul nanometrelor, numite "puncte cuantice".

Din puncte de vedere tehnologic, punctele cuantice se pot crește din fază lichidă sau se pot obține folosind tehnici de "etching" din fază solidă cu ajutorul litografiei.

De asemenea, se pot obține prin confinarea unui gaz de electroni 2D (2DEG).



2DEG se formează la interfața dintre AlGaAs dopat cu (Si) și GaAs. (≈ 10 nm grosime)

Considerăm pentru început un punct cuantic izolat, de forma unei cutii cu dimensiunile a_x, a_y, a_z . În acest caz, spectrul este discret:

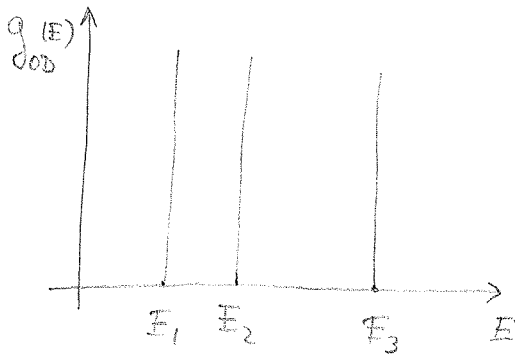
$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2}{a_x^2} + \frac{n_2^2}{a_y^2} + \frac{n_3^2}{a_z^2} \right)$$

Observatii:

- energia este complet cuantificata (electronii nu se pot propaga liber in nici o directie).
- nivelele de energie pot fi degenerate daca e.g. $a_x = a_y$ etc.

Densitatea de stari (luand in calcul spinul)

$$g_{\text{OD}}(E) = 2 \sum_{E, E_{m_1, m_2, m_3}}$$



Consecinte in transport:

- in momentul in care un electron se gaseste pe un nivel in punctul cuantic, apare o repulsie electrostatica intre el si ceilalti electroni care ar urma sa traverseze punctul cuantic (Blocada Coulomb)
- Un singur electron afecteaza puternic conductia prin punctul cuantic, ceea ce conduce la aparitia oscilatiilor in conductanta.

Densitate de stări efectivă:

Concentrația de electroni, (cazul nedegenerat)

$$N = \int_{E_c}^{\infty} g(E) \cdot f_B(E) \cdot dE = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) = f_{\text{Boltzmann}}(E = E_c)$$

N_c = densitatea de stări efectivă

- conduce la aceeași concentrație de electroni, dar utilizând distribuția Boltzmann.

1) Sistem 3D:

$$N^{3D} = \int_{E_c}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot \sqrt{E - E_c} \cdot e^{-\frac{E - E_F}{k_B T}} \cdot dE$$

$$x = \frac{E - E_F}{k_B T} \rightarrow dE = k_B T \cdot dx$$

$$N^{3D} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot (k_B T)^{3/2} \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}} \cdot \int_0^{\infty} x^{1/2} \cdot e^{-x} \cdot dx$$

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} \cdot e^{-x} \cdot dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{m k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}} = N_c$$

Nota: $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} \cdot e^{-t} \cdot dt$ (funcția Γ)

2) Sistem 2D:

$$N^{2D} = \int_0^{\infty} \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot e^{-\frac{(E-E_F)}{k_B T}} \cdot dE$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}} \cdot \int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{k_B T}} \cdot dE$$

$$x = \frac{E}{k_B T} \rightarrow dE = k_B T \cdot dx$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}} \cdot \left[- (k_B T) \cdot e^{-\frac{E}{k_B T}} \right]_0^{\infty}$$

$$= \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot k_B T \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}}$$

$$N_c^{2D} = \frac{m}{\pi \hbar^2} \cdot k_B T$$

3) Sistem 1D:

$$N^{1D} = \int_0^{\infty} \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \cdot e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}} \cdot dE$$

$$= \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} \cdot e^{\frac{E_F}{k_B T}} \cdot \int_0^{\infty} E^{-1/2} \cdot e^{-\frac{E}{k_B T}} \cdot dE$$

$$x = \frac{E}{k_B T} \rightarrow dE = k_B T \cdot dx$$

$$= \frac{\sqrt{2m}}{\pi \hbar} (k_B T)^{1/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_0^{\infty} x^{-1/2} \cdot e^{-x} \cdot dx$$

$$= \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$N_c^{1D} = \sqrt{\frac{2m k_B T}{\pi \hbar^2}}$$

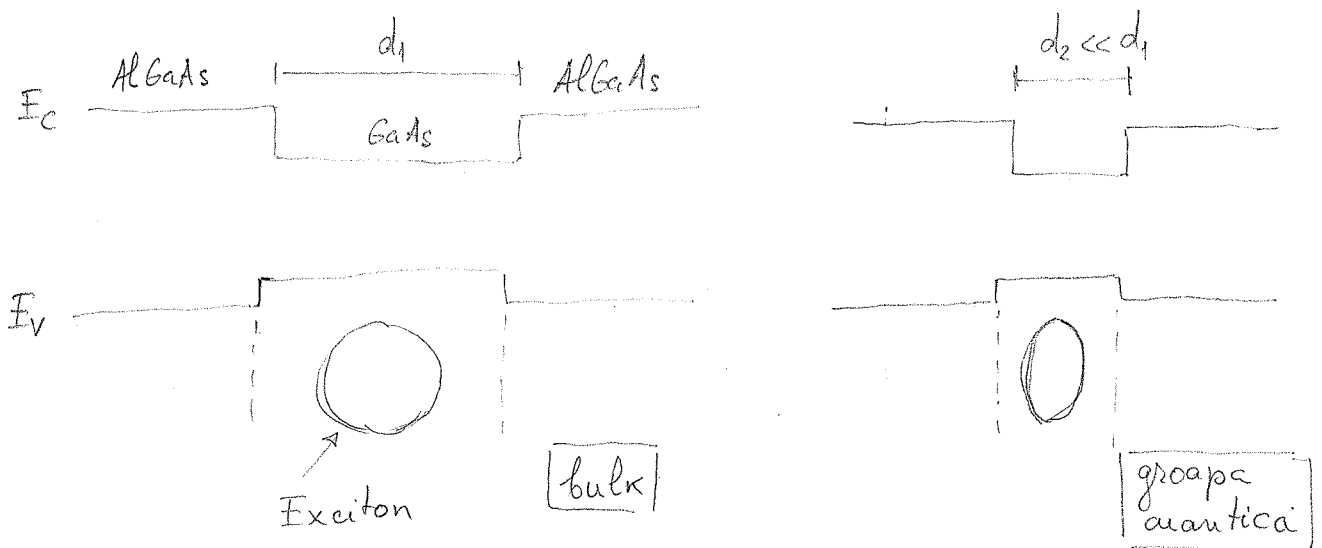
4) Sistem 0D:

$$N_c^{0D} = 2$$

Efecte datorate confinării excitonului:

Datorită confinării în sisteme cu dimensionalitate redusă, efectele excitonice sunt mult mai pronunțate. Energia de legătură a sistemului electron-gol este mult mai mare decât în sisteme bulk.

Ex: GaAs $E_B = 4.2 \text{ meV}$ (binding energy) } valori pt bulk
 $a_B = 15 \text{ nm}$ (naza Bohr)

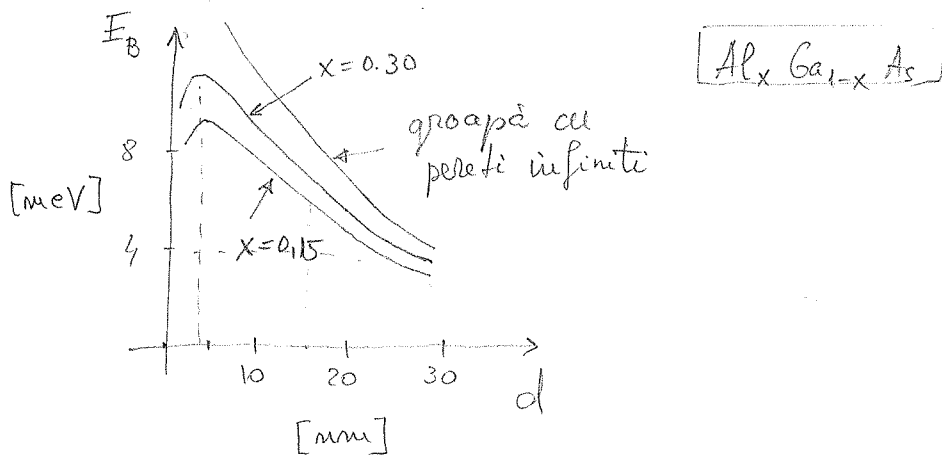


Confinare în groapă cuantică → excitonul este comprimat în cel puțin o direcție → forța de atracție Coulombiană crește → E_B (energia de legătură) crește (naza Bohr scade)

Aplicații:

- E_B relativ mare → excitonii pot rezista compunilor intense din heterostructuri
- Exemple: modulatoare electro-optice, "light-freezing"

Dependența energiei de legătură (E_B) în funcție de lățimea gropii cuantice (d)



Observații:

- $d > d_0 = 15 \text{ nm} \rightarrow E_B \approx 4 \text{ meV}$ valoarea de bulk
- $d \approx 4 \text{ nm} \rightarrow \text{maxim } E_B$
- $d < 4 \text{ nm}$: datorită înalțimii finite a barierii ce definește groapa de potențial, funcția de undă devine mai extinsă pe măsură ce energia nivelului crește și se apropie de înălțimea barierii (tunelare în bariera finită)

Sistemele de tip 1D, 0D introduc o confinare și mai puternică și ca atare energia de legătură a excitonului crește corespunzător.

Excitoni :

- stări legate electron-gol

În aproximația masei efective, Hamiltonianul de interacție este:

$$H = \frac{P_e^2}{2m_e^*} + \frac{P_h^2}{2m_h^*} + V(\vec{r}_e - \vec{r}_h)$$

$$\text{cu } V(\vec{r}_e - \vec{r}_h) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r |\vec{r}_e - \vec{r}_h|}$$

Deoarece potențialul de interacție depinde doar de distanța dintre particule, se poate separa centrul de masă și mișcarea "internă", cu schimbarea de variabile :

$$\vec{R} = \vec{r}_e - \vec{r}_h$$

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h}{m_e + m_h}$$

$$M = m_e + m_h$$

$$\mu = \frac{m_e \cdot m_h}{m_e + m_h}$$

$$\Rightarrow H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r R}$$

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Psi(\vec{R}) \cdot \chi(\vec{r}) ,$$

cu o mișcare de tip particulă liberă pt CM și o mișcare internă:

$$\left(H' = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r R} \right) \cdot \chi(\vec{r}) = E' \cdot \chi(\vec{r})$$

Există stări legate, cea mai joasă dintre ele aflându-se la $1 R_y^*$ sub continuumul de stări (BC):

$$R_y^* = \frac{2\mu e^4}{\hbar^2 (8\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2} = \frac{\mu}{m_0} \cdot \frac{1}{\epsilon_r^2} R_y , \quad R_y = 13.6 \text{ eV}$$

iar para Bohr efectivă în cazul perechii $e^- - h^+$:

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\hbar^2}{\mu c^2} = \epsilon_r \cdot \frac{m_0}{\mu} \cdot a_B, \quad a_B = 0,529 \text{ \AA}$$

$$\rightarrow a_B^* \sim 10 \text{ nm.}$$

Pentru atomul hidrogenoid 2D avem :

$$R_y^{2D} = 4 \cdot R_y^{3D}$$

$$a_B^{2D} = \frac{1}{4} a_B^{3D}$$

* Stările legate ale atomului de hidrogen

$$3D : E_n = - \frac{R_y}{n^2}$$

$$2D : E_n = - \frac{R_y}{(n - \frac{1}{2})^2}$$

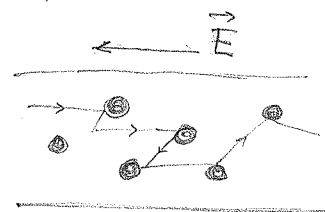
1) Modelul Drude pt conducția electronică:

- Paul Drude (1900), în special conductor
în metale

- modelul presupune ioni imobili, iar electronii
se ciocnesc inelastic, după un timp mediu de
ciocnire τ , sub acțiunea unui câmp electric uniform $\vec{E}$

• Ec. de mișcare:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p}(t) \rangle = q \vec{E} - \frac{1}{\tau} \langle \vec{p}(t) \rangle$$



$$m \langle \vec{v} \rangle = q \vec{E} - \frac{1}{\tau} m \langle \vec{v} \rangle$$

În regim staționar, $m \langle \vec{v} \rangle = 0$:

$$0 = q \vec{E} - \frac{1}{\tau} m \vec{v}_D \rightarrow \vec{v}_D = \frac{q \tau}{m} \vec{E}$$

viteza de drift.

• Mobilitatea:

$$\vec{v}_D = \mu \vec{E} \rightarrow \mu = \frac{q \tau}{m}$$

Valori tipice: Si (300 K) $\mu = 1400 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$

2DEG ($T \rightarrow 0$) $\mu = 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$

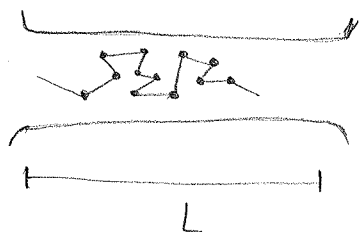
• Densitatea de curent:

$$\vec{J} = n \cdot q \cdot \langle \vec{v} \rangle = \frac{n q^2 \tau}{m} \vec{E} = \sigma \cdot \vec{E},$$

$$\sigma = \frac{n q^2 \tau}{m} \quad \text{legea lui Ohm}$$

2) Clasificare a tipurilor de transport:

a) transport incoherent (difuziv): $L \gg \bar{\lambda} \gg \lambda_F$



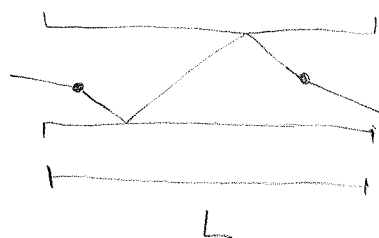
L - lungimea probei

$\bar{\lambda}$ - drumul liber mediu (împrăstieri elastice)

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}$$

- împrăstieri inelastice (pe impurități cu grade de libertate)

b) transport coerent (quasi-balistic) (adiabatic)



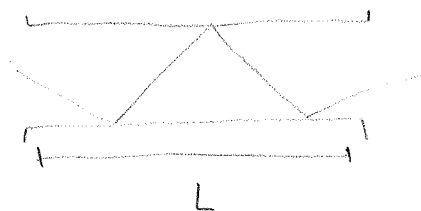
$$L \ll \lambda_\varphi$$

λ_φ - lungimea de coerență a fazei.

$$L \sim \lambda_F$$

- împrăstieri elastice pe impurități (statice, fără grade de libertate)

c) transport balistic



$$L \ll \bar{\lambda}$$

$$L \ll \lambda_\varphi$$

$$L \sim \lambda_F$$

- fără împrăstieri

Valori tipice: 2DEG: $n_{2DEG} = 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

$$\lambda_F \approx 35 \text{ nm}$$

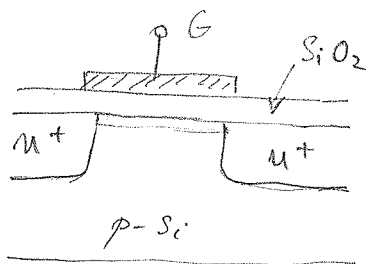
$$\lambda_\varphi \sim \mu\text{m}$$

În cazul structurilor de tip multi-strat vom considera în continuare două tipuri de transport:

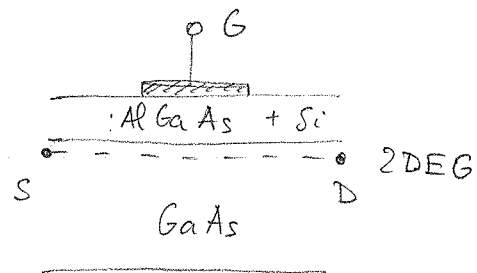
- transport paralel (în raport cu interfețele)
→ abordare semi-clasică
- transport perpendicular
→ abordare cuantică

A) Transport paralel:

Vom considera structuri de tip MOSFET, MODFET



MOSFET
(mobilitate joasă)



MODFET
(mobilitate mare)

Mecanisme de împrăștiere:

i) împrăștiere pe fononi

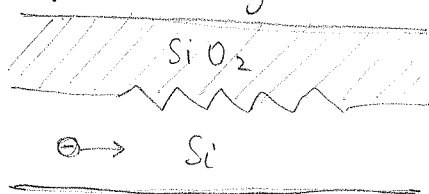
- importantă pentru $T \approx 50\text{ K}$
- în structuri 2D tip groapă cuantică, modurile fononice sunt confinate, ceea ce crește nr. de împrăștiere electron-fonon.

ii) împrăștiere pe impurități:

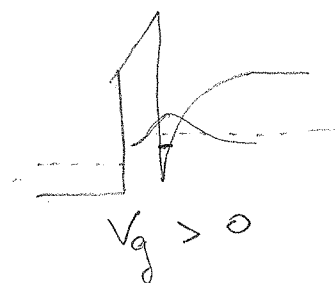
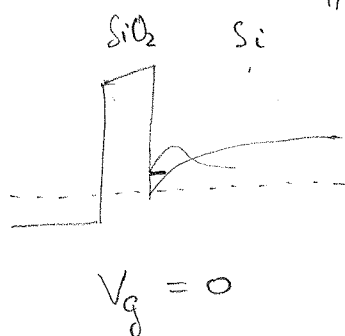
- la temperaturi joase constituie cea mai importantă sursă de împrăștiere

- impuritățile sunt atomi ionizați (dopare)
- MODFET : - electronii din 2DEG interacționează slab cu Si^+ , care sunt localizați în stratul de AlGaAs ;
- pt a reduce și mai mult interacția, se adaugă un strat semiconductor (spacer) între Si-AlGaAs și GaAs , iar doparea cu Si este de tip S.

iii) împrăștiere generată de rugozitatea suprafeței (surface roughness)



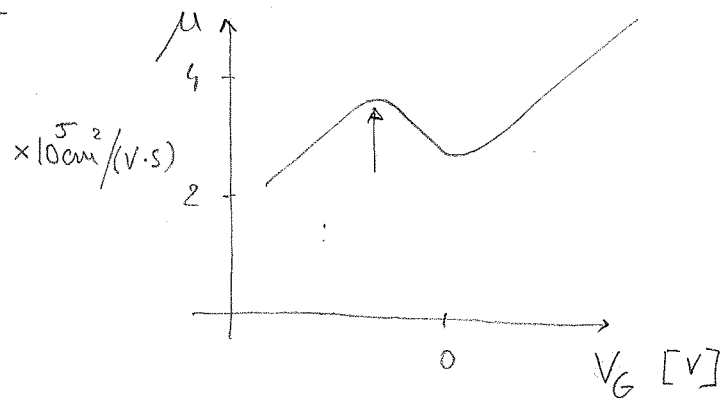
- generează reflexii ale purtătorilor de sarcină
- în sisteme de tip MODFET nu este așa de importantă, deoarece interfața este aproape perfectă (realizată cu MBE)
- MOSFET : - interfața Si / SiO_2 are rugozitate mare
- cu aplicarea tensiunii pe poartă, funcția de undă se extinde în stratul de SiO_2 , ceea ce crește nivelul de împrăștiere



iv) împrăștiere între subbenzi

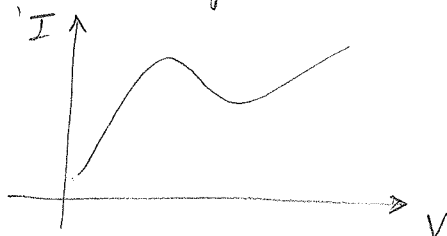
- odată cu creșterea tensiunii pe poartă, mai multe sub-benzi pot coborâ sub nivelul Fermi (corespunzător contactului de bulk) care pot fi populate.
- ca urmare a împrăștierei între sub-benzi, mobilitatea scade (imediat ce un nou nivel coboară sub E_F)

Ex: MODFET



În încheierea discuției despre transportul paralel, vom mai menționa efectul de real-space-transfer (RST):

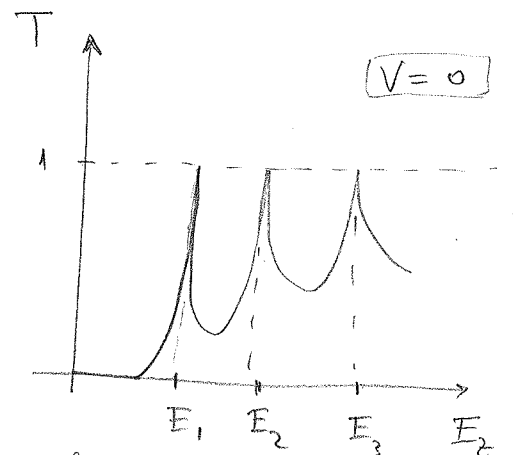
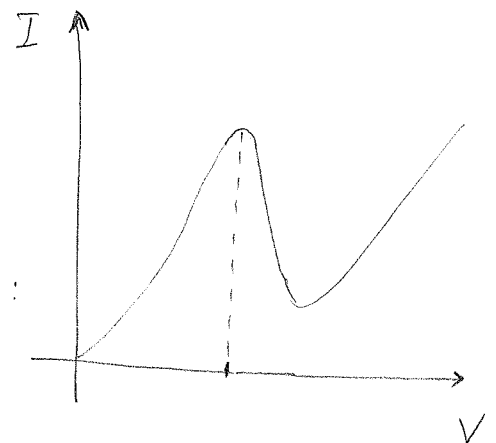
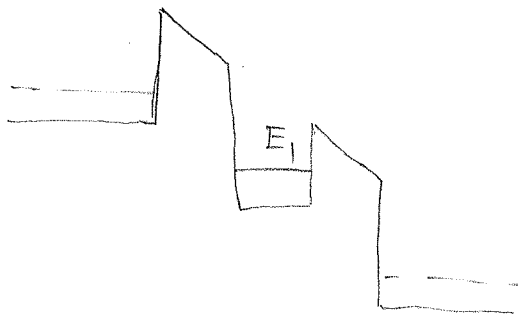
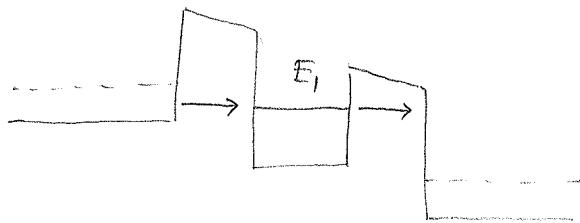
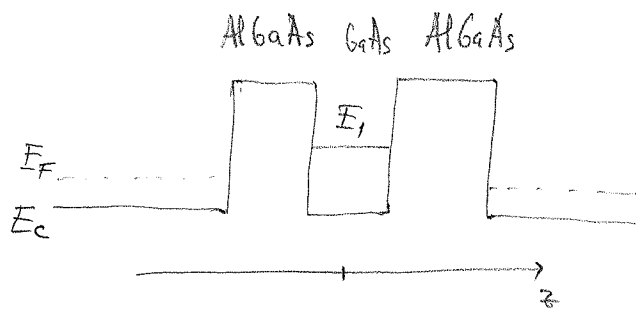
- în câmpuri electrice intense, electronii accelerați depășesc energia corespunzătoare echilibrului termic ($k_B T$) $\rightarrow$ se numesc "hot electrons"
- aceștia pot pătrunde în zona de barieră (în cazul MODFET, în stratul de AlGaAs) care are o mobilitate mult mai mică, iar curentul scade
- se obține astfel rezistență diferențială negativă



- în tranzistori în care lungimea canalului este de ordinul $\sim 100 \text{ nm}$, electronii nu mai suferă coliziuni $\rightarrow$ electroni balistici cu $v_D \approx 10^7 \text{ cm/s}$ (velocity - overshoot - effect)

B) Transport perpendicular

- dioda DBRT (double barrier resonant tunneling)



Tsu - Esaki formula:

$$j = \frac{4\pi m^* q}{h^3} \cdot \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} T(E_2) \cdot N(E_2) \cdot dE_2$$

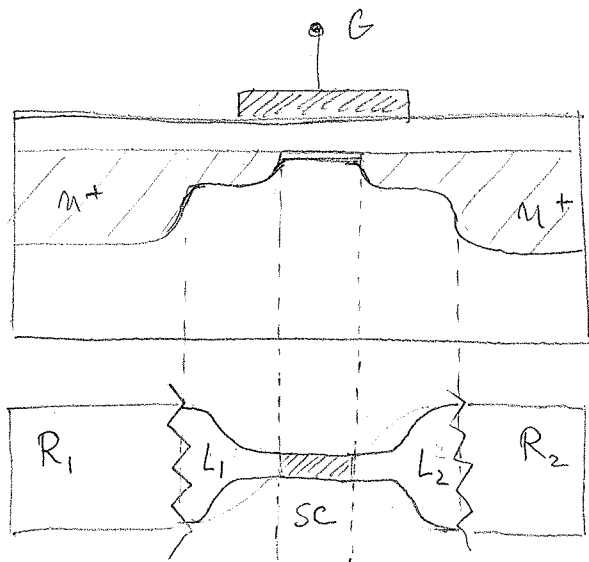
$$N(E_2) = \int_0^{\infty} dE \cdot (f_1(E) - f_2(E))$$

• lărgimea peak-urilor este corelată cu timpul de viață

Formalismul Landauer - Buttiker:

- tratează transportul balistic
- sistemul este împărțit în 3 componente:
 - rezervoare :
 - macroscopice
 - împrăstieri inelastice
 - rol de a injecta e^-
 - leaduri
 - semir-infinite
 - transport balistic
 - rol de ghid de undă pt e^-
 - sistem cuantic - dimensiuni liniare ale ordinului $\sim 100 \text{ nm}$
 - împrăstieri elastice pe potențialul structurii
- calculul curenților se face pe baza transmisiilor.

Exemplu: MOSFET la scară nanometrică:

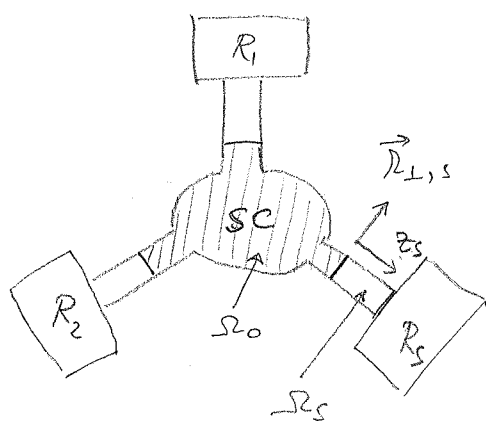


Obs:

- interfețele R_1-L_1 , R_2-L_2 sunt nereflexante.
- lead-urile sunt presupuse lungi, astfel încât variația în lungul lor să fie f. lentă
- rezervoarele sunt complet absorbante

Electronii sunt injectați din ambele rezervoare, se propagă prin lead-uri (asemenea unor ghiduri de undă) și sunt împrăstiați pe potențialul structurii.

Pentru calculul curenților avem de rezolvat o problemă de împrăștiere:



- Leadurile (Ω_s) ^{semi-infinite,} au potențial invariant în lungul lor, iar secțiunea este arbitrară.
- $V = \infty$ în exterior.

Ec. Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(\vec{r}) \right] \cdot \Psi(\vec{r}, E) = E \cdot \Psi(\vec{r}, E)$$

Condițiile la capete (asimptotice) sunt "condiții de împrăștiere" (scattering boundary conditions), adică un electron este incident dintr-unul din rezervoare.

Soluția în leadul Ω_s (deoarece $V(\vec{r}) = V_{z_s}(z_s) + V_{2D}(\vec{r}_{\perp,s})$)

$$\begin{aligned} \Psi_s(\vec{r} \in \Omega_s; E) = & \sum_i \psi_v^{\text{in}} \cdot \exp(-ik_v \cdot z_s) \cdot \Phi_v(\vec{r}_{\perp,s}) \\ & + \sum_i \psi_v^{\text{out}} \cdot \exp(+ik_v \cdot z_s) \cdot \Phi_v(\vec{r}_{\perp,s}) \end{aligned}$$

- $v = (s, i)$ s - indexul leadului
 i - indexul canalului

- Φ_v - moduri perpendiculare în leadul s
- soluții ale ec. Schrödinger 2D:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{2D} + V_{2D}(\vec{r}_{\perp,s}) \right] \Phi_v(\vec{r}_{\perp,s}) = E_v \cdot \Phi_v(\vec{r}_{\perp,s})$$

$$-K_v = \frac{\sqrt{2m^*(E - E_v)}}{\hbar}$$

vectorii de undă paraleli
cu lead-urile.

În teoria împrăștiilor, coeficienții complecși $\psi_v^{in}, \psi_v^{out}$
sunt legați de matricea de împrăștiere, S .

$$\vec{\psi}^{out} = S \cdot \vec{\psi}^{in}$$

Vom presupune că e^- este incident pe canalul " v ",
și astfel alegem $\psi_{v'}^{in} = \frac{1}{\sqrt{L}} \delta_{vv'}$, ($\forall$) v' ,
astfel încât componenta incidentă a funcției de undă:

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \exp(-iK_v \cdot z_s) \cdot \Phi_v(\vec{r}_{\perp, s})$$

este normată. Rezultă $\psi_{v''}^{out} = \sum_{v'} S_{vv''} \psi_{v'}^{in} = \frac{1}{\sqrt{L}} S_{vv''}$

Putem scrie pt un e^- incident pe canalul v :

$$\begin{aligned} \psi_s(\vec{r} \in \Omega_s, E) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(-iK_v \cdot z_s) \cdot \Phi_v(\vec{r}_{\perp, s}) \\ &+ \sum_{v'} S_{vv'}(E) \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot \exp(+iK_{v'} \cdot z_s) \cdot \Phi_{v'}(\vec{r}_{\perp, s}) \end{aligned}$$

Structura matricii S : (3 terminale)

$$S(E) = \begin{bmatrix} \begin{array}{ccc|ccc} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1N_1} & S_{1, N_1+1} & \dots & S_{1, N_1+N_2} & \dots & S_{1, N_1+N_2+N_3} \\ \vdots & & & & & & & & \\ S_{N_1,1} & & & R_{11} & & & T_{12} & & T_{13} \end{array} & \begin{array}{ccc} S_{1, N_1+1} & \dots & S_{1, N_1+N_2} \\ & & \\ & & \end{array} & \begin{array}{ccc} S_{1, N_1+N_2+N_3} & & \\ & & \\ & & \end{array} \\ \begin{array}{ccc|ccc} S_{N_1+N_2,1} & & & T_{21} & & & R_{22} & & T_{23} \\ & & & & & & & & \\ & & & T_{31} & & & T_{32} & & R_{33} \end{array} & \begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array} & \begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array} \end{bmatrix}$$

Coeficienti de transmisie (reflexie) se pot scrie în funcție elementele matricii $\tilde{S}$:

$$\tilde{S} = K^{1/2} \cdot S \cdot K^{-1/2}, \text{ unde } K_{\nu\nu'} = K_{\nu} \delta_{\nu\nu'}$$

K - matrice diagonală

$$T_{\nu\nu'}(E) = |\tilde{S}_{\nu\nu'}(E)|^2 \quad \text{în care pt } s=s' \text{ vorbim de fapt despre coef de reflexie}$$

Curentul se calculează riguros:

$$I_{ss'} = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \cdot (f_s(E) - f_{s'}(E)) \cdot T_{ss'}(E)$$

$$f_s = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_s}{k_B T}\right) + 1} \quad \text{Fermi-Dirac distribution.}$$

$$T_{ss'}(E) = \sum_{i,i'} T_{\nu\nu'}(E) \quad \text{transmisia între contactele } s \text{ și } s'.$$

Formula curentului pentru un sistem balistic cu $T=1$.

- densitatea de stări 1D:

$$g_{1D}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E}}$$

- viteza de grup $v_g = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k} = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$

$$\Rightarrow g_{1D}(E) = \frac{2}{\pi \hbar \cdot v_g(E)}$$

Curentul pt un potential aplicat "V", la $T=0K$.

$$I = e \cdot n_D(E) \cdot V_g(E) \cdot eV$$

$$= e \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot eV = \frac{2e^2}{h} \cdot V$$

- s-a omis factorul "2" pt ca electronii se misca într-o singura directie
- un singur mod!

Se poate defini conductanta (in regim linia, V_{mic})

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h}$$

→ unitatea cuantica de rezistenta

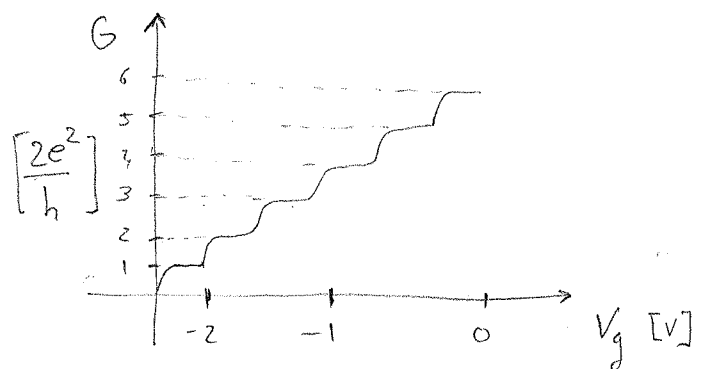
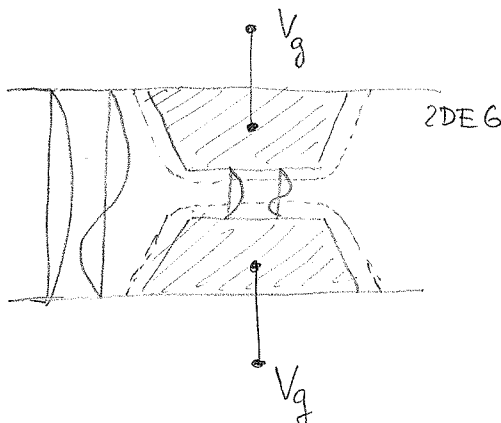
$$R_0 = \frac{h}{e^2} = 25,8 \text{ k}\Omega$$

Relatia de mai sus se poate generaliza usor pentru cazul in care mai multe moduri participa la conductie:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{m,m} T_{mm}$$

Exemple:

- Quantum Point Contact (QPC)



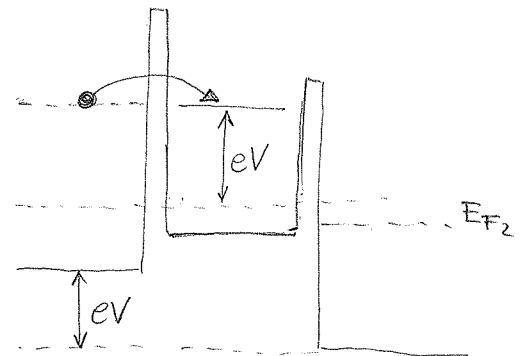
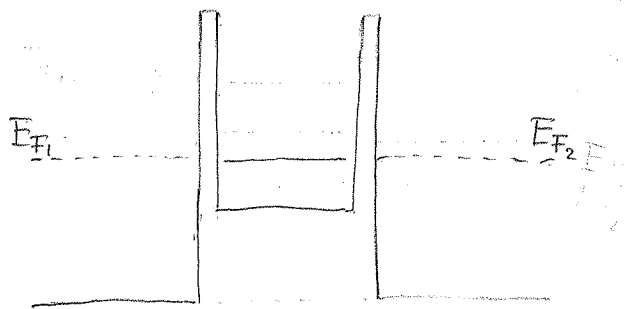
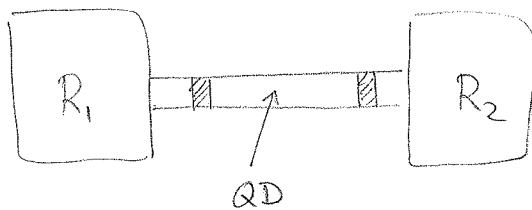
Aplicând potențial negativ pe porți, gazul de electroni 2D se va îngusta în constricție, iar nr. de moduri care participă la conducție va scăde.

Un alt exemplu: - Break-junctions.

- Conducție termică $\frac{\kappa}{T} = \frac{\pi k_B^2}{6\hbar} = 9.465 \cdot 10^{-13} \text{ W} \cdot \text{K}^{-2}$

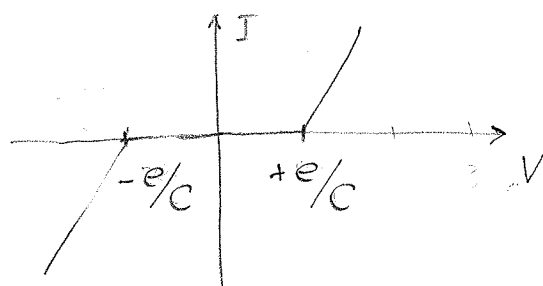
Blocada Coulomb:

- sistemul este un punct cuantic (quantum dot)



- Presupunem că punctul cuantic are o capacitate C
- Un e^- poate fi introdus în QD dacă i se oferă o energie mai mare decât $\frac{e^2}{C}$, adică

$$e|V| > \frac{e^2}{C} \rightarrow |V| > \frac{e}{C}$$



Pt. ca efectul să poată fi observat, este necesar ca energia de încărcare a punctului cuantic să fie mai mare decât energia termică:

$$\frac{e^2}{C} \gg k_B T,$$

adică : - C f. mică
sau

- T f. mică

O altă condiție pt a observa efectul de blocadă Coulomb este ca nr. de e^- să nu fluctueze în echilibru: $|N - \langle N \rangle|^2 \ll 1$

- timpul de transfer în punct este de ordinul $R_T \tau$ unde R_T = rezistența barierei de tunelat
- fluctuații în nr. de e^- induc fluctuații energetice de ordinul $\frac{e^2}{C}$ cu o unitate

Asadar,

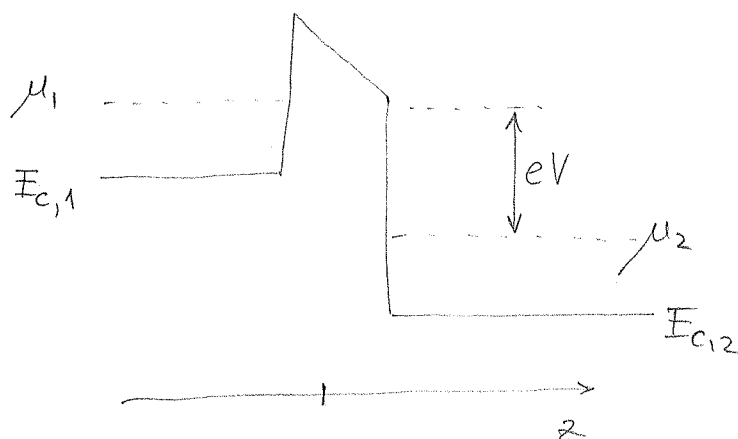
$$\Delta E \cdot \Delta t = \frac{e^2}{C} \cdot R_T \tau > h$$

$$\rightarrow R_T > \frac{h}{e^2}$$

Deci este necesar ca $R_T \gg \frac{h}{e^2} = 25,8 \text{ k}\Omega$ pt o bună localizare a electronilor în punctul cuantic.

Pt barere mai putin space, electroni nu pot
mai fi localizati in punctul cuantic.

Formula Tsu - Esaki



Ipoteze:

- aproximatia masei efective;
- benzi parabolice:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}$$

- impulsul in planul xOy se conserva

Curentul: $J = J_{1 \rightarrow 2} - J_{2 \rightarrow 1}$

$$dJ_{1 \rightarrow 2} = q \cdot T(k_z) \cdot v_z \cdot g_1(k_z) \cdot f_1(E) [1 - f_2(E)] dk_z$$

$$dJ_{2 \rightarrow 1} = q \cdot T(k_z) \cdot v_z \cdot g_2(k_z) \cdot f_2(E) [1 - f_1(E)] dk_z$$

Densitatea de stari:

$$g(k_z) = \int_0^\infty \int_0^\infty g(k_x, k_y, k_z) \cdot dk_x \cdot dk_y$$

- Intr-un cub de latura L :

$$\Delta k_x = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta k_y = \frac{2\pi}{L}, \quad \Delta k_z = \frac{2\pi}{L}$$

$$\rightarrow g(k_x, k_y, k_z) = 2 \frac{1}{\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z} \cdot \frac{1}{L^3} = \frac{1}{4\pi^3}$$

$$\left. \begin{aligned} \bullet \quad v_z &= \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k_z} = \frac{\hbar k_z}{m^*} \\ E_z &= \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \rightarrow dE_z = \frac{\hbar^2}{m^*} \cdot k_z \cdot dk_z \end{aligned} \right\} \rightarrow$$

$$\rightarrow v_z \cdot dk_z = \frac{1}{\hbar} dE_z$$

$$dJ_{1 \rightarrow 2} = \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \cdot T(E_z) \cdot dE_z \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty f_1(E) \cdot [1 - f_2(E)] dk_x \cdot dk_y$$

$$dJ_{2 \rightarrow 1} = \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \cdot T(E_z) \cdot dE_z \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty f_2(E) \cdot [1 - f_1(E)] dk_x \cdot dk_y$$

Folosind coordonate polare:

$$dJ = \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \cdot T(E_z) \cdot dE_z \cdot \int_0^\infty dk_{xy} \cdot k_{xy} \cdot \int_0^{2\pi} d\theta [f_1(E) - f_2(E)]$$

$$dk_{xy} \cdot k_{xy} = \frac{m^*}{\hbar^2} dE_{xy}$$

$$= \frac{q}{4\pi^3 \hbar} \cdot \frac{m^*}{\hbar^2} \cdot 2\pi \cdot T(E_z) \cdot dE_z \int_0^\infty dE_{xy} \cdot [f_1(E) - f_2(E)]$$

$$= \frac{4\pi q m^*}{\hbar^3} \cdot T(E_z) \cdot dE_z \int_0^\infty dE_{xy} \cdot [f_1(E) - f_2(E)]$$

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_2 + E_{xy} - \mu_1}{k_B T}\right) + 1}$$

$$\int_0^{\infty} dE_{xy} \cdot f_1(E) = k_B T \ln \left(1 + \exp\left(\frac{\mu_1 - E_2}{k_B T}\right) \right)$$

Deci

$$J = \frac{4\pi q m^*}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} dE_2 \cdot T(E_2) \cdot \underbrace{\ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{\mu_1 - E_2}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mu_2 - E_2}{k_B T}\right)} \right]}_{\text{supply function}}$$