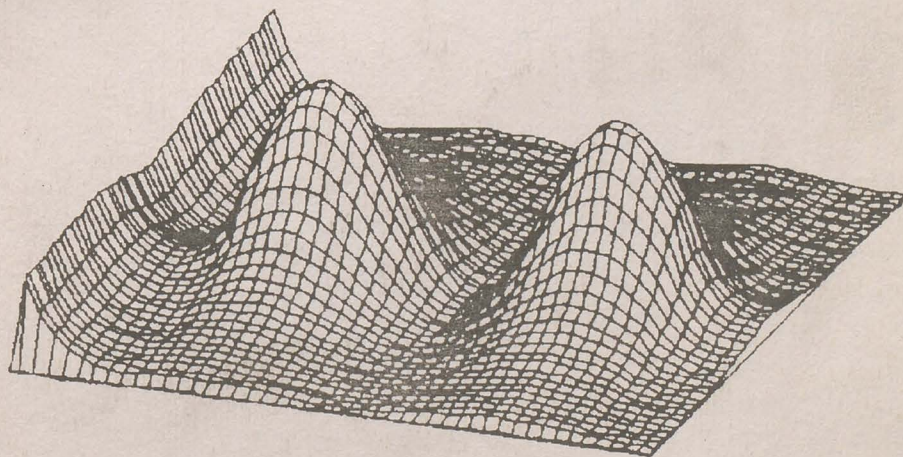


N 516461-

PETRICĂ I. CRISTEA

DISPOZITIVE ELECTRONICE SPECIALE

Volumul I



EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI

1999



BIBLIOTECA CENTRALA
UNIVERSITARA
București

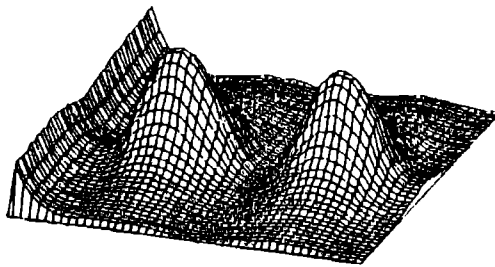
Cota IV 516 461
Inventar e 199905394.

PETRICĂ I. CRISTEA

224

DISPOZITIVE ELECTRONICE SPECIALE

Volumul I



EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI
1999

699/99

Referenți științifici: Conf. dr. ȘTEFAN ANTOHE
Conf. dr. CONSTANTIN STĂNCIULESCU

B.C.U. București



C199905394

© Editura Universității din București
Șos. Panduri, 90-92, București - 76235; Telefon/Fax 410.23.84

Descrierea CIP a Bibliotecii Naționale
CRISTEA, PETRICĂ I.

Dispozitive electronice speciale / Petrică I. Cristea
București: Editura Universității din București, 1999
152 p.; 28 cm.

ISBN 973-575-374-X

Vol. I. - 1999 - p. - Bibliogr. ISBN 973-575-350-2

621.38(075.8)

PREFAȚĂ

Descoperirea mecanicii cuantice a schimbat în mod radical concepția clasică despre realitatea fizică. Apariția și dezvoltarea noilor concepte au generat conflicte ireductibile între diversele școli de gândire. Au fost abandonate multe interpretări inițiale, strâns legate de intuiția fizică, dezvoltată vreme îndelungată pe baza percepției macroscopice. Chiar astăzi, după aproape optzeci de ani, încercările de a înțelege și a fundamenta esența comportării cuantice cu ajutorul raționamentelor și conceptelor clasice continuă să joace un rol important în dezvoltarea cadrului conceptual. Situația este complicată și de intervenția (sau influența) diverselor curente filozofice, care nu agreează, din punct de vedere ontologic, o lume fizică ce nu poate fi descrisă în termeni de realitate separabilă. Aproape cert, *Natura* nu ține cont de fixațiile noastre filozofice. Ea operează o selecție nemiloasă asupra ipotezelor noastre, potrivit unei estetici pe care încă nu o înțelegem pe deplin și pe care ne permite să o întrevădem prin simetrii subtile. Axiomatica mecanicii cuantice, așa cum o cunoaștem în prezent, este bazată pe acele afirmații care au supraviețuit acestei selecții. Din acest motiv, teoria cuantică modernă are, atât în câmpul euristic cât și în cel predictiv, o putere excepțională. În plus, numărul enorm de date experimentale, acumulate până în prezent, confirmă predicțiile teoretice, chiar atunci când acestea, prin exotismul lor, par să sfideze logica bunului simț.

În mod firesc, printre primii "beneficiari" ai evoluției noilor instrumente teoretice s-a numărat domeniul fizicii stării condensate. Progresele spectaculoase nu au întârziat să apară: a fost înțeleasă structura cristalină și s-au dezvoltat metode experimentale ingenioase de analiză a detaliilor ei fine, prin interferență; a fost dezvoltată teoria structurii de benzi a corpului solid și a fost inventat tranzistorul; au fost înțelese mecanismele care stabilesc un anumit tip de comportare magnetică și cele responsabile de absorbția optică sau apariția supraconductibilității în metale. Această enumerare ar putea continua pe câteva pagini, chiar dacă am opera o selecție a celor mai impresionante realizări. Peisajele teoretice și cele experimentale au fost îmbogățite an de an, prin acumularea unor noi date. În prezent, suntem martori privilegiați ai unui proces formidabil, care a schimbat înfățișarea lumii macroscopice, datorită unei revoluții la scară microscopică. S-ar putea spune că am schimbat lumea pe care o vedem, datorită modului în care gândim despre lumea pe care nu o vedem.

În acest curs veți găsi expuse, într-o formă elementară, cunoștințe referitoare la domeniul dispozitivelor electronice cu dimensiuni nanometrice. Inevitabil, au fost omise aspecte teoretice și experimentale importante. Prezentarea și discutarea lor ar fi complicat în mod inutil, la acest nivel, înțelegerea faptelor relevante pentru o

inițiere în domeniu. La cursurile dedicate mecanicii cuantice și fizicii corpului solid, sau la cele de electronică, au fost discutate amănunțit aceste aspecte. Pe cât a fost posibil, am încercat să păstrez notațiile folosite acolo. Am păstrat, de asemenea, forma în care au fost prezentate, în cadrul acestor cursuri, ecuațiile rezultate din anumite aproximații. Uneori, o asemenea opțiune a implicat renunțarea la termenii de corecție, importanți pentru o descriere rezonabilă a rezultatelor experimentale. În cele mai multe cazuri, acest fapt a fost semnalat prin observațiile incluse în text, însă există, aproape sigur, și omisiuni.

Autorul este îndatorat Profesorului M. Altarelli de la Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart, Germany, pentru materialul trimis, referitor la structura de benzi a super-rețelelor, material pe care se bazează cea mai mare parte a lecțiilor din capitolul al III-lea. Eventualele erori de interpretare și omisiuni trebuie puse însă în seama mea.

Mulțumiri se cuvin Profesorilor Dr. I. Spânulescu și Dr. I. Munteanu de la Universitatea din București, Facultatea de Fizică, pentru articolele puse la dispoziție și pentru discuțiile purtate asupra unei părți importante din manuscris. Idei interesante, pentru detaliile referitoare la microscopia tunel, expuse în al doilea capitol, au fost sugerate autorului de către Dr. P. Budău. Mulțumesc, de asemenea, Dr. M. Stan și colegilor săi de la Los Alamos National Laboratories, Dept. of Materials Science, pentru discuțiile purtate și pentru semnalarea unor articole interesante.

Sugestii importante, care au ajutat la o prezentare mai clară a materialului din capitolele IV și V, am primit de la Prof. Dr. C. Stănculescu, Dr. C. M. Niculae și Dr. M. P. Dincă. Nu în ultimul rând, țin să mulțumesc studenților care, prin observațiile critice, au contribuit la prezentarea sub o formă accesibilă a informației. În mod special, Ing. Fiz. I. V. Moise, a contribuit la îmbunătățirea considerabilă a programului de calcul self-consistent.

Există părerea, pe care o consider greșită, că anumite informații științifice, datorită gradului înalt de abstractizare, nu trebuie incluse în bagajul minimal de cunoștințe al unui umanist cu o solidă cultură generală; deținerea acestor informații este privită ca o obligație doar pentru practicanții științelor exacte. Uneori, acești specialiști sunt suspectați de ceea ce, adepții părerii mai sus amintite, numesc "viziune inginerească asupra lumii". Varianta mai subtilă ar fi, pasămite, viziunea obținută printr-un anumit fel de contemplare "filosofică". Autorul acestor rânduri nu a putut, în nici un chip, să stabilească dacă Dumnezeu este absolvent al Politehnicii sau al Universității. Însă lumea pe care a creat-o este minunată. Matematicieni, fizicieni sau ingineri, poeți sau pictori, filosofi sau compozitori, suntem obligați cu toții să trăim, un timp prea scurt, guvernați de legile implacabile ale acestei lumi, fie

ele descoperite sau nu. Și suntem cu toții obligați să acceptăm, măcar din când în când, că ideile noastre despre realitate, indiferent de semnificația acordată termenului, reprezintă o sumă de prejudecăți. Poate că, într-o zi, unul dintre actualii studenți ai Facultății de Fizică, va deschide o cale nouă. Și poate că, urmând-o, vom renunța la încă o prejudecată.

București,
Iunie, 1999

Petrică I. Cristea

*Din spațiu ne prelingem spre naștere, invers,
Prezența, ca pe'o rană, o vindeca'va timpul
Și dintr'o despicață arteră'a unui vers,
Va curge nemurire când vom urca Olimpul...*

I. IDEILE ȘI EVOLUȚIA DOMENIULUI

I.1	Introducere	1
I.2	Perioada Esaki - Tsu	3
I.3	Dezvoltări ulterioare ale conceptului de super - rețea	6
I.3.1	Cele mai utilizate heterojoncțiuni	6
I.3.2	Sistemul GaAs/AlGaAs	14
	○ <i>Absorbție optică</i>	15
	○ <i>Laseri</i>	15
	○ <i>Fotocurenți și luminiscentă</i>	16
	○ <i>Împrăștiere Raman</i>	17
	○ <i>Efecte magneto - cuantice</i>	17
	○ <i>Doparea modulată și dispozitive cu mobilitate înaltă</i>	19
	○ <i>Efect Hall cuantic</i>	20
	○ <i>Stări de impuritate și excitoni în gropi cuantice de potențial</i>	21
	○ <i>Bistabilitate optică excitonică</i>	22
	○ <i>Fotodiode cu avalanșă, care utilizează heterojoncțiuni</i>	22
	○ <i>Sisteme unidimensionale</i>	23
	○ <i>Sisteme zero - dimensionale</i>	24
I.3.3	Sisteme de tipul InAs/GaSb(/AlSb)	25
	○ <i>Tranziția semiconductor - semimetal, mediată de super-rețea</i>	25
	○ <i>Super-rețele cu trei compuși</i>	26
	○ <i>Gropi cuantice de potențial, formate în InAs</i>	27
	○ <i>Câteva rezultate recente: QCL și laseri ZnMgSSe cu injecție</i>	27

III. STUDIUL SUPRAFETELOR LA NIVEL ATOMIC. TEHNICI EXPERIMENTALE

II.1	Microscopia tunel (Scanning Tunneling Microscopy, STM)	29
II.1.1	Introducere	29
II.1.2	Principiul	29
II.1.3	Principii teoretice	31
II.1.4	Interpretarea imaginilor STM	32
II.1.5	Rezoluția microscopului tunel	33
II.1.6	Metode experimentale de realizare a microscopului tunel	35
II.1.7	Viitorul microscopiei tunel. Alte aplicații	36
II.2	Microscopul scanning de detecție a forțelor inter - atomice (Atomic Force Microscope - AFM)	37
II.2.1	Principii generale	37
II.3	Concluzii	38

III. STRUCTURA DE BENZI A SUPER - REȚELELOR. APROXIMAȚIA FUNCȚIEI ANVELOPĂ

III.1	Introducere	39
III.2	Condițiile la limită impuse funcției anvelopă	43
III.3	Efectul cuplajului între benzile energetice	46
III.4	Aspecte critice ale aproximației funcției anvelopă	50
III.5	Aplicații pentru sisteme de tipul $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Abandonarea self-consistenței	51
III.6	Aproximații self - consistente	54

IV. FIZICA TRANZISTORILOR HEMT CU HETEROJONCTIUNE $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$

IV.1	Interfața $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$	55
IV.1.1	Introducere	55
IV.1.2	Echilibrul termic al interfeței	58
IV.1.3	Confinarea la interfața heterojoncțiunii $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$	60
IV.1.4	Dinamica purtătorilor în zona Brillouin	62
IV.1.5	Densitatea de stări energetice a sistemelor bidimensionale	63
IV.1.6	Densități de sarcină asociate nivelurilor energetice	65
IV.1.7	Spectrul energetic al electronilor 2DEG	67
	• <i>Contribuția dopajului de fond</i>	68
	• <i>Contribuția 2DEG</i>	69
	• <i>Calcul self - consistent</i>	70
	• <i>Dependența poziției nivelului Fermi de concentrația superficială</i>	77
	• <i>Efectul impurităților acceptoare din GaAs</i>	83
	• <i>Influența temperaturii</i>	86
	• <i>Metode analitice. Metoda gropii de potențial triunghiulare (TWA)</i>	88
IV.1.8	Câmpul și potențialul electric în $Al_xGa_{1-x}As$	91
IV.2	Controlul densității superficiale 2DEG	91
IV.2.1	Structuri N-ON și structuri N-OFF	95
	• <i>Amorsarea canalului MESFET</i>	97
IV.2.2	Dependența densității de sarcină 2DEG de potențialul porții	98
	• <i>Structuri de tip N-OFF</i>	100
	• <i>Structuri de tip N-ON</i>	100
IV.3	Capacitatea de poartă	103
IV.3.1	Introducere	103

V. TRANZISTORI HEMT CU DOUĂ INTERFEȚE

(Double-Heterojunction HEMT)

V.1	Introducere	106
V.2	Principii fizice de funcționare	107
V.3	Nivelul Fermi la interfețele top și bottom	110
V.4	Controlul concentrației superficiale	111
V.5	Capacitatea de poartă a structurilor DH-HEMT	
V.6	Un model analitic al structurii	113
V.7	Concordanța cu datele experimentale și teoretice	118
V.8	Influența parametrilor geometrici	119
V.9	Caracteristica statică	125
V.10	Estimarea frecvenței de tăiere	126
BIBLIOGRAFIE		127

I. IDEILE ȘI EVOLUȚIA DOMENIULUI

I.1 Introducere

Domeniul dispozitivelor nanometrice are o istorie fascinantă. Conceptele teoretice și metodele experimentale au evoluat într-o permanentă și strânsă legătură cu progresul făcut spre înțelegerea profundă a fenomenelor fizice asociate cu existența stării condensate. Această evoluție a fost atât de rapidă încât heterostructurile semiconductoare cuantice au ajuns să facă parte din aparatura electronică utilizată cotidian. Receptoarele moderne, plasate pe sateliții de televiziune, utilizează tranzistori cu zgomot extrem de scăzut (low-noise devices, LND), în care conducția curentului electric este datorată electronilor sau gurilor cu mobilitate înaltă [high electron (hole) mobility transistors, HEMT sau modulation-doped field-effect transistors, MODFET]; în aparatura de redare pentru compact-disk se găsesc diode laser a căror funcționare se bazează pe existența gropilor cuantice de potențial (quantum-well devices, QWD), [96NÖT]. În ambele cazuri este utilizat efectul de confinare unidimensională a purtătorilor de sarcină. Ca urmare, dependența de tip $E^{1/2}$ a densității de stări $D(E)$ cu energia, valabilă în volumul structurilor masive, este schimbată (cu o bună aproximație) într-o funcție de tip treaptă, caracteristică straturilor monocristaline, subțiri. Este bine să subliniem aici următoarea circumstanță remarcabilă: în cazul sistemelor bidimensionale, pentru domeniul energetic în care se poate neglija dependența de energie a masei efective m^* , densitatea stărilor energetice $D(E)$ nu depinde de energie și are valoarea $m^* / \pi \hbar^2$, incluzând degenerarea datorată spinului [$D(E)$ este definită ca numărul dN al stărilor principial posibile, corespunzătoare intervalului energetic dE și suprafeței elementare dS]. Obținerea heterojoncțiunilor, a gropilor de potențial sau a super-rețelelor semiconductoare cu proprietăți reproductibile și controlate la scară atomică, reclamă tehnologii de creștere sofisticate și extrem de scumpe. Două dintre cele mai folosite sunt epitaxia cu fascicule moleculare MBE (molecular-beam epitaxy) și epitaxia din fază de vapori MOVPE (metal-organic vapour phase epitaxy). Reducerea ulterioară a dimensionalității conduce la obținerea sistemelor cuantice uni-dimensionale, adică a așa numitelor "fire cuantice" (quantum wires) [96COL] sau chiar a sistemelor zero-dimensionale, "puncte cuantice" (quantum dots) [94DRE, 94MAR], care, principial, reprezintă structurile cu grad maxim de confinare cuantică. Corespunzător, dependența de energie a densității de stări își schimbă aspectul de la cel în "dinți de fierăstrău" (sawtooth) caracteristic firelor cuantice, la cel singular corespunzător punctelor cuantice. Datorită acestor modificări radicale în configurația energetică a stărilor și a spațiului fazelor, electronii formează sisteme corelate, cu proprietăți fizice fundamentale noi, în care fenomenele de interferență cuantică au un rol decisiv. Fenomenele cuantice

se pot, cel puțin principial, manifesta la scară macroscopică sub forma unor *dependențe anormale ale densității de curent de tensiunea aplicată pe structură* (regiuni de rezistență diferențială negativă, NDR), de inducția câmpului magnetic (cuantificarea conductanței, cunoscută sub numele de efect Hall cuantic întreg IQHE, sau fracționar FQHE) sau *în spectrele de absorbție și emisie a radiației electromagnetice* (unul dintre efectele cele mai studiate pentru aplicațiile sale în optoelectronică fiind quantum cascade laser effect, QCLE). Pentru ca efectele amintite să poată fi evidențiate experimental, *o primă condiție este aceea ca dimensiunile structurilor să fie mai mici sau de ordinul lungimii de undă de Broglie asociate electronilor*. În cristalul din GaAs monocristalin, unul dintre semiconductorii cei mai utilizați datorită mobilității intrinseci mari, lungimea de undă asociată electronilor are o valoare tipică de 50 nm. Această valoare depășește cu două ordine de mărime valoarea constantei rețelei cubice a arseniurii de galiu, care este aproximativ 5Å. În asemenea condiții, *electronii nu pot fi imaginați ca puncte materiale care se deplasează prin rețeaua cristalină*. Într-o sferă cu diametrul efectiv egal cu lungimea de undă și centrul coincident cu cel al pachetului de undă, se găsește un număr mare de atomi și defecte ale rețelei care, din punct de vedere cuantic, interacționează simultan cu electronul. Nu putem, nici măcar principial, afirma că interacția are loc între electronul amintit și un anumit atom din sfera amintită. Dacă am proceda în acest fel, însumând probabilitățile de interacție cu diferiții atomi am obține un rezultat greșit [61FEY, 65FEY, 95BRA]. Acest rezultat ar elimina efectele de interferență și reprezintă cazul limită clasic, corespunzător lungimilor de undă mici (acesta este desigur un model bun în cazul în care suntem interesați de interacția cu rețeaua cristalină a fasciculelor de electroni extrem de rapizi) [93CRI, 95CRI]. În realitate trebuie însumate amplitudinile pentru interacțiile cu diferiții atomi conținuți în sferă. Modulul pătrat al sumei astfel obținute conține efectele de interferență dar șterge identitatea centrilor care împrăstie pachetul de unde. Studiile experimentale și teoretice ale acestor fenomene au o importanță care nu poate fi pusă în discuție. Ea atinge atât latura unor aplicații de excepție (cele mai cunoscute au fost deja amintite) cât și domeniul cunoașterii fundamentale. Tehnici experimentale rafinate, dezvoltate mai ales în ultimul deceniu, au permis diversificarea și mărirea gradului de subtilitate al întrebărilor pe care fizicienii le adresează Naturii. Uneori "răspunsurile" experimentale pe care le primim sunt "ușor" de înțeles în lumina conceptelor tradiționale și, prin urmare, "ușor" de încadrat în schemele cognitive de care dispunem în prezent. Această ușurință este, în același timp, cea care pune sub semnul unor justificate îndoieli profunzimea întrebărilor (chiar corectitudinea lor, în anumite cazuri). Este amuzant să remarcăm faptul că Natura ne obligă să trăim într-o lume plină de răspunsuri (totdeauna corecte!) la întrebările (posibile) pe care, încă, nu le-am formulat. Noile dispozitive nanometrice au permis testări "pe viu" ale unor teorii (nici prin teorii înțelegem de fapt algoritmi conceptuali care utilizează "mașinăria" de calcul a mecanicii cuantice și conservă interpretarea de tip Copenhaga) ale căror

predicții exotice se află într-o profundă conexiune cu fundamentele și semnificația aparatului mecanicii cuantice [84BER], [93RES, 94RES, 97RES]. Observațiile cuprinse în paranteza rotundă, nu se aplică decât parțial referinței [93AHA]. Rezultate relativ recente [88CHA], referitoare la efectul Hall cuantic întreg (IQHE) și cel fracționar (FQHE), par să readucă în actualitate ideea mai veche, dar foarte interesantă, că multe probleme (răspunsuri) ridicate (căutate) în domeniul energiilor mari sau foarte mari, au un analog (se găsesc) în domeniul energiilor mici [85SCH].

I.2 Perioada Esaki - Tsu

Conceptul de super-rețea cristalină nu este, din punct de vedere fundamental, distinct de conceptul de rețea cristalină. Într-o super-rețea cristalină (superlattice, SL), pe care o presupunem lipsită de defecte, purtătorii de sarcină se mișcă de asemenea într-un potențial periodic, însă perioada spațială asociată cu variația potențialului este, de cele mai multe ori, mult mai mare decât perioada unei rețele cristaline naturale. Cercetările asupra unor asemenea sisteme semiconductoare au început în perioada anilor 1969-1970, odată cu lucrările de pionierat ale cercetătorilor L. Esaki și R. Tsu [69ESA, 70ESA]. Ei au propus sintetizarea unei structuri cu periodicitate unidimensională adițională, formată din straturi foarte subțiri, dispuse periodic în lungul direcției de creștere a cărei perioadă să fie mai mică decât drumul liber mediu al electronilor. O asemenea structură ar putea fi obținută, strat atomic cu strat atomic, dacă am dispune de un procedeu de epitaxie perfect. Ideea construirii unei super-rețele apare în mod natural atunci când se studiază fenomenul de tunelare rezonantă prin sisteme cu două sau mai multe bariere de potențial. Undele care formează pachetul de unde asociat electronului sunt transmise și reflectate parțial în regiunile barierelor de potențial, conducând prin interferență la apariția fenomenului de tunelare rezonantă [65LAN, 70MER, 77COH]. *Parametrul critic, care stabilește regimul de transport, este prin urmare drumul liber mediu asociat electronilor. Drumul liber mediu este, după cum bine se cunoaște, puternic influențat de gradul de perfecțiune al rețelei, valoarea masei efective și temperatură. Pentru electroni cu o energie medie tipică de ordinul $E = 0.1 \text{ eV}$ și o masă efectivă $m^* = 0.1m_0$ (m_0 este masa de repaus a electronului în vid), lungimea de undă de Broglie dominantă se poate estima comod cu ajutorul ecuației $\lambda = h(2m^*E)^{-1/2}$, în care h este constanta lui Planck. **Dacă dimensiunile specifice (cum ar fi perioada spațială, lărgimea barierelor de potențial și lărgimea gropilor de potențial), asociate nanostructurii, sunt mai mici decât drumul liber mediu iar împrăștierea pe interfețele structurii este neglijabilă, fenomenele de transport al purtătorilor de sarcină sunt în întregime guvernate de regimul de transport cuantic.***

În Fig.1 este reprezentată schematic zona în care transportul purtătorilor de sarcină este controlat de regimul cuantic (regiunea hașurată). Pe măsură ce densitatea

volumică a defectelor este micșorată (gradul de cristalinitate crescut) sau temperatura T a cristalului scade, drumul liber mediu crește considerabil.

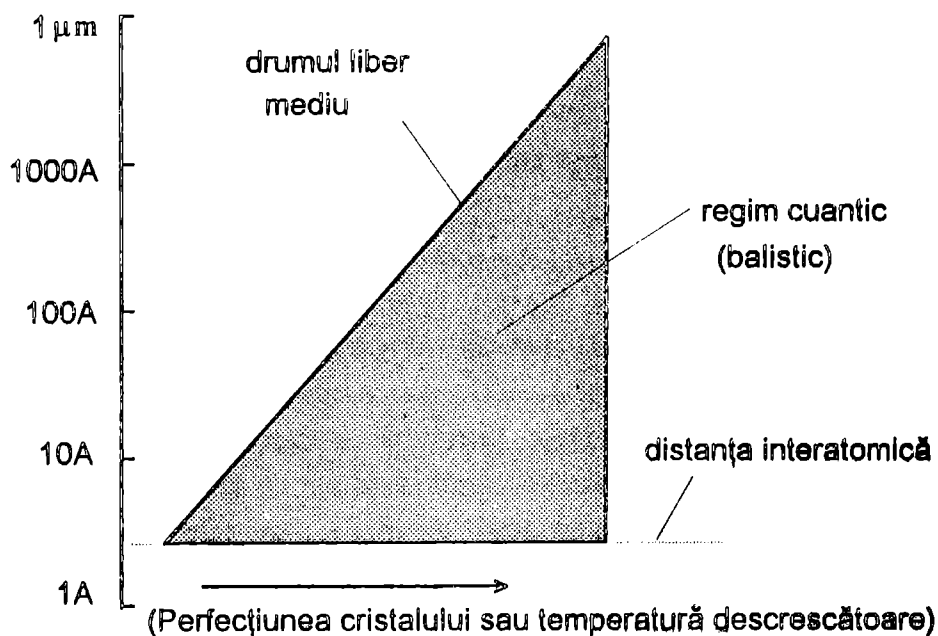


Fig.1 Ilustrare schematică a regimului cuantic (hașurat) {după L. Esaki, [82ESA]}

Când drumul liber mediu depășește cu un ordin de mărime constanta naturală a rețelei cristaline, cu precauții experimentale severe aplicate procedurii de creștere epitaxială, devine principial posibilă creșterea unei structuri, cu periodicitate adițională indusă, a cărei perioadă spațială este mai mică decât drumul liber mediu.

Esaki și Tsu au atras atenția asupra faptului că există două modalități tehnologice distincte pentru obținerea unei super-rețele [69ESA, 70ESA]:

- utilizarea dopajului modulat (MOD);
- variația periodică, în lungul direcției de creștere, a compoziției chimice a straturilor crescute;

În primul caz compoziția chimică a materialului semiconductor este menținută aceeași în lungul direcției de creștere (uzual direcția z), însă concentrația volumică a impurităților (gradul de dopaj) este modulată de o funcție reală $F(z)$, periodică, pozitiv definită, cu valori în intervalul $[0,1]$ astfel încât să putem scrie $N_{\text{donor,acceptor}}(z) = N_{\text{donor,acceptor,max}}F(z)$. Întrucât funcția de modulare $F(z)$ este periodică, notăm cu Λ perioada ei principală. Astfel, $F(z+\Lambda) = F(z)$. Această funcție se poate dezvolta în serie Fourier, după cum urmează:

$$F(z) = F_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \sin n \frac{2\pi}{\Lambda} z + B_n \cos n \frac{2\pi}{\Lambda} z \right] \quad (I.1)$$

Valorile coeficienților din dezvoltarea (I.1) sunt, potrivit analizei matematice, date de:

$$F_0 = \frac{1}{\Lambda} \int_{\xi}^{\xi+\Lambda} F(z) dz$$

$$A_m = \frac{2}{\Lambda} \int_{\xi}^{\xi+\Lambda} F(z) \sin(mkz) dz$$

$$B_m = \frac{2}{\Lambda} \int_{\xi}^{\xi+\Lambda} F(z) \cos(mkz) dz$$

(I.2))

unde ξ este o valoare arbitrară a lui z iar $k=2\pi/\Lambda$. Un caz particular, dar extrem de important pentru aplicațiile practice, este cel al modulării cu o funcție $F(z)$, care poate fi aproximată cu o succesiune de pulsuri dreptunghiulare. Un puls strict dreptunghiular nu admite o dezvoltare Fourier de forma (I.1), totuși putem obține o aproximație rezonabilă pentru profilul dopajului utilizând (I.1) și coeficienții (I.2). Un asemenea profil de dopaj poate fi obținut experimental alternând, în timpul procesului de creștere epitaxială a stratului, de-a lungul axei z , regiunile de lărgime L_i nedopate (intrinseci), cu regiuni de lărgime L_d , dopate uniform la o concentrație $N_{donor,acceptor}$. Perioada spațială a unei asemenea super-rețele va fi, în mod evident, $\Lambda=L_i+L_d$. În asemenea condiții, cu o alegere convenabilă a originii, funcția de modulare $F(z)$ se poate scrie doar cu ajutorul seriei în care apar funcțiile cosinus:

$$F(z) = F_0 + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos(nkz) \quad (I.3)$$

De data aceasta, F_0 și coeficienții sumei din membrul drept al ecuației (I.3) sunt ușor de calculat. Folosind formulele (I.2) obținem:

$$F_0 = L_d / \Lambda$$

$$B_n = \frac{2}{n\pi} \sin(n\pi F_0) \quad , \quad n = 1, 2, \dots \quad (I.4)$$

Apelând la aceste relații simple se poate repeta analiza "clasică" a mișcării electronului în potențialul periodic, generat după stabilirea echilibrului termodinamic.

În cazul super-rețelelor de compoziție lărgimea benzii interzise E_g este o funcție periodică de z și pot apărea probleme suplimentare legate de diferențele morfologice ale compușilor semiconductori care participă la stabilirea condițiilor

termodinamice la interfețe. Din punct de vedere formal aceste complicații nu sunt esențiale, variația periodică a bezii interzise fiind echivalentă cu introducerea unui potențial periodic adițional. Acest potențial acționează ca o perturbație asupra structurii de benzi energetice a materialelor inițiale. Amplitudinea efectului este dependentă de amplitudinea perturbației și de constanta ei de periodicitate. Constanta de periodicitate a potențialului adițional este, în general, mult mai mare decât constantele de rețea ale materialelor implicate, astfel încât zona Brillouin este divizată într-o serie de minizone. Datorită ridicării degenerării poziționale, nivelurile energetice neperturbate ale gropilor de potențial se despică și generează sub-benzi permise înguste, separate prin mini-benzi interzise, situate în banda de conducție a cristalului original (Fig.1.2)

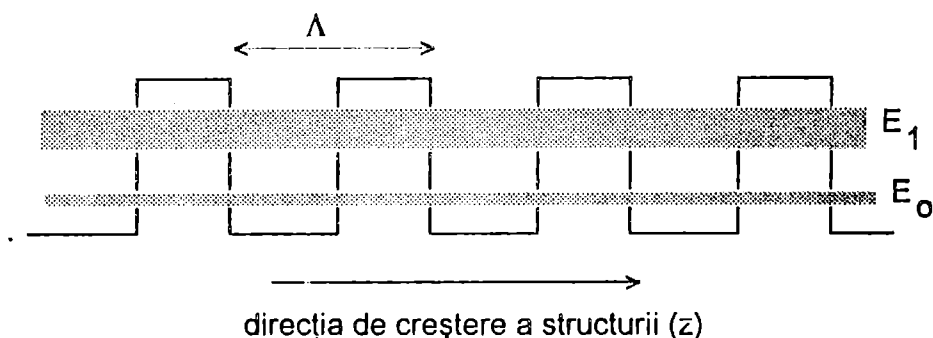


Fig.1.2 Super-rețea de compoziție; sunt figurate minibenzile de conducție E_0 , E_1

Primele rezultate experimentale au fost comunicate în 1970 de către Esaki și colaboratorii săi [70aESA]. Ei au utilizat în experimente o super-rețea sintetizată de către Blakeslee și Aliotta [70BLA]. Structura a fost obținută schimbând periodic fracția molară x a fosforului în sistemul $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$. Perioada Λ în lungul direcției de creștere a fost de ordinul a 200 Å, valorile utilizate pentru x fiind 0, 0.1, ..., 0.5. Datorită diferențelor de constantă de rețea între GaAs și $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$, care pentru $x=0.5$ atinge 1.8%, regiunea interfețelor este puternic deformată. Din acest motiv, deși spectrele de difracție cu raze X, investigațiile prin microscopie electronică și luminiscentă catodică au confirmat formarea super-rețelei, ei nu au reușit să evidențieze în fenomenele de transport nici unul dintre fenomenele cuantice prezise de teorie. Puțin mai târziu, în 1971 și 1972, Cho [71CHO] (utilizând MBE) și respectiv Woodall [72WOO] (utilizând LPE) au demonstrat că producerea unor structuri periodice, în care straturile din GaAs alternează cu cele din $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, nu ridică probleme deosebite. **Foarte repede, tehnica epitaxiei cu fascicule moleculare s-a impus datorită acurateței și a reproductibilității deosebite.**

Primele efecte cuantice prezise de teorie au fost descoperite în 1972 de către Esaki și colaboratorii săi [72ESA]. Ei au măsurat dependența de tensiune, $I(V)$, a

curentului pentru o super-rețea de tip AlGaAs/GaAs și au obținut regiuni de rezistență diferențială negativă.

În 1973 Tsu și Esaki au publicat un studiu care, datorită importanței lui, a devenit în timp o lucrare clasică în domeniu. Ei au arătat că densitatea de curent $j(V)$ pentru structurile periodice, în lungul direcției de creștere, poate fi calculată folosind următoarea formulă [73TSU]:

$$j_z(V) = \frac{em^*k_B T}{2\pi^2\hbar} \int_0^\infty \tau(E, V) \ln \left[\frac{1 + \exp(E_F - E)/k_B T}{1 + \exp(E_F - E - eV)/k_B T} \right] dE \quad (I.5)$$

în care E_F este poziția nivelului Fermi, T este temperatura, E este energia cinetică de mișcare de-a lungul axei z , m^* este masa efectivă iar $\tau(E, V)$ este coeficientul de transmisie cuantică prin structură.

Pentru obținerea acestei relații au fost necesare investigații teoretice preliminare, care au avut ca scop clarificarea aspectelor fizice legate de dimensionalitatea și analiza dinamicii electronilor de conducție, aflați în sub-benzi energetice înguste, de tipul celor prezentate în Fig.1.2. Utilizând o metodă elaborată de către Chambers în 1952 [52CHA], a fost obținută o relație între câmpul electric aplicat F și media vitezei de drift, v_d . Ecuațiile de mișcare sunt:

$$\hbar \partial k_z / \partial t = eF \quad \text{și} \quad v_z = \hbar^{-1} \partial E_z / \partial k_z \quad (I.6)$$

iar creșterea vitezei în intervalul infinitesimal de timp dt este:

$$dv_z = eF \hbar^{-2} (\partial^2 E_z / \partial k_z^2) dt \quad (I.7)$$

Viteza medie de drift se poate calcula ținând cont de timpul de împrăștiere τ_s :

$$v_d = \int_0^\infty \exp(-t/\tau_s) dv_z = eF \hbar^{-2} \int_0^\infty (\partial^2 E_z / \partial k_z^2) \exp(-t/\tau_s) dt \quad (I.8)$$

Integrala (I.8) se calculează ușor, dacă se utilizează pentru dependența $E_z(k_z)$ o relație de tip sinusoidal, rezultatul fiind:

$$v_d = \frac{eF\tau_s}{m^*(0)} \left[1 + \left(\frac{eF\tau_s \Lambda}{\hbar} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (I.9)$$

Cu aceste aproximații, dependența densității de curent j_z de câmpul electric F se scrie:

$$j_z = env_d \quad (I.10)$$

Valoarea pentru $m^*(0)$ este determinată de raza de curbură a ramurii de dispersie $E_z(k_z)$ la $k_z=0$, iar n este concentrația electronilor. Densitatea de curent are un maxim pentru $2\pi eF\tau_s \Lambda / \hbar = 1$, apoi descrește datorită descreșterii vitezei de drift, conducând la apariția regiunii de rezistență diferențială negativă (NDR). Acest rezultat simplu, dar de mare importanță principală, demonstrează că, dacă la valori mici ale câmpului electric electronii capătă suficientă energie pentru a ajunge în vecinătatea punctelor de inflexiune ale dependenței $E_z(k_z)$ (indicate prin săgeți în Fig.1.3), câmpul electric va micșora viteza electronului, în loc să o mărească. O posibilitate deosebit de interesantă a fost evidențiată în 1974 de către Gnutzmann și colaboratorii săi [74GNU]. În anumite circumstanțe este posibilă obținerea unei super-

rețele cu bandă interzisă directă, chiar dacă ea este sintetizată din compuși semiconductori care au bandă interzisă indirectă.

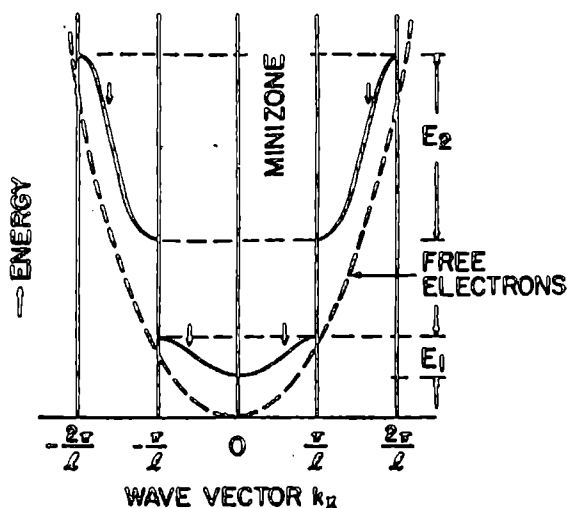


Fig.I.3 Relația de dispersie în interiorul minizonelor energetice, pentru o super-rețea în care profilul potențialului este cel prezentat în Fig.I.2. {după L. Esaki [82ESA]; precizăm că în notațiile lui Esaki, l este perioada super-rețelei, iar direcția x este ortogonală pe interfețele structurii}.

Acest rezultat este datorat suprapunerii zonelor Brillouin, urmare a periodicității adiționale introduse de potențialul super-rețelei. Ecuația (I.10) este bine confirmată de rezultatele experimentale obținute de Esaki și colectivul său, care a studiat o super-rețea cu 100 de perioade, fiecare

perioadă conținând o groapă de potențial (GaAs) de lărgime 60Å și o barieră ($Al_{0.5}Ga_{0.5}As$) de lărgime 10Å. Întreaga structură a fost crescută între două straturi de GaAs dopate, în care concentrația electronilor atingea $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Concentrația electronilor în super-rețea a fost estimată la aproximativ 10^{16} cm^{-3} . Curba experimentală I-V (Fig.I.4) are aceeași formă cu cea prezisă de ecuația (I.10).

Tunelarea rezonantă în sisteme de tip dublă barieră a fost observată și studiată în 1974 de către Chang și colaboratorii [74CHA]. Fig.I.5 prezintă caracteristica I-V și derivata ei pentru o structură simetrică, de tip dublă-barieră, care conține o groapă de potențial (GaAs) cu lărgimea de 50Å și două bariere identice ($Al_{0.7}Ga_{0.3}As$) cu lărgimea de 80Å. Electrozii de contact (GaAs) aveau concentrația dopantului (n) 10^{18} cm^{-3} .

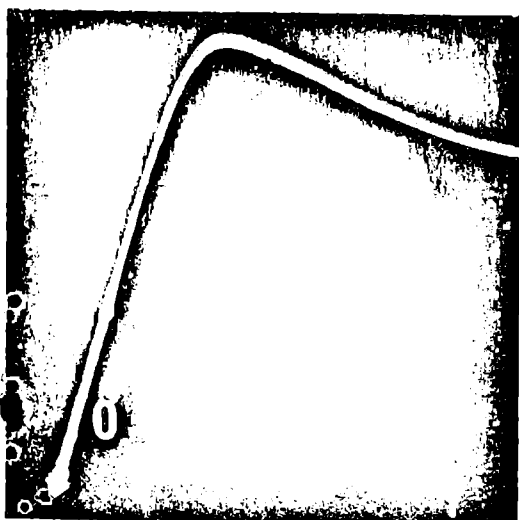


Fig.I.4 Caracteristica I-V obținută experimental, la temperatura camerei, pentru o super-rețea cu perioada de 70Å, fiecare perioadă conținând o groapă de potențial (GaAs) cu lărgimea de 60Å și o barieră ($Al_{0.5}Ga_{0.5}As$) cu lărgimea de 10Å. Concentrația electronilor în electrozii de contact (GaAs) este $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [după [72ESA]].

Așa cum se poate observa analizând figura I.5, când structura este polarizată, rezonanța este obținută datorită alinierii nivelului Fermi al emitorului cu nivelurile energetice cuasi-legate (rezonante) conținute în groapa de

potențial.

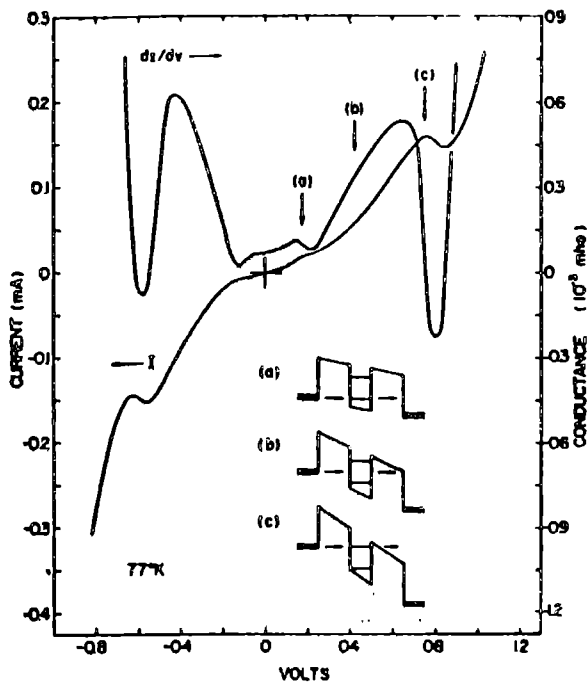


Fig.I.5. Caracteristica I-V și cea a conductanței (obținute experimental) pentru o structură rezonantă de tip dublă barieră (DBRT). Dimensiunile structurii sunt indicate în text. (a), (c) indică situațiile în care se obțin rezonanțele, situația (b) corespunde unei energii incidente situate între rezonanțe {după [74CHA]}.

Curentul electric prezintă maxime pentru acele tensiuni care corespund unor energii de două ori mai mari decât energiile stărilor cuasi-legate, măsurate în absența tensiunii de polarizare, luând ca referință energia benzii de conducție în emitor. Acest

rezultat este, după cum vom arăta în capitolul dedicat fenomenului de tunelare rezonantă, o consecință a simetriei structurii. Situațiile care corespund rezonanțelor sunt prezentate în insetul din Fig.I.5 (a), (c), fiind de asemenea marcate pe curbele experimentale. **Lărgimea rezonanțelor este dependentă de fluctuațiile lărgimilor barierelor și ale înălțimii barierelor de potențial ce le corespund.** Repetând experimentele cu structuri având diferite lărgimi ale barierelor de potențial s-au obținut rezultate care confirmă, fără nici un dubiu, că rezonanța este într-adevăr datorată existenței nivelurilor cuasi-legate: *exceptând împrăștierea rezultatelor datorată fluctuației inerente a parametrilor experimentali, poziția rezonanțelor este cea precisă de calculul cuantic al poziției nivelurilor cuasi-legate.* Din acest motiv, putem afirma că **analiza experimentală a sistemelor mezoscopice, a adus încă o confirmare experimentală a corectitudinii formalismului mecanicii cuantice.**

Efecte cuantice, deosebit de interesante, datorate efectelor câmpului electric aplicat, s-au obținut prin studiul fenomenelor de transport în super-rețele ce cuprind câteva zeci de perioade.

a) *la tensiuni mici, conducția curentului electric este datorată deplasării electronilor în interiorul minbenzilor energetice (mecanism de **conducție intra-bandă**).*

b) *atunci când tensiunea exterioară este suficient de mare, astfel încât energia potențială, datorată căderii de tensiune pe fiecare perioadă, devine comparabilă cu lărgimea minbenzii energetice, mecanismul de conducție intra-bandă nu mai funcționează. Explicația, cuantică, este, în acest caz, una simplă: nealinierea nivelurilor energetice cuasi-legate, corespunzătoare gropilor de potențial consecutive, crește cu diferența de potențial dintre ele: ca rezultat suprapunerea funcțiilor de undă este*

atenuată, curentul scade, și este generată o zonă de rezistență diferențială negativă. Dacă tensiunea continuă să crească, electronii tunelează regiunea apărută, localizată, de câmp înalt.

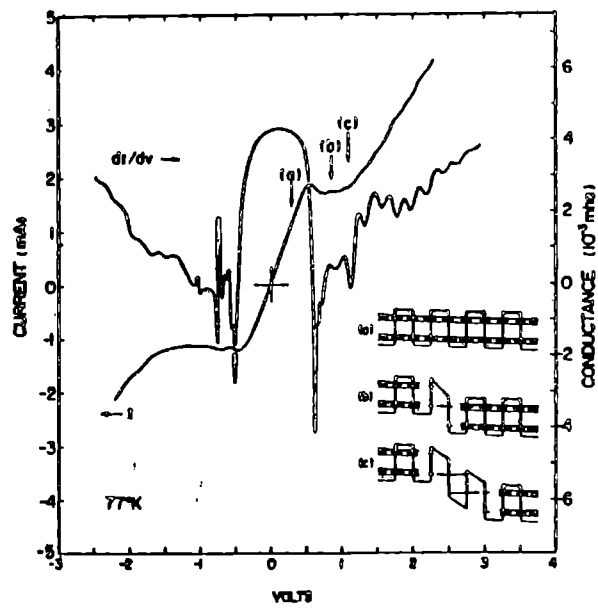


Fig. 1.6 Caracteristica I-V și cea a conductanței unei super-rețele cu 50 perioade, fiecare constând dintr-o groapă de potențial (GaAs) cu lărgimea de 45Å și o barieră de potențial (AlAs) cu lărgimea de 40Å. Concentrația electronilor în super-rețea este aproximativ 10^{17} cm^{-3} iar în regiunea contactelor aproximativ 10^{18} cm^{-3} .

Manifestarea experimentală a acestor fenomene este exemplificată în Fig. 1.6 care prezintă caracteristica I-V și cea a conductanței, pentru o super-rețea cu 50 de perioade, fiecare constând dintr-o groapă de potențial (GaAs) cu lărgimea de 45Å și o barieră de potențial (AlAs) cu

lărgimea de 40Å. Concentrația electronilor în super-rețea este aproximativ 10^{17} cm^{-3} iar în regiunea contactelor aproximativ 10^{18} cm^{-3} . Formarea domeniilor de câmp electric înalt este specifică dispozitivelor electronice care, în caracteristica lor I-V, prezintă regiuni de rezistență diferențială negativă (NDR). Formarea acestor domenii este "catalizată" de fluctuațiile formei, ale înălțimilor barierelor de potențial și de asemenea de fluctuațiile locale ale concentrației purtătorilor.

Observații:

- a) Trebuie să remarcăm că, odată domeniul format, procesul tunelării prin regiunea de câmp înalt limitează valoarea curentului prin structură, menținând în același timp mecanismul de conducție intra-bandă în celelalte regiuni ale structurii (de ce?).
- b) Această situație, generată de formarea domeniului, este menținută până când prima mini-bandă energetică, situată în stânga domeniului, devine aliniată cu a doua mini-bandă energetică, situată în dreapta lui (Fig. 1.6).
- c) Alinierea sub-benzilor energetice generează un maxim al curentului prin structură și mărește lărgimea zonei de câmp înalt (cum vă explicați scăderea curentului, datorată unei creșteri mici tensiunii de polarizare, peste valoarea la care s-a obținut maximul curentului?).

Aceste rezultate experimentale, obținute de către Chang, Esaki și Tsu, reprezintă probabil primele evidențieri clare ale existenței stărilor cuantice în sistemele cu una sau mai multe guri de potențial.

Importanța și eleganța rezultatelor obținute în perioada de pionierat au fost surprinse de L. Esaki în următoarele cuvinte:

"The elegance of one-dimensional quantum physics, which had long remained a textbook exercise, could now, for the first time, be practiced in a laboratory (Do-It-Yourself Quantum Mechanics!)"

1.3 Dezvoltări ulterioare ale conceptului de super-rețea

1.3.1 Cele mai utilizate heterojuncțiuni

Ideile inițiale ale lui Esaki și Tsu au cunoscut o dezvoltare rapidă și au contribuit în mod decisiv atât la dezvoltarea tehnicilor experimentale din domeniul microelectronicii, cât și la perfecționarea metodelor de analiză teoretică utilizate în fizica stării condensate. Activitățile experimentale din laboratoarele marilor centre de cercetare s-au diversificat și au condus la observarea unor noi fenomene și la construirea unor dispozitive cu heterojuncțiuni aproape ideale, a căror funcționare, bazată pe noile concepte, utilizează reducerea dimensionalității mișcării cuantice.

Cele mai semnificative rezultate, atât din punctul de vedere al cercetării fundamentale cât și din cel al progreselor tehnologice, au fost obținute, într-o primă etapă, utilizând sisteme de tipul $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, InAs/GaSb , InAs/AlSb și $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Fig. 1.7 vă prezintă diagramele benzilor de energie, înainte de stabilirea echilibrului termodinamic și după stabilirea acestuia, precum și distribuția potențialului în super-rețelele generate, pentru trei dintre sistemele menționate.

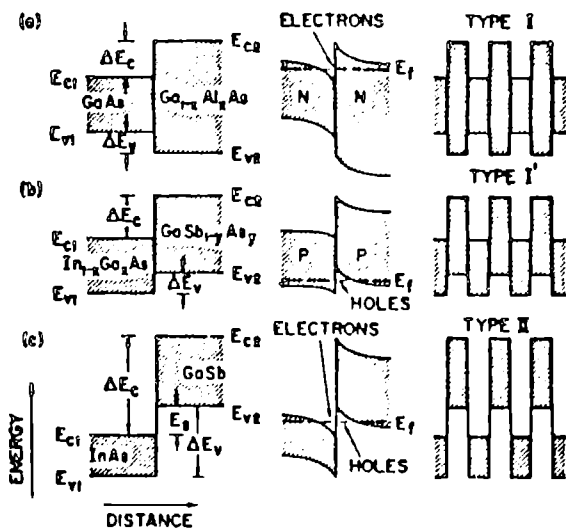


Fig. 1.7 Corelațiile existente între benzile energetice de valență și conducție, la interfața heterojuncțiunilor: (a) $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, (b) $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$ și (c) InAs/GaSb (stânga), diagrama benzilor de energie ale super-rețelelor care le corespund (dreapta). În mijloc sunt reprezentate calitativ diagramele benzilor de energie la echilibru termodinamic și efectul de confinare al purtătorilor de sarcină (după [82ESA])

Observații:

a) Așa după cum se poate observa din această figură, în cazul heterojuncțiunii $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ benzile interzise ale celor doi compuși semiconductori se suprapun, astfel încât limita superioară a benzii de valență și cea inferioară a benzii de conducție pentru GaAs sunt plasate în interiorul benzii interzise a compusului $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

b) În cazurile (a) și (b) curbura benzilor de energie și efectul de confinare a electronilor sau golurilor sunt ambele influențate de tipul dopajului folosit, pe când în cazul (c) dopajul nu influențează considerabil aceste fenomene.

c) În sistemul InAs/GaSb este generată o situație deosebită: limita inferioară a benzii de conducție în InAs se află sub limita superioară a benzii de valență în GaSb. În literatura de specialitate super-rețelele generate de aceste trei heterojuncțiuni sunt cunoscute sub numele de super-rețele de tip I, I' și respectiv II.

Varietatea și relevanța investigațiilor experimentale din ultimul deceniu face ca sarcina de a vă prezenta o sinteză să fie una dificilă, cu rezultate totdeauna discutabile, chiar dacă apelăm la criterii restrictive severe. Acestea sunt de multe ori influențate decisiv de preocupările, viziunea și contribuțiile respectivului colectiv. În continuare vă vom prezenta (în tabelul I) o sinteză întocmită de Leo Esaki.

TABEL I. SISTEME DE TIP SUPER-REȚEA

III-V/III-V [referințe]	Nepotrivire de rețea (procente)	Metode de obținere	Studii
GaAs/Ga _{1-x} Al _x As (GaAs/AlAs)	0.16% pentru x = 1	MBE MOCVD	studiată intensiv
InAs/GaSb (In _{1-x} Ga _x As/ GaSb _{1-y} As _y)	0.61%	MBE	studiată intensiv
GaSb/AlSb [81NAG], [82MEN], [82VOI]	0.66%	MBE	proprietăți optice
InAs/AlSb InAs/AlSb _{0.84} As _{0.16} Chang și col.	1.26% (~ 0%)	MBE	fenomene de transport
InP/ In _{1-x} Ga _x P _{1-z} As _z x=0.12, z=0.26 [77REZ]	~ 0%	LPE	laseri D-H
InP/In _{1-x} Ga _x As x=0.47 [83BRU]	~ 0%	MOCVD	magneto-transport
GaAs/GaAs _{1-x} P _x [70ESA], [83LUD]	1.79% x = 0.5	MOCVD CVD	difracție X emisie stimulată

$\text{GaP/GaP}_{1-x}\text{As}_x$ $x < 0.5$ [82OSB],[82GOU] [83CAM]	1.86% $x = 0.5$	MOCVD	<i>fotoluminescență interdifuzie</i>
$\text{GaAs/Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ $x = 0.2$ [83FRI]	1.43% $x = 0.2$	MBE	<i>fenomene de transport</i>
GaP/AlP [82KIM]	0.01%		<i>teoretic</i>
GaSb/InSb [76GRE],[77ELT]	6.29%	sputtering	<i>interdifuzie</i>
IV/III-V			
Ge/GaAs [81CHA]	0.08%	MBE	<i>metalurgice</i>
Si/GaP [81MAD]	0.36%		<i>teoretice</i>
IV/IV			
$\text{Si/Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ $x < 0.22$ [75KAS],[82MAN]	0.92% $x = 0.22$	MBE CVD	<i>dislocații, amplificarea mobilității</i>
II-VI/II-V I			
CdTe/HgTe [79SCH],[82FAU]	0.74%	MBE	<i>teoretice, metalurgice</i>
IV-VI/IV-VI			
$\text{PbTe/Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ [80KIN],[82KIN]	0.44% $x = 0.2$	HW (Hot Wall)	<i>interdifuzie, magnetotransport</i>
$\text{PbTe/Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$ $x = 0.03$ [82PAR]		MBE	<i>dislocații, interdifuzie</i>

Super-rețele cu straturi ultra-subțiri (UTLS)			
GaAs/AlAs GaAs/InAs GaAlAs/Ge [76GOS], [79PET]		MBE	<i>metalurgice, proprietăți optice</i>
Super-rețele obținute prin dopaj modulată (Doping Superlatt.)			
p-GaAs/n-GaAs [72DÖH], [81DÖH]		MBE	<i>studiată intensiv</i>
Super-rețele multi-component			
InAs/GaSb/AlSb [81ESA]		MBE	<i>posibilitatea realizării</i>

Există desigur o mulțime de alte lucrări importante (mai recente) care conțin rezultate referitoare la metode noi de obținere a structurilor cuantice, cum ar fi "Flow-rate Modulation Epitaxy" (FME) [85SUN], [85NIS], [85KOB] sau "Vapor Transport Epitaxy (VTE) [86HOR].

1.3.2 Sistemul GaAs/AlGaAs.

Cele mai studiate fenomene și aplicații ale acestui sistem, întâlnite în studiile publicate în literatura de specialitate, pot fi grupate în următoarele categorii:

- *Absorbție optică*
- *Lasere*
- *Fotocurenți și luminiscentă*
- *Împrăștiere Raman*
- *Efecte magneto-cuantice*
- *Dopare modulată și dispozitive cu mobilitate înaltă*
- *Efect Hall cuantic*
- *Stări de impuritate și excitoni în gropi cuantice de potențial*

- *Bistabilitate optică excitonică*
- *Fotodiode cu avalanșă care utilizează heterojoncțiuni*
- *Sisteme uni-dimensionale*
- *Sisteme zero-dimensionale*

• *Absorbție optică*

Primele studii minuțioase ale spectrelor de absorbție optică în sisteme de tip GaAs/ AlGaAs au fost publicate în 1974 și 1975 de către Dingle și colaboratorii săi. *Aceștia au evidențiat în structura spectrelor experimentale atât contribuția stărilor confinate în gropi de potențial izolate [74DIN], cât și contribuția stărilor asociate gropilor de potențial cuplate [75DIN].*

a) În primul caz ei au sintetizat sisteme în care lărgimea gropilor de potențial (GaAs) a fost variată în intervalul 70Å - 500Å iar decuplarea cuantică s-a realizat prin intercalarea unor bariere de potențial de tipul $Al_xGa_{1-x}As$, cu grosimea mai mare decât 250Å. *La temperatură scăzută au fost observate mai multe picuri excitonice, care corespund diferitelor stări stări confinate ale electronilor și golurilor.*

b) În al doilea caz, al sistemelor cuplate, lărgimea gropilor de potențial (GaAs) a fost schimbată în intervalul 50Å - 200Å iar cuplajul între ele a fost considerabil mărit prin utilizarea unor bariere ($Al_xGa_{1-x}As$, $0.19 < x < 0.27$) mult mai subțiri, cu grosimea între 12Å și 18Å. *Spectrele obținute la temperaturi scăzute au indicat în mod clar că prin ridicarea degenerării de poziție, datorată cuplajului, nivelurile rezonante se despică și evoluează către formarea primei mini-benzi energetice a super-rețelei.*

• *Laseri*

În 1975 van der Ziel și colaboratorii săi [75ZIE] au observat, la 15 °K, în structuri de tipul celor de mai sus, oscilații laser datorate pompajului optic. Oscilațiile se produc la energii puțin mai mici decât cele asociate cu excitonul corespunzător primei stări confinate în groapa de potențial (GaAs, 50 - 500Å).

După aproape trei ani, în 1978, Dupuis și colaboratorii [78DUP], apoi Holonyak și colaboratorii [78HOL] raportează obținerea efectului laser, la temperatura camerei, în diode laser $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$, cu gropi de potențial cuantice, sintetizate utilizând MOCVD, lărgimea gropii fiind în jur de 200Å. Ei au observat tranziții către starea confinată cu $n=5$, corespunzând unei energii de 1.8 eV (0.69 micrometri), situată cu 0.29 eV deasupra benzii de conducție în GaAs.

Utilizând MBE, în 1981 Tsang [81TSA] raportează obținerea unei densități a curentului de prag j_{th} de $250 Acm^{-2}$ într-o structură cu mai multe gropi de potențial. O caracteristică remarcabilă a sistemelor laser MQWL (Multi-Quantum-Well Lasers),

care utilizează mai multe gropi cuantice de potențial, este aceea că lărgimea fasciculului în direcția perpendiculară pe planul joncțiunilor și dependența de temperatură a curentului de prag j_{th} sunt semnificativ reduse în comparație cu cele asociate sistemelor semiconductoare care, pentru obținerea efectului laser, utilizează heterojoncțiuni duble (DH-lasers).

• *Fotocurenți și luminiscență*

Legătura existentă între anomaliile observate în fenomenele de transport în super-rețele semiconductoare și stările cuantice asociate acestor sisteme a fost, în mare parte, clarificată în 1975 datorită studiilor întreprinse de Tsu și colaboratorii săi [75TSU] asupra fotocurenților. Ei au sintetizat super-rețele cu trei configurații, desemnate A, B și C, utilizând ca substrat n-GaAs (10^{18}cm^{-3}):

A) 100 perioade GaAs(35Å) / Ga_{0.8}Al_{0.2}As(35Å);

B) 80 perioade GaAs(50Å) / Ga_{0.78}Al_{0.22}As(50Å);

C) 50 perioade GaAs(110Å) / Ga_{0.55}Al_{0.45}As(110Å).

Grosimea totală este în toate cazurile aceeași, de ordinul unui micrometru, comparabilă cu lungimea de undă a fotonilor implicați în fenomenele optice asociate. Regiunea super-rețelei a fost intrinsecă iar electrodul superior era un strat de Au (100Å), semi-transparent. În partea superioară a figurii 1.8 este prezentată schematic diagrama benzilor de energie, stările energetice (notate E_1 , E_2) datorându-se potențialului periodic adițional. Dacă gropile de potențial sunt slab cuplate, ca în cazul super-rețelei de tip C, aceste stări sunt esențial discrete; în cazurile A și B ele se transformă în mini-benzi energetice prin creșterea suprapunerii funcțiilor de undă. În figura 1.8 este de asemenea prezentată dependența de energia fotonilor a fotocurentului normalizat, măsurată la 50K, fără tensiune aplicată. Observați că, pe măsură ce perioada super-rețelei este micșorată, fotocurentul crește, pozițiile maximelor sunt deplasate la energii mai mari, iar numărul maximelor observate scade. Energiile calculate sunt indicate prin săgeți, E_n fiind asociată cu tranziția din starea n (a golurilor grele în banda de valență) în cea corespunzătoare a benzii de conducție.

Mendez și colaboratorii [82MEN, 83MEN] au evidențiat atenuarea fotoluminiscenței de către câmpul electric. Pe măsură ce intensitatea câmpului electric crește, intensitatea luminiscenței scade, la intensități medii de câteva zeci de kV/cm (tensiune aplicată -0.4 V), ea atenuându-se aproape complet. Acest fenomen este de asemenea acompaniat de o deplasare către energii mai mari a poziției maximelor. Ei au presupus că aceste fenomene se datorează separării de către câmpul electric a electronilor și golurilor în regiunea gropii de potențial, urmată de modificarea corespunzătoare a stărilor cuantice.

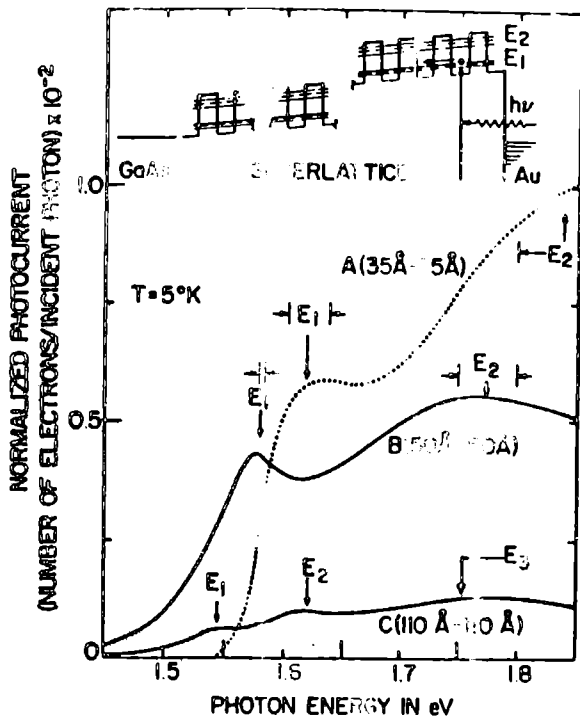


Fig. 18 Dependența fotocurentului normalizat de lungimea de undă a fotonilor, pentru super-rețelele de tip A, B, C (caracteristicile sunt prezentate în text). Sunt indicate energiile și lărgimile nivelurilor, calculate teoretic (după [75TSU]).

• Împrăștiere Raman

Observarea experimentală a măririi secțiunii eficace pentru împrăștierea Raman la energii ale fotonilor apropiate de rezonanța electronică, în super-rețele GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs cu diferite configurații, a fost raportată de către Manuel și colaboratorii săi în 1976 [76MAN].

Forma generală a liniei de rezonanță și pozițiile maximei obținute experimental sunt în concordanță cu cele prezise de calculele teoretice bazate pe parauzarea dimensionalității stărilor.

Una dintre cele mai puternice metode spectroscopice dedicate studiului sistemelor electronice bidimensionale s-a dovedit a fi împrăștierea inelastică, rezonantă, a luminii. Eficiența acestei metode a fost evidențiată pentru prima dată de Burstein și colaboratorii săi [79BUR]. Ei au subliniat că metoda permite separarea spectrului de excitație de tip uni-particulă de cel corespunzător excitațiilor colective. O asemenea separare este importantă pentru că oferă posibilitatea determinării poziției nivelurilor de energie ale electronilor în regiunea gropii de potențial.

Observarea directă a împrăștierei luminii, în heterojuncțiuni GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, datorată mecanismelor de excitație uni-particulă între nivelurile discrete de energie ale sistemelor electronice bidimensionale, a fost realizată de Abstreiter, Ploog [79ABS], Pinczuk și colaboratorii săi [79PIN].

Utilizând un model electronic simplu, de tip Kronig-Penney, și considerând variabilă aproximația fononică ECL (elastic continuum limit), în 1980 Colvard și col. [80COL] au explicat datele experimentale referitoare la împrăștierea Raman datorată fononilor longitudinali din super-rețeaua GaAs (13.6 Å) / AlAs (11.4 Å).

• Efecte magneto-cuantice

Un pas important pentru dezvoltarea tehnicilor experimentale și pentru rafinarea metodelor de analiză teoretică a fost făcut în 1977 de către Chang și col. [77CHA], prin observarea, pentru prima dată, a oscilațiilor magneto-rezistenței (efect Shubnikov - de Haas) pentru super-rețele de tipul GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs în care densitatea de curent

este paralelă cu planul interfețelor. Variația relativă $\Delta R/R$ a rezistenței în prezența câmpului magnetic este prezentată în Fig. 1.9, pentru super-rețeaua GaAs(90Å)/Ga_{0.89}Al_{0.11}As(90Å), având $n = 1.9 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ și grosimea totală de aproximativ 2 micrometri {super-rețeaua de tip C în lucrarea [77CHA]}. Direcția densității de curent este axa x, direcția inducției magnetice este conținută în planul y-z iar θ definește unghiul făcut de ea cu axa z. Se observă că, în regiunea unghiurilor θ mici, amplitudinea oscilațiilor este importantă. Pe măsură ce θ crește, maximele se deplasează către regiunea de câmp înalt și treptat se atenuează, păstrând totuși caracterul oscilatoriu. Oscilațiile observate la unghiuri mici pot fi atribuite benzii fundamentale, care are un pronunțat caracter bidimensional. Fondul oscilatoriu observat unghiuri mari este datorat primei benzi excitate în care caracterul bidimensional al stărilor este considerabil atenuat, ele "amintindu-și" tridimensionalitatea datorită suprapunerii pronunțate a funcțiilor de undă asociate.

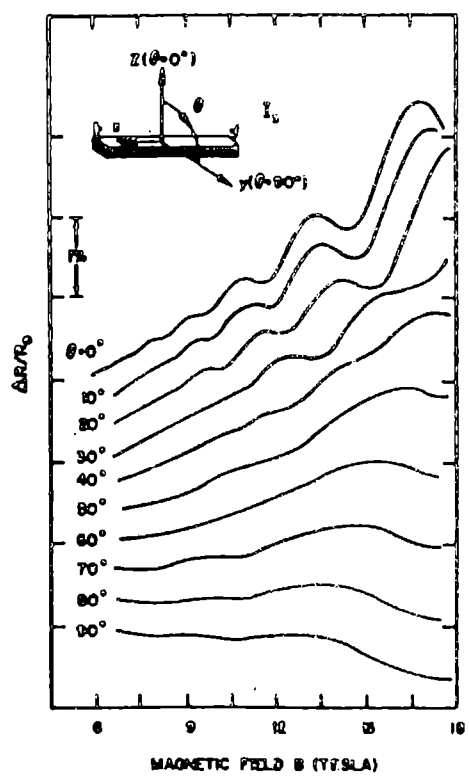


Fig. 1.9 Dependența efectului magneto-rezistiv de valoarea inducției B a câmpului magnetic exterior și de direcția ei {după [77CHA]}.

Prima observare experimentală a fenomenelor de rezonanță magneto-fononică MFR (*Magneto-Phonon Resonance*) în sisteme electronice bidimensionale a fost comunicată în 1980 de către Tsui și Englert [80TSU]. Ei au lucrat la temperaturi de 100 și 180 °K și au detectat rezonanțe în dependența de inducția magnetică a rezistenței heterostructurilor GaAs/AlGaAs. Aceste rezonanțe au fost atribuite împrăstierii inelastice a electronilor între nivelurile Landau, fenomen asistat de absorbția rezonantă în GaAs a fononilor optici longitudinali (modurile polare LO). S-a presupus

valabilitatea unei condiții simple de rezonanță $Nh\nu_c = h\nu_0$, unde $h\nu_c$ este distanța energetică între nivelurile Landau, ν_0 este frecvența fononilor LO iar N este un număr întreg. Concluzia importantă care poate fi extrasă din această lucrare este aceea că, pentru sistemele electronice bidimensionale de tipul amintit, interacția electron-fonon mediată de modurile polare din GaAs este dominantă și că intensitatea ei este consistentă cu cea prezisă de cuplajul sistemelor electronice bidimensionale cu modurile fononice LO de volum.

Utilizând temperaturi foarte mici (1.5 °K) și o super-rețea GaAs/AlGaAs, dopată modulat, în 1983 Störmer și col. evidențiază un alt fenomen foarte important,

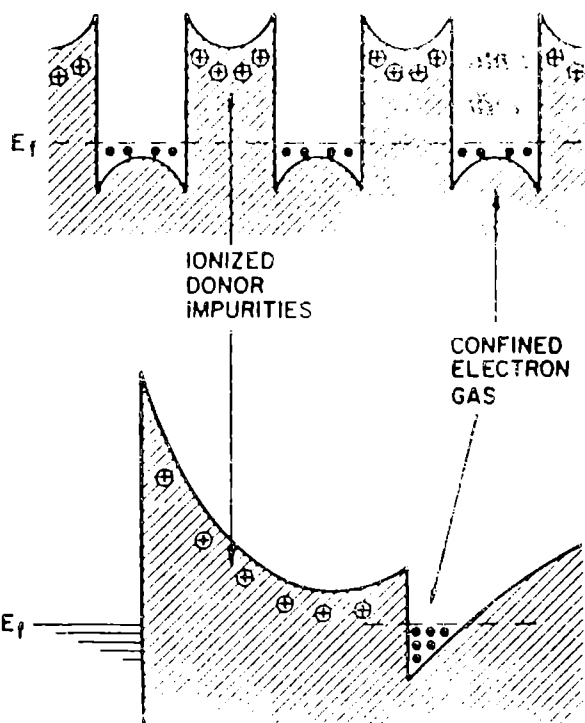
anume comportarea oscilatorie cu câmpul magnetic a momentului magnetic (efect de Haas-van Alphen) pentru sisteme electronice bidimensionale.

• Dopare modulată și dispozitive cu mobilitate înaltă

În lucrarea care a reprezentat o piatră de hotar pentru dezvoltarea electronicii nanometrice [69ESA], Esaki și Tsu au exprimat în termeni generali conceptul de dopare modulată "...the scattering time is an important factor in the described effect,..., if the superlattice structure is formed in such a manner that most scattering centers such as foreign atoms, imperfections, etc., are concentrated in the neighborhood of the potential hills, one can show that electrons would suffer less from such scattering center..."

Mobilități electronice înalte, care depășesc predicțiile Brooks-Herring, au fost obținute prin implementarea conceptului de dopare modulată în 1978 de către Dingle și col. [78DIN]. Doparea modulată a fost realizată utilizând o tehnică ingenioasă care sincroniza fluxurile de Si (dopant n) și Al în instalația MBE, astfel încât impuritățile donoare erau prezente în straturile de AlGaAs, în timp ce straturile de GaAs rămân intrinseci. Figura 1.10 prezintă în partea superioară diagrama schematică a benzilor energetice ale unei structuri dopate modulată.

Noua generație de tranzistori, controlați prin efect de câmp (FET), care lucrează în domeniul frecvențelor ultra-înalte și utilizează conceptul de dopare modulată (MOD), a apărut în 1980, odată cu producerea de către Delagebeaudeuf și col. [80DEL], Mimura și col. [80MIM], a primilor tranzistori HEMT (High Electron



Mobility Transistor), sau TEGFET (Two-Dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) sau MODFET (Modulation Field Effect Transistor). Parametrii de merit care caracterizează funcționarea la înaltă frecvență au fost pentru primele structuri de tip HEMT, operate la 77 °K, net superiori față de cei corespunzători celor mai performante performante structuri convenționale MESFET, pe bază de GaAs.

Fig. 1.10 Diagrama schematică a benzilor energetice pentru o super-rețea dopată modulată (sus) și diagrama schematică a benzilor energetice pentru o heterostructură cu

poartă Schottky (jos) ; după [82ESA];

• Efect Hall cuantic

Teoriile fundamentale ale fizicii moderne au făcut din constanta structurii fine α una din constantele "vedetă" ale naturii. Semnificația fizică a acestei constante a rămas, încă din perioada de început a teoriei cuantice, un mister netipărit până astăzi dezlegat. Există motive serioase să credem că, într-un anumit mod, semnificația acestei constante reprezintă cheia de boltă a înțelegerii electromagnetismului. Datorită faptului că în electrodinamica cuantică ea apare în dezvoltările de ordin superior ale diagramelor Feynman stabilirea acurateții predicțiilor teoretice, prin compararea lor cu valorile experimentale, reclamă o determinare cât mai precisă a valorii constantei structurii fine.

În 1980 Klitzing, Dorda și Pepper [80KLI] au arătat că fenomenul de cuantificare a rezistenței Hall pentru sisteme electronice bidimensionale, obținut prin confinarea electronilor în stratul de inversie al unei structuri de tip tranzistor Si-MOSFET, permite determinarea cu precizie a constantei de structură fină.

Un an mai târziu, în 1981, Tsui și Gossard utilizează heterojuncțiuni AlGaAs/GaAs, dopate modulat, obținând un efect net de cuantificare a rezistenței, ușor de observat și de reprodus datorită mobilității înalte pe care o ating electronii [81TSU]. Aceste circumstanțe au condus la determinarea inversului constantel de structură fină $\alpha^{-1} = 137.035965(12)$ cu o precizie de 0.089ppm [82TSU], neatinsă de nici o altă tehnică experimentală.

Observații

a) Efectul Hall cuantic se manifestă în sisteme electronice bidimensionale la temperaturi scăzute și valori ridicate ale inducției magnetice, restricții care asigură o suprapunere mică a densităților de stări în vecinătatea nivelurilor Landau. Când nivelul Fermi este situat între nivelurile Landau, componenta diagonală ρ_{xx} a tensorului ρ se anulează iar componenta Hall ρ_{xy} păstrează valori constante, determinând o serie de platouri, clar evidențiată în Fig. 1.11.

b) Această comportare surprinzătoare ar putea fi explicată prin argumentul (adus în discuție încă în 1974 de către Ando și Uemura) că stările localizate nu iau parte la fenomenele cuantice de transport [74AND].

c) În regiunea platourilor, rezistența Hall are expresia deosebit de simplă:

$$R_n = \frac{h}{ne^2} = \frac{\mu_0 c}{2n\alpha} \quad (1.11)$$

care conduce la valori numerice de aproximativ $25813 \Omega/n$, n fiind numărul de niveluri Landau ocupate.

În 1982 (rezultatele experimentale relevante au fost obținute la sfârșitul anului 1981), Tsui, Störmer și Gossard [82aTSU] comunică descoperirea așa numitului *efect Hall cuantic fracționar* FQHE (*Fractional Quantum Hall Effect*). Aceasta a fost o descoperire total neașteptată pentru că, la vremea respectivă, nu existau lucrări care să

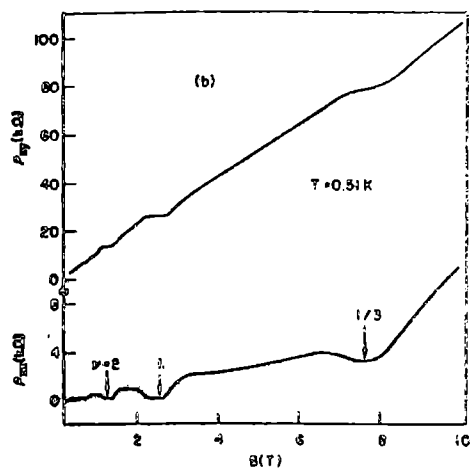


Fig.1.11 Dependenta magneto-rezistentei și a rezistenței Hall de inducția câmpului magnetic, la 0.51 °K, pentru o heterojuncțiune de tip GaAs/AlGaAs, dopată modulată, concentrația electronică superficială fiind $n_s=0.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ {după [82MEN] și [82TSU]}.

teoretice care să prezică existența unor noi structuri în coeficienții de transport corespunzători condițiilor limită cuantice. *Descoperirea făcuiă de Tsui și colaboratorii săi a complicat în mod considerabil tabloul metodeilor de abordare teoretică a efectului*

Hall cuantic. În cazul FQHE rezistența Hall este de asemenea cuantificată prin relația (1.11) însă n trebuie înlocuit cu o fracție rațională simplă {în lucrarea [82aTSU] primele valori descoperite au fost 1/3 și 2/3}.

Pasul decisiv spre înțelegerea FQHE a fost făcut în 1983 de către Laughlin [83LAU]. El a avut curajul să presupună că FQHE reprezintă o manifestare la scară macroscopică a fenomenului cuantic de condensare a gazului electronic bidimensional într-o nouă stare de existență a materiei, anume cea a unui fluid cuantic incompresibil. Laughlin a găsit pe cale variațională funcțiile de undă ale stării fundamentale (fluidul cuantic incompresibil) și ale primei stări excitate. *Excitațiile elementare ale fluidului cuantic poartă sarcini electrice fracționare (!) iar teoria prezice existența unei serii de stări fundamentale, caracterizate prin parametrul variațional m ($m=3, 5, \dots$), descrescătoare în densitate și care sfârșesc prin formarea unui cristal Wigner [88CHA]*

• Stări de impuritate și excitoni în gropi cuantice de potențial

Energia stării fundamentale a stărilor de impuritate de tip hidrogenoid și dependența energiei de legătură de lărgimea gropii de potențial și poziția impurității în groapă au fost calculate prin metode variaționale de către Bastard [82BAS], [82aBAS]. *Datorită conșinării electronului între barierele gropii de potențial, degenerarea stării fundamentale în raport cu poziția impurității față de barierele gropii de potențial este ridicată. Dependența energiei de legătură de poziția impurității conduce la formarea unei benzi de impuritate (efectul Bastard). Acest efect este, dintr-un anumit punct de vedere, analogul celui în care ruperea simetriei la translație, datorată unui potențial adițional, conduce la dependența energiei nivelurilor Landau de poziția centrului mișcării ciclotronice.*

Să subliniem de asemenea că metodele variaționale s-au dovedit eficiente și pentru calculul energiei de legătură a excitonilor formați în gropi de potențial [82bBAS], [83GRE], [83aGRE].

• Bistabilitate optică excitonică

Observarea bistabilității optice de tip excitonic într-o super-rețea etalon GaAs/AlGaAs a fost comunicată în 1982 de Gibbs și col. [82GIB]. Radiația laser cu frecvența mai mică, dar foarte apropiată de pragul absorbției excitonice, este slab absorbită producând purtători de sarcină care schimbă coeficientul de absorbție și polarizabilitatea asociate rezonanței excitonice. *Ca rezultat, indicele de refracție devine o funcție de intensitatea radiației.* Bi-dimensionalitatea electronilor confinați în gropile de potențial mărește energia de legătură a excitonilor liberi în straturile de GaAs și fac posibilă funcționarea în regim de bistabilitate, la temperatura camerei, a super-rețelelor etalon.

• Fotodiode cu avalanșă care utilizează heterofuncțiuni

Pentru a obține o valoare mare a raportului semnal/zgomot, raport care reprezintă unul dintre parametrii de merit ai unei fotodiode cu avalanșă, este necesar ca valorile ratelor de ionizare pentru electroni și goluri să fie foarte diferite. *Această condiție nu este îndeplinită pentru compuşii semiconductori de tipul III-V în care rata de ionizare pentru electroni este aproape egală cu rata de ionizare pentru goluri.* Pentru depășirea acestei dificultăți, Chin, Holonyak și Stillman [80CHI] au sugerat că raportul ratelor de ionizare pentru electroni și goluri ar putea fi crescut în mod artificial utilizând o super-rețea GaAs/AlGaAs de tipul celei prezentate în Fig. I.12.

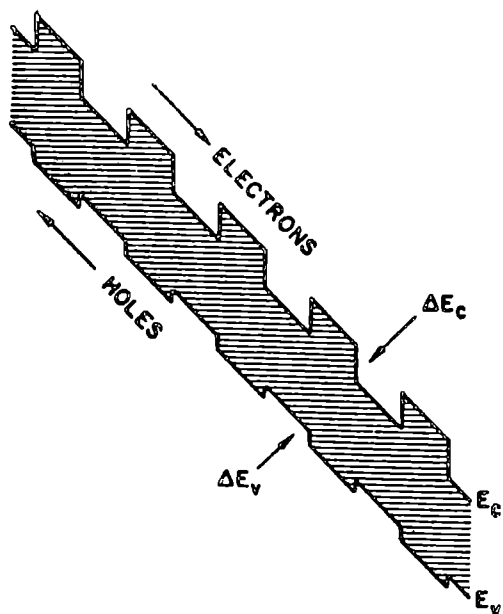


Fig. I.12 Diagrama benzilor de energie pentru fotodiode cu avalanșă care folosește o super-rețea semiconductoră. ΔE_C și ΔE_V sunt discontinuitățile benzii de conducție și benzii de valență. (după ideea prezentată în [80CHI]).

Într-o asemenea structură, la fiecare interfață, discontinuitatea benzilor de conducție este considerabil mai mare decât cea a benzilor de valență. *Rata de ionizare pentru electroni va crește, în timp ce rata de ionizare pentru goluri rămâne aproape constantă.*

Această idee a fost folosită de Capasso și col. [82CAP] care au obținut o amplificare cu un ordin de mărime a raportului ratelor de ionizare pentru electroni și goluri, utilizând o structură p-i-n sintetizată prin creșterea alternativă a 50 de straturi de GaAs(450Å) și Ga_{0.55}Al_{0.45}As(550Å). Capasso

[83CAP, 87CAP] a utilizat de asemenea tehnici ale ingineriei benzii interzise BGE (Band Gap Engineering)[88DRU] și a arătat că, prin utilizarea structurilor cu bandă interzisă cuasi-continuu variabilă în lungul direcției de creștere, este posibilă dezvoltarea unei noi clase de fotodiode și fotomultiplicatori.

• *Sisteme uni-dimensionale*

Reducerea dimensionalității purtătorilor de sarcină de la 3 la două dimensiuni este posibilă într-o super-rețea datorită potențialului periodic adițional, cu variație mică la scara constantei naturale de rețea, care modulează potențialul, de asemenea periodic, datorat rețelei cristaline naturale. În tranzistorii de tip Si-MOSFET, electronii de la suprafața stratului de inversie formează totdeauna un sistem bidimensional. Într-o super-rețea semiconductoare, electronii de la suprafața stratului de inversie (Fig. I.13) vor forma sisteme cu dimensionalitate între unu și doi, depinzând de profilul potențialului super-rețelei implicate. În cazul unei super-rețele de tip p, sau nedopate, electronii de la suprafață pot fi generați fie de câmpul electric extern, fie prin modularea dopajului în stratul de AlGaAs crescut pe suprafață. Dacă barierele de potențial (AlGaAs) ale super-rețelei au lărgimea suficient de mare, astfel încât funcțiile de undă ale gropilor de potențial să nu se suprapună apreciabil, electronii de la suprafață vor forma un gaz cuasi-unidimensional. Fig. I.14 prezintă un model simplu pentru înțelegerea acestei comportări. Să presupunem că singurele stări ocupate cu electroni sunt cele cu energie mai mică decât cea corespunzătoare nivelului Fermi. În aceste condiții, ne putem limita analiza la cea a comportării electronilor în interiorul sferei Fermi. Energia electronilor care aparțin primei sub-benzi energetice se poate scrie ca:

$$E = E_{v,z} + \frac{\hbar^2 k_{x,1}^2}{2m^*} \tag{I.12}$$

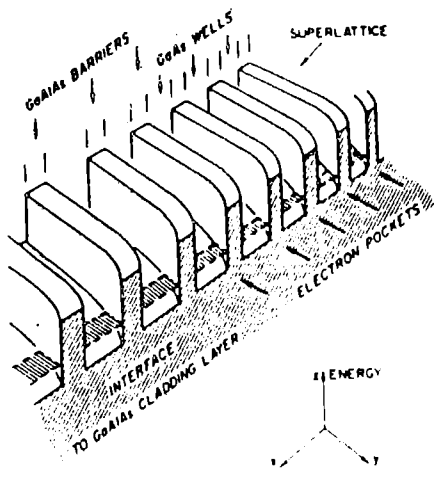


Fig. I.13 Sistemul electronic cuasi-unidimensional generat la suprafața stratului de inversie a unui cristal de tip super-rețea {după [82ESA]}

în care E_{y-z} este energia asociată mișcării în planul interfețelor iar $k_{x,1}$ este modulul vectorului de undă în lungul direcției perpendiculare pe interfețe. Vectorii de undă care satisfac ecuația I.12 au vârful în interiorul discului perpendicular pe axa x , care intersectează această axă în $k_{x,1}$. Să

observăm că valorile $k_{x,1}$ sunt toate distribuite într-un interval de ordinul $[k_{x,1min}, k_{x,1} + \delta k_{x,1}]$, unde valoarea lui $\delta k_{x,1} \ll k_{x,1}$ este stabilită de lărgimea energetică a primei sub-benzi energetice, iar $k_{x,1min}$ determină limita inferioară a primei sub-benzi energetice. Stările energetice care aparțin discului descriu sistemul electronic bidimensional. Raționând la fel în cazul direcției y (Fig. I.13), se obține un al doilea disc, perpendicular pe axa y . Intersecția celor două domenii este acum formată din stări care satisfac simultan condițiile de cuantificare și determină un sistem cuasi-unidimensional. Densitatea stărilor energetice pentru sistemele unidimensionale (definită ca $dN/dEdL$, cu dN numărul stărilor *principial* posibile, incluzând degenerarea datorată spinului) se poate calcula ușor și se obține (efecuați calculul !):

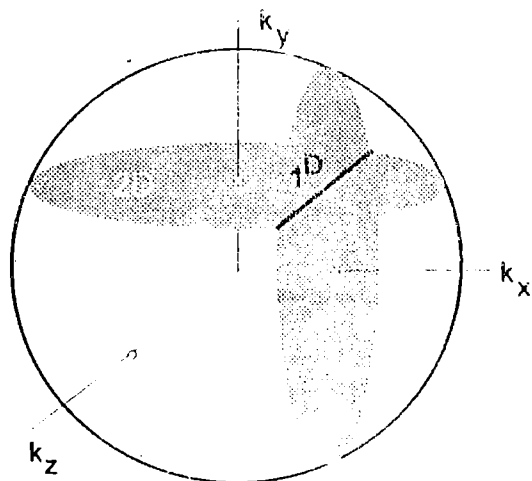


Fig. I.14 Obținerea sistemelor electronice unidimensionale prin intersectarea spațiilor K bidimensionale. O asemenea situație este întâlnită la suprafața stratului de inversie al unei super-rețele

$$D_{1D} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} (E - E_{x,y})^{-1/2} \quad (I.13)$$

Structuri de tip tranzistor cu profil de creștere în "V", care utilizează efectele descrise mai sus, au fost inițial propuse de Sakaki [80SAK] și mai recent de către Luryi și Capasso [85LUR].

• Sisteme zero-dimensionale

Sistemele electronice zero-dimensionale se obțin prin cuantificarea ulterioară a energiei de mișcare a sistemelor unidimensionale în lungul axei z (Fig. I.14). În ultimii ani procedeele tradiționale de obținere a nanostructurilor au început să fie înlocuite de procesele de sinteză care permit configurarea dispozitivului chiar în timpul creșterii epitaxiale. Una dintre tehnici, extrem de promițătoare, se bazează pe efectul de formare al insulelor coerente în timpul creșterii hetero-epitaxiale a sistemelor în care există tensiuni mecanice, induse de nepotrivrile de rețea cristalină {acesta este modul de creștere Stranski-Krastanow [39STR]}. Goldstein [85GOL] a dovedit că procesul poate fi controlat și utilizat cu succes pentru obținerea reproductibilă a sistemelor zero-dimensionale (**Quantum Dots, QD**). Procesul de apariție și de creștere al așa numitelor *insule coerente* este subiectul unor investigații intense care urmăresc stabilirea condițiilor experimentale de creștere astfel încât să se obțină la scară nanometrică controlul și reproductibilitatea formei, mărimii, densității și configurației structurilor.

1.3.3 Sisteme de tipul InAs / GaSb(/ AlSb)

Interesul pentru sistemele de acest tip este justificat de diagrama extrem de interesantă a benzilor de energie, prezentată în Fig. 1.7. Ea sugerează că, în comparație cu sistemul AlGaAs/GaAs analizat în secțiunea anterioară, introducerea potențialului adițional datorat super-rețelei va produce o modificare importantă a structurii electronice de benzi a materialului de bază.

Faptul că diagrama benzilor de energie ar putea avea aspectul din Fig. 1.7 a fost semnalat pentru prima dată de Gobeli și Allen [66GOB], care au emis această ipoteză bazându-se pe datele experimentale referitoare la afinitățile electronice ale celor două tipuri de materiale.

Zece ani mai târziu, Sakaki, Chang și col. [77SAK] aduc prima confirmare experimentală observând absența fenomenului de redresare în caracteristicile I-V ale joncțiunilor p-n sintetizate din n-InAs și p-GaSb. Această anomalie este o consecință directă a existenței unei regiuni de suprapunere a benzii de valență în GaSb cu cea a benzii de conducție în InAs.

Primul calcul unidimensional al structurii benzilor de energie pentru rețele de tipul al II-lea InAs/GaSb a fost comunicat în 1977 de Halasz, Chang și Esaki [77HAL].

Observație

Una dintre particularitățile remarcabile ale super-rețelelor generate de acest sistem este aceea că, deși gropile de potențial pentru electroni și goluri sunt localizate în semiconductori diferiți, energia nivelurilor cuantificate pentru electroni este foarte apropiată de energia nivelurilor corespunzând golurilor. În aceste împrejurări, electronii și golurile interacționează puternic și metodele teoretice uzuale, în care această interacție este considerată ca perturbație, pot conduce la rezultate eronate.

• *Tranziția semiconductor-semi-metal mediată de super-rețea*

Salasz, Esaki și Harrison au prezentat în 1978 [78SAL] rezultate obținute prin metoda combinației liniare a orbitalilor atomici (LCAO). Calculele lor neglijează redistribuția sarcinii la interfață. În Fig. 1.15 prezentăm rezultatele obținute de ei pentru profilul potențialului și pentru valorile energiilor sub-benzilor energetice, în cazul unei super-rețele InAs/GaSb cu perioada de 100 Å. S-a considerat că diferența $E_{v2}-E_{c1}$ are valoarea 0.15 eV. În această figură E_j desemnează energia electronilor iar LH_j , HH_j pe cea a golurilor ușoare, respectiv grele. În Fig. 1.16 sunt prezentate dependențele energiilor și lărgimilor energetice ale sub-benzilor pentru electroni, goluri ușoare și grele, de perioada super-rețelei. S-a considerat cazul unei super-rețele cu grosimi egale ale straturilor de InAs și GaSb. În stânga sunt prezentate lărgimile benzilor interzise

pentru GaSb și InAs, calculate ca E_1 - HH_1 . Această diferență descrește pe măsură ce perioada super-rețelei este mărită, devenind zero la 170 Å când apare tranziția semiconductor-semimetal.

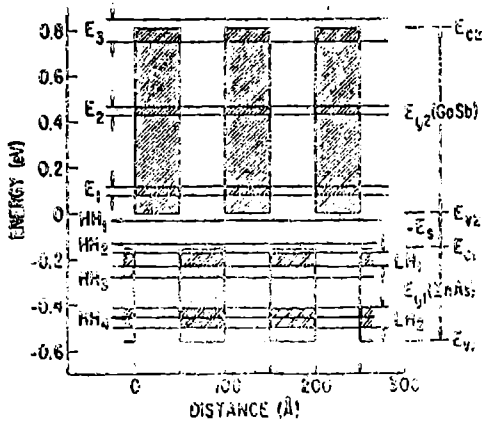


Fig. 1.15 Profilul energiei potențiale pentru o super-rețea InAs/GaSb (cu perioada de 100Å) având energiile sub-benzilor: E_i pentru electroni, LH_i și HH_i pentru goluri ușoare și respectiv grele (după [78SAL]).

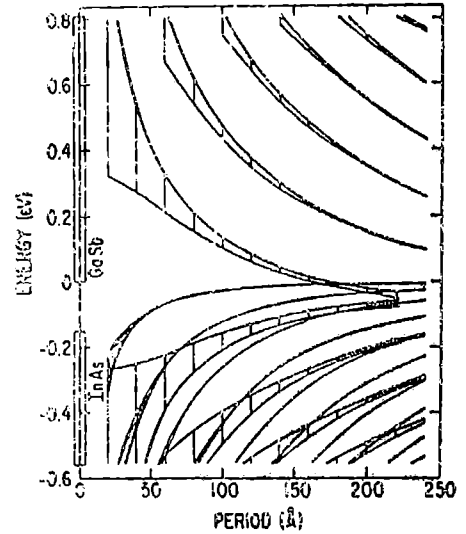


Fig. 1.16 Dependența energiilor și cea a lărgimilor sub-benzilor energetice pentru electroni, goluri ușoare și grele (calcul teoretic, metoda LCAO), de perioada super-rețelei (condițiile sunt aceleași ca în Fig. 1.15) (după [78SAL]).

Rezultatele calculelor teoretice prezentate în Fig. 1.15 și Fig. 1.16 au o mare importanță practică deoarece ele arată că, prin alegerea corespunzătoare a perioadei super-rețelei, se pot sintetiza atât structuri semiconductoare cu bandă interzisă îngustă (a cărei lărgime poate fi controlată) cât și compuși semi-metalici care au o structură a benzilor energetice sensibil diferită de cea a semiconductorilor inițiali. Odată ce structura capătă proprietățile unui semi-metal, redistribuția sarcinii la interfețe nu mai poate fi neglijată pentru că ea produce o curbură pronunțată a benzilor energetice în vecinătatea interfețelor.

Perioada care a urmat a fost dominată de studiile de absorbție optică și luminiscentă, care au evidențiat structura fină a spectrelor, datorată tranzițiilor între diferite sub-benzi energetice.

• Super-rețele cu trei compuși

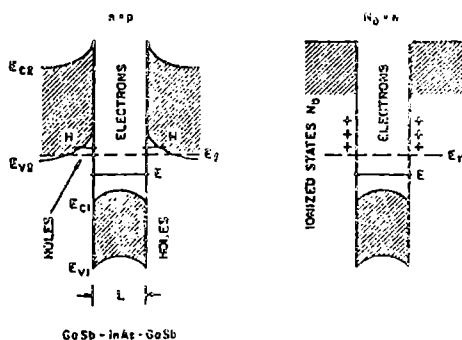
Faptul că valoarea constantei de rețea a compusului AlSb (6.136Å) este apropiată de cea a compușilor GaSb (6.095Å) și InAs (6.068Å) a sugerat posibilitatea sintetizării unor rețele tri-component (de tipul III) notate ABCABC..., ABAC..., ACBC..., etc., unde A=AlSb, B=GaSb iar C=InAs. Acești trei compuși semiconductori care, în ciuda configurațiilor diferite ale diagramelor de benzi energetice, au valori apropiate ale constantelor de rețea, reprezintă un exemplu unic între compușii III-V.

Takaoka și col. [83TAK] au reușit în 1983 să sintetizeze utilizând tehnica MBE o super-rețea tri-component, de tipul GaSb/AlSb/InAs pe care s-au efectuat studii ale fenomenelor de transport.

• *Gropi cuantice de potențial, formate în InAs*

Datorită aliniamentului benzilor energetice la interfață, heterostructurile GaSb/InAs/GaSb și AlSb/InAs/AlSb generează în stratul de InAs o groapă cuantică de potențial. (Fig. I.17).

Fig. I.17 Diagrama benzilor de energie în prezența gropilor cuantice de potențial formate în InAs. Diagrama din stânga este pentru heterojuncțiunea GaSb/InAs/GaSb. Cea din dreapta descrie sistemul AlSb/InAs/AlSb (după [82ESA]).



Sisteme de acest tip au fost investigate teoretic de Bastard și col. [82cBAS]. Rezultatele lor includ efectul câmpurilor magnetice deosebit de intense și prezic apariția tranziției semiconductor-semimetal,

atunci când grosimea stratului de InAs depășește o valoare critică. Fenomenul de tranziție semiconductor-semimetal este datorat transferului de electroni din GaSb, această situație fiind similară celei întâlnite super-rețeaua InAs/GaSb.

Existența acestui fenomen a fost verificată experimental în 1982 de către C. A. Chang, E. E. Mendez, L. L. Chang și L. Esaki.

Studiul efectului Hall cuantic IQHE pentru sistemele de purtători bidimensionali, generate în heterojuncțiuni GaSb/InAs/GaSb a fost realizat de către Mendez și col. Spre deosebire de situația existentă în structurile de tipul GaAs/GaAlAs, gazul electronic bidimensional, format în InAs, coexistă cu gazul bidimensional format din goluri în GaSb, gaz care are aceeași densitate superficială.

• *Câteva rezultate recente; QCL și laseri ZnMgSSe cu injecție*

Sintetizarea dispozitivelor QCL (Quantum Cascade Laser) a debutat în jurul anilor '90, ca urmare a introducerii și a dezvoltării unor noi concepte tehnologice (unul dintre cele mai importante fiind ingineria benzii interzise). Federico Capasso și colaboratorii săi au dezvoltat la AT&T Bell Laboratories o nouă generație de fotodetectori și laseri cu semiconductori, al căror domeniu de funcționare acoperă practic regiunea din infraroșul mediu și îndepărtat. Deși multe dintre ideile fundamentale implicate în aceste dezvoltări au fost aduse în discuție încă în perioada 1970 de către Rudi Kazarinov (acum la AT&T) și Robert Suris, aplicarea lor a fost

întârziată de posibilitățile experimentale ale timpului. O prezentare simplă a problemelor și a rezultatelor semnificative se găsește în lucrările [94FAI], [94EOI]. Structurile QCL sunt formate din trei straturi subțiri GaInAs (0.8nm, 3.5nm, 2.8nm) care reprezintă gropi cuantice de potențial situate între cele patru straturi din AlInAs (4.5nm, 3.5nm, 3.0nm, 3.0 nm). Datorită benzii interzise mari, ele acționează ca bariere de potențial. Funcționarea QCL este bazată pe două efecte cuantice esențiale: *confinarea purtătorilor și tunelarea lor prin barierele de potențial. O problemă esențială, încă nerezolvată, o reprezintă prezența interacției cu excitațiile rețelei care micșorează rata tranzițiilor radiative prin cunoscutul mecanism de tunelare asistată de fononi.*

Importanța deosebită a proceselor neradiative asupra eficienței laser, se reflectă în curenții de prag, deosebit de mari (15 kAcm^{-2}).

Realizarea laserilor cu injecție, bazați pe compusul ZnSe, a fost anunțată în 1991 de către un grup de cercetători de la Photonics Laboratory (aparținând companiei 3M) [91HAA]. Acest rezultat a fost posibil datorită obținerii straturilor din p-ZnSe, un deziderat care a pus, timp de mai multe zeci de ani, la grea încercare grupurile de experimenter din întreaga lume. Obținerea conductivității de tip "p" a fost posibilă prin introducerea centrilor acceptori datoraji atomilor de azot, provenind de la o sursă (plasmă) care genera radicali liberi în timpul procesului de creștere MBE.

Structura laser sintetizată de grupul de cercetare de la 3M conține o heterojoncțiune de confinare, crescută pe substrat din GaAs. Regiunea activă de generare a luminii este sintetizată din $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ ($x=0.2$) iar confinarea optică are loc în groapa de potențial "scufundată" în straturile ZnSe.

Lărgimile benzilor interzise a aliajelor digitale care formează structura nanometrică a laserului sunt 2.42, 2.72 și 2.84 eV pentru $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$, $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ și $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$, respectiv.

Laserii bazați pe $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$ pot funcționa în regim de undă continuă până la temperaturi de 80 °C și în impulsuri până la temperaturi de peste 120°C. În 1995, două grupuri de cercetători (SONY și 3M-Philips) au obținut timpi de funcționare în regim de undă continuă de peste o oră. Pentru a deplasa lungimea de undă a luminii emise înspre albastru (sub 480 nm), ionii de Cd trebuie scoși din compoziția gropii cuantice de potențial. De asemenea trebuie crescut un strat de p- $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{S}_y\text{Se}_{1-y}$, având o bandă interzisă mai mare de 3 eV. (x, y având valori apropiate de 0.2).

Spre deosebire de MBE, tehnica de producere a dispozitivelor opto-electronice nanometrice MOCVD nu a produs rezultate comparabile ca performanțe și reproductibilitate. Unul dintre dezavantajele intrinseci metodei este acela că atomii acceptori de azot sunt pasivați de către atomii de hidrogen, generați în timpul creșterii MOCVD.

II. STUDIUL SUPRAFETELOR LA NIVEL ATOMIC *TEHNICI EXPERIMENTALE*

II.1 Microscopia tunel (Scanning Tunneling Microscopy, STM)

II.1.1 Introducere

Citind capitolul anterior ați început probabil să vă gândiți la *importanța cunoașterii la nivel atomic a caracteristicilor structurale ale suprafețelor*. Fără apariția instrumentelor fine de analiză experimentală, această sarcină ar fi sortită eșecului. O teorie fizică realistă a funcționării componentelor electronice cu heterojuncțiuni semiconductoare nu poate fi elaborată fără informațiile esențiale obținute prin experiment. Există însă și un alt aspect, deloc neglijabil. El se referă la posibilitatea verificării experimentale, la nivel atomic, a valabilității unor teorii fundamentale în domeniul corpului solid, cum ar fi, de exemplu, cea a reconstrucției suprafețelor sau cea a modelării suprafeței Fermi în vecinătatea suprafeței solidului. Datele experimentale obținute astfel pot aduce dovezi suplimentare ale corectitudinii și puterii legilor mecanicii cuantice. În același timp, rezultatele obținute prin tehnici sofisticate de analiză a suprafețelor reprezintă informațiile necesare completării sau chiar revizuirii unor importante teorii actuale.

Microscopia tunel sau cea de detecție a forțelor inter-atomice nu reprezintă singurele metode de studiu la nivel atomic. Dată fiind importanța temei, asemenea tehnici au fost elaborate încă din anii '60 și ele se referă (în general) la microscopia electronică tradițională, de înaltă rezoluție (prin transmisie) sau scanning (inclusiv tehnicile derivate, una dintre cele mai importante fiind tehnica microsondei electronice). În acest capitol vă prezentăm însă cea mai nouă și mai fascinantă metodă de microscopie electronică: *microscopia tunel*.

II.1.2 Principiul

Descoperirea microscopului tunel în 1982, de către G. Binnig, H. Röhrer, Ch. Gerber, E. Weibel și colaboratorii lor de la I.B.M. Zürich Lab., a stârnit printre specialiști un entuziasm greu de descris în cuvinte, ținând cont că el se manifesta în rândurile unor oameni obișnuiți să fie foarte reținuți. *Pentru prima dată a devenit posibilă vizualizarea poziției atomilor superficiali ai suprafeței, atunci când aceasta nu este plasată în vid*. Microscopul electronic bazat pe efectul tunel permite obținerea unor imagini cu rezoluție atomică, chiar și atunci când suprafața este plasată în aer, uleiuri, acizi, etc.

Să presupunem că un ac extrem de acuit este adus în vecinătatea suprafeței de studiat, atât de aproape încât la tensiuni ușor de măsurat experimental (2mV-2V) să

obținem valori de asemenea măsurabile ale curentului de tunclare. Dacă acul baleiază suprafața, curentul de tunelare se va schimba, pentru că lărgimea efectivă a barierei de potențial variază. *Este însă posibil să introducem o buclă de feedback care să modifice distanța dintre ac și suprafață, astfel încât curentul tunel să rămână constant.* Într-o primă aproximație, bine verificată experimental, curentul tunel variază exponențial cu distanța efectivă dintre ac și suprafață. *Dacă menținem constant curentul tunel, lărgimea efectivă a barierei locale de potențial va fi de asemenea constantă.* Reprezentând grafic deplasarea acului perpendiculară pe suprafață (direcția z), în funcție de deplasările paralele x, y, obținem o "imagine" în modul de lucru *curent constant*. Procedura de interpretare a imaginilor va fi expusă în paragraful II.1.4. Dacă menținem distanța de la ac la suprafață și tensiunea constante, reprezentând în același timp variația curentului tunel în funcție de (x,y), obținem o imagine în modul de lucru *înălțime (sau distanță) constantă*. Din punct de vedere istoric, *primul mod de lucru a fost cel în curent constant*; acest mod de lucru este indicat ori de câte ori dorim să studiem suprafețe care nu sunt atomic plane. Putem înțelege acest fapt în felul următor: dacă suprafața este atomic plană și constanta rețelei cristaline pe direcția x, de exemplu, are valoarea a, acul are nevoie de un timp t pentru a baleia distanța dintre centrele distribuțiilor de sarcină; această distanță este, în general, de același ordin de mărime cu a, deci brațul piezoelectric care controlează poziția acului trebuie să reacționeze extrem de rapid. Experimental, această condiție este greu de îndeplinit. Modul de lucru indicat în studiul suprafețelor atomic plane este cel în *distanță constantă*, pentru că, în acest mod de lucru, construcția imaginii implică numai viteza de prelucrare a informației de către electronica montajului, nu și inerția

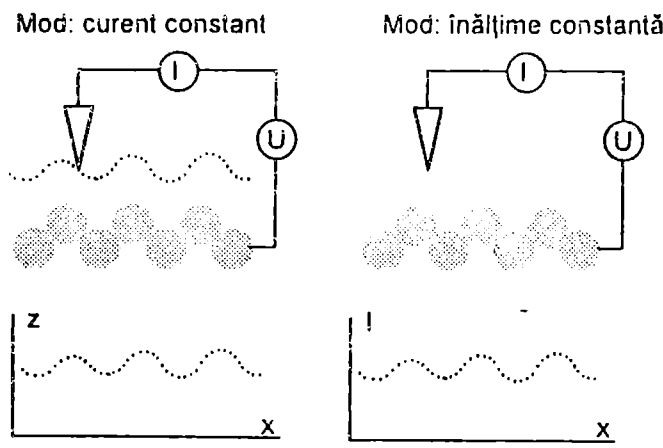


Fig. II.1 Reprezentare simplificată a principalelor moduri de lucru în microscopia STM.

brațului din piezoelectric care controlează distanța dintre ac și suprafață. Prin urmare, pot fi sesizate variațiile curentului de tunelare asociate cu trecerea prin dreptul vârfului acului a atomilor suprafeței investigate. În modul curent constant, cea mai mare frecvență de scanare a suprafeței se situează în jurul a 10 Hz, iar în modul înălțime constantă, în jur de 1KHz În fig. II.1 sunt reprezentate schematic configurațiile celor două moduri de operare, iar în fig. II.2 vă este prezentată o schemă simplificată a

microscopului tunel, configurația fiind cea utilizată de Binnig și Röhner [84BIN], în perioada inițială a demarării studiului suprafețelor prin tehnica STM. Astăzi lucrurile au evoluat mult și configurațiile sunt mult mai complicate.

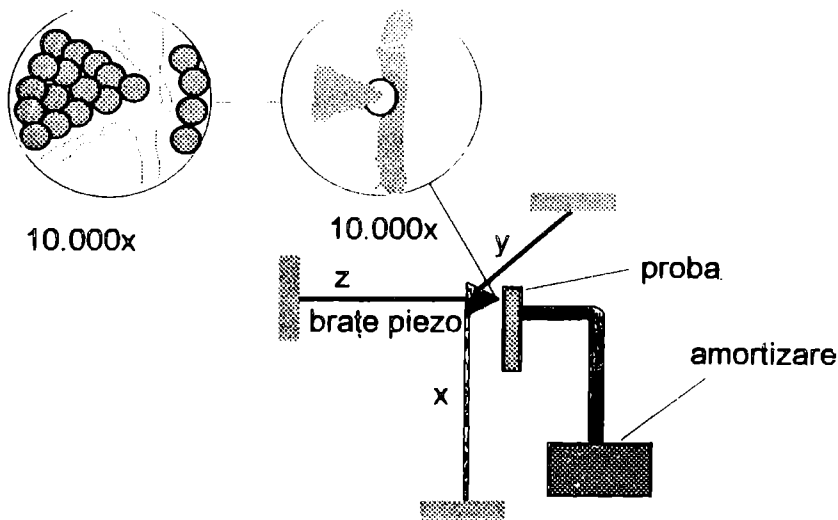


Fig. II.2 Schema simplificată a primului microscop tunel. Acest desen se bazează pe schița originală, prezentată de Binnig și Röhner [84BIN].

II.1.3 Principii teoretice

Cea mai simplă interpretare a imaginilor obținute este cea în care se presupune că ele reprezintă topografiile ale suprafețelor investigate. Deși adecvată uneori, ea este totuși simplistă. Pe măsură ce s-au acumulat multe date experimentale, a devenit tot mai evident că este necesar un efort considerabil, pentru a înțelege ce se întâmplă cu adevărat atunci când acul baleiază suprafața. Primele încercări teoretice au avut la bază analogia cu efectul tunel în sistemele unidimensionale. Multe date experimentale au condus la concluzia că, pentru tensiuni mici și temperaturi scăzute, curentul de tunelare variază cu distanța d între electrozi, după legea:

$$I \approx \exp(-2kd) \quad (\text{II.1})$$

k fiind constanta de atenuare a funcțiilor de undă în barieră. Dacă tunelarea are loc în vid, expresia constantei de tunelare este cunoscută:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m\Phi} \quad (\text{II.2})$$

m fiind masa electronului măsurată în eVs^2m^{-2} , iar Φ lucrul de extracție local, măsurat în eV. Pentru a obține o imagine asupra ordinului de mărime a variației distanței d , precizăm că pentru un lucru de extracție de 4 eV, constanta de atenuare are valoarea aproximativă $k \approx 1 \text{ \AA}^{-1}$ și curentul de tunelare descrește cu un ordin de mărime dacă d crește cu numai 1 Å (!). O precizie de numai 2% a constantei curentului tunel asigură o constanță de 0.01 Å a lărgimii efective a barierei energetice, un fapt cu adevărat remarcabil. Din nefericire, dacă acul baleiază o suprafață atomic perfectă, nu putem preciza care distanță joacă, în relația (II.1), rolul mărimii d . Pe de altă parte, stările energetice care participă la generarea curentului tunel au energii apropiate de energia nivelului Fermi, iar forma geometrică a acestor suprafețe izoenergetice este, mai întotdeauna, complicată. Ne putem deci aștepta ca spectrul energetic al suprafeței

investigate și cel al regiunii din imediata vecinătate a vârfului acului să influențeze într-un mod complicat curentul tunel măsurat. În general, distanțele între ac și suprafață sunt de ordinul 4Å , sau mai mari. Prin urmare, este rezonabil să presupunem că acul interacționează cu suprafața foarte slab. O asemenea aproximație permite calculul curentului tunel, folosind teoria perturbațiilor în ordinul cel mai scăzut. La temperaturi suficient de mici, putem scrie curentul de tunelare astfel:

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{m,n} f(E_m) [1 - f(E_n + e\varphi)] |M_{mn}|^2 \delta(E_m - E_n) \quad (II.3)$$

unde M_{mn} este elementul de matrice al hamiltonianului de tunelare, $f(E)$ este funcția de distribuție Fermi-Dirac, φ este diferența de potențial între ac și suprafață, E_m este energia stării staționare m , iar m și n iau valori peste toate stările acului, respectiv cele ale suprafeței. Semnificația fizică a relației (II.3) este simplă: *curentul tunel datorat unei perechi de stări energetice (E_m, E_n) este proporțional cu pătratul modulului elementului de matrice* (regula de aur a mecanicii cuantice) *înmulțit cu probabilitatea ca starea de plecare să fie ocupată, iar cea de sosire liberă.* Într-o lucrare de referință [61BAR], Bardeen a arătat că elementul de matrice pentru tunelare poate fi scris astfel încât să cuprindă doar funcțiile de undă ale electrozilor separați:

$$M_{mn} = \frac{\hbar^2}{2m} \int (\psi_m^* \nabla \psi_n - \psi_n \nabla \psi_m^*) dS \quad (II.4)$$

În relația (II.4) integrala este efectuată într-un plan arbitrar aflat în interiorul barierei (rezultatul final fiind independent de alegerea acestui plan). Principial, relațiile (II.3) și (II.4) reprezintă rezolvarea problemei propuse. Calculele sunt însă extrem de complicate, iar rezultatul final este destul de greu de exploatat într-un mod direct accesibil experimentatorului. *Importanța practică a unor asemenea calcule complicate este de fapt următoarea: ele ne permit să stabilim în ce măsură aproximații cu mult mai simple descriu realist rezultatele obținute de experimențatori.*

II.1.4 Interpretarea imaginilor STM

O primă observație importantă este aceea că, din punct de vedere cuantic, fenomenul tunel nu face distincții între ac și suprafață. *Din punct de vedere experimental, este esențial să corelăm imaginea STM cu o proprietate intrinsecă suprafeței.* Relațiile (II.3) și (II.4) arată însă în mod clar că orice calcul teoretic al curentului va reprezenta o convoluție extrem de complicată între stările energetice ale suprafeței și cele superficiale ale acului.

Un pas important înainte a fost făcut în 1985, atunci când Tersoff și Hamann [85TER] au arătat că *prin alegerea unui model particular de ac, influența proprietăților sale asupra imaginilor poate fi practic eliminată.* Observația lor pornește de la faptul că, pentru a obține o rezoluție cât mai bună, trebuie detectată o

mărime care să fie specifică nu sistemului ac - suprafață, ci suprafeței neperturbate. Dacă, urmându-i pe Tersoff și Hamann, presupunem că acul este astfel încât potențialul său și funcțiile de undă ale stărilor sale superficiale pot fi localizate relativ bine în raport cu suprafața, în limita tensiunilor mici conductanța tunel poate fi scrisă simplu, astfel:

$$\sigma \approx \rho(\mathbf{r}_a, E_F) \quad (11.5)$$

în care \mathbf{r}_a este vectorul de poziție al acului, E_F este poziția energetică a nivelului Fermi, iar:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \sum_n |\psi_n|^2 \delta(E_n - E) \quad (11.6)$$

este densitatea locală de stări a suprafeței investigate, în punctul de vector de poziție \mathbf{r} și energie E . *Conductanța tunel reprezintă un parametru extrem de interesant, pentru că în domeniul tensiunilor mici ea devine independentă de tensiune.* Astfel, relația (11.5) afirmă că, *pentru tensiuni mici, conductanța tunel este proporțională cu densitatea locală de stări în vecinătatea nivelului Fermi al suprafeței.* În cadrul conceptual al teoriei prezentate, interpretarea imaginilor STM este aceasta: *acul descrie o curbă de nivel Fermi constant al stărilor energetice ale suprafeței libere.*

Observatii

a) Importanța rezultatului obținut de Tersoff și Hamann constă în aceea că el este adevărat și pentru un ac de dimensiune arbitrară, atât timp cât funcția de undă, asociată stărilor electronice superficiale cu energia E_F ale acului, poate fi aproximată realist cu o undă de tip s iar \mathbf{r}_a este centroidul pachetului de unde asociat acestei stări.

b) Justețea ipotezei (11.5), pentru un ac cu o rază de curbura a vârfului de dimensiuni atomice, a fost confirmată prin calcule exacte efectuate de Lang [66] AN].

11.1.5 Rezoluția microscopului tunel

Atunci când analizăm rezoluția unui instrument, trebuie să avem în vedere un anumit fel de imagine, pe care o considerăm *ideală*. Urmare a investigării sistemului, instrumentul formează o imagine diferită de cea considerată ideală, datorită intervenției unor proprietăți caracteristice instrumentului. El deformează, într-un mod specific, informațiile provenite de la obiectul investigat. În cazul unor sisteme macroscopice, interacția fizică dintre aparat și sistemul investigat produce "imagini" practic fără a perturba sistemul. Faptul că întrebarea "*ce observăm de fapt ?*" are o importanță capitală atunci când sunt implicate sisteme atomice, a fost dovedit prin analiza cuantică a fenomenelor. La această întrebare, teoria cuantică a dat răspunsuri care, în mod paradoxal, au născut întrebări încă mai dificile. În cazul microscopiei STM, imaginile sunt produse de sisteme atomice aflate în interacțiune. Prin urmare, trebuie să fim extrem de precauți atunci când atribuim o anumită semnificație rezultatelor experimentale. *Microscopul tunel este un instrument.* Eficacitatea lui depinde esențial

de posibilitatea interpretării corecte a imaginilor, tot așa cum, la începuturile mecanicii cuantice, descoperită fiind ecuația lui Schrödinger, aplicațiile importante au apărut după ce Max Born a propus pentru modulul pătrat al funcției de undă semnificația de densitate de probabilitate de localizare.

Alterarea informației provenită de la sistemul investigat este caracterizată prin introducerea așa numitei *funcții de aparat*. Imaginea formată de instrument va fi deci o convoluție de forma

$$I(x) = \int F(y)I_0(x - y)dy \quad (II.7)$$

unde $F(y)$ este funcția de aparat, iar I_0 *imaginea ideală* pe care ar trebui să o obținem. Când $F(y)$ este cunoscută, putem folosi (II.7) doar dacă precizăm ce înțelegem prin I_0 . Dacă, de exemplu, prin I_0 înțelegem suprafețele pe care $\rho(r, E_F)$ păstrează valori constante, atât timp cât aproximația (II.5) este valabilă, microscopul va forma practic o imagine aproape ideală. *Imaginile obținute experimental demonstrează că, pe măsură ce distanța dintre ac și suprafață crește, se pierde informațiile de detaliu.* Așadar, ar fi de dorit să definim I_0 pornind de la o proprietate a planului suprafeței.

În continuare vă vom prezenta, folosind ideile inițiale ale lui Tersoff și Hamann, un model de calcul satisfăcător al rezoluției microscopului tunel. Puteți utiliza acest model ori de câte ori sunteți nevoiți să apreciați rapid performanțele STM.

Să presupunem că suntem interesați să detectăm denivelările suprafeței la nivel atomic. Mai presupunem (în acord cu observațiile experimentale) că putem detecta semnalul util dacă raportul semnal zgomot este cel puțin 1/1. Fie a constanta rețelei cristaline și n_G amplitudinea semnalului de zgomot, corespunzător componentei Fourier $G=2\pi/a$. Atunci, amplitudinea deplasărilor acului, care descrie suprafața pe care $\rho(r, E_F)$ păstrează valori constante, trebuie să aibă cel puțin aceeași valoare. Tersoff și Hamann au arătat că, departe de suprafață și în limita deplasărilor mici ale acului, deplasările Δ ale acestuia sunt descrise de relația:

$$\Delta = \frac{2}{k} \exp(-zG^2 / 4k) \quad (II.8)$$

Criteriul de rezoluție enunțat $\Delta \geq .n_G$ poate fi, în aceste condiții, rescris în forma următoare:

$$a \geq \left[\frac{2\pi^2}{\ln(2 / kn_G)} \right]^{1/2} \left(\frac{z}{2k} \right)^{1/2} \approx 4 \ln(2A / n_G)^{-1/2} \left(\frac{z}{2k} \right)^{1/2} \quad (II.9)$$

unde z reprezintă suma dintre raza acului și distanța ac-suprafață. În cazul în care zgomotul are amplitudinea $0.1A$, relația (II.9) arată că pot fi detectați numai atomii separați prin cel puțin $4A$, rezultat care este într-o concordanță satisfăcătoare cu cele mai bune rezoluții obținute pentru suprafețe metalice. *În concluzie, trebuie să remarcăm că, fără amortizarea eficientă a vibrațiilor, este dificil, dacă nu imposibil, să obținem imagini cu rezoluție atomică.* Amortizarea vibrațiilor reprezintă o problemă serioasă de mecanica sistemelor, mai ales datorită faptului că sistemele

complicate nu se comportă întotdeauna liniar. În asemenea condiții, răspunsul lor conține frecvențe de sinteză, care pot conduce la apariția unor fenomene de rezonanță. O creștere nesemnificativă a amplitudinii de vibrație poate diminua drastic rezoluția STM

II.1.6 Metode experimentale de realizare a microscopului tunel .

a) *Translatorii x,y,z*

În majoritatea studiilor experimentale, pentru realizarea translației pe direcțiile x,y,z sunt utilizate bare piezoelectrice, într-un montaj mecanic cât mai rigid cu putință. *Rigiditatea mecanică este caracterizată, de obicei, indicând frecvența de rezonanță pe cele trei direcții.* Aceste frecvențe trebuie să se situeze peste 1 KHz. Experimental au fost deja atinse frecvențe de 30 KHz și sunt realizabile frecvențe de rezonanță peste 100 KHz. Aceste frecvențe limitează nu numai viteza cu care acul baleiază suprafața ci și capacitatea de protecție împotriva frecvențelor parazite.

b) *Influența vibrațiilor parazite*

În primul microscop tunel, eliminarea drastică a vibrațiilor parazite a fost realizată utilizând levitația supraconductoare. În microscopul construit ulterior s-au folosit metode mai puțin costisitoare (mese cu pernă de aer, decuploare vibraționale, etc.). *Vibrațiile parazite reprezintă cauza majoră a micșorării rezoluției și a diminuării timpului de stabilitate a imaginilor STM.* Acesta este motivul pentru care au fost depuse eforturi teoretice și tehnologice substanțiale în toate colectivele marilor laboratoare de cercetare (IBM, Bell Lab, etc.). Vibrațiile parazite conduc la mărirea amplitudinii n_G (relația II.9) și deci la mărirea distanței minime dintre două distribuții de sarcină ce mai pot fi separate.

c) *Poziționarea acului în raport cu suprafața*

Demuth a pus la punct un sistem mecanic elegant, care permite atât poziționarea extrem de precisă a acului când acesta este aproape de suprafață, cât și deplasarea lui pe distanțe mari (de ordinul centimetrelor), dacă acesta este departe de suprafață. *Una dintre metodele cele mai elegante folosește un sistem diferențial de resorturi cu constante elastice foarte diferite.* Astfel, să presupunem că un mecanism de precizie micrometrică deformează un resort slab, de constantă elastică k_1 . Acest resort este conectat cu suportul pe care este fixată proba, printr-un resort cu o constantă elastică mult mai mare k_2 . Dacă raportul $k_2/k_1 \sim 1000$, putem obține pe o cale comodă deplasări de ordinul 25 μm cu o precizie de 250Å.

d) *Obținerea acului*

Procedeele de obținere și materialele folosite pentru acele utilizate în microscopia tunel au fost obiectul unor controverse între specialiști. *În majoritatea experimentelor au fost folosite ace de tungsten*, ascuțite astfel încât raza de curbură a vârfului să fie în intervalul 0.1-10 μm . În cele ce urmează, vă prezentăm o metodă [87HAN], pentru obținerea acelor care permit trasarea unor imagini cu rezoluție aproape atomică. Acest procedeu și un număr mare de imagini spectaculoase puteți găsi în lucrarea lui Hansma și Tersoff [87HAN].

1) Acul este poziționat la o distanță mai mare de 1000Å de suprafața probei. Se aplică între ac și probă o tensiune relativ înaltă (câteva sute de volți; probă și acul sunt plasate într-o incintă vidată) și se detectează curentul de emisie prin efect de câmp (de ordinul câtorva microamperi). În momentul în care apare o modificare bruscă a curentului se decuplează sursa de înaltă tensiune.

2) Se aplică o tensiune alternativă cu frecvența de ~1 KHz pe translatorul z, suprapusă peste tensiunea buclei de feedback și se mărește amplitudinea tensiunii aplicate până când tensiunea buclei de feedback se modifică brusc.

3) Se aduce acul în poziție de lucru și se menține acest regim între 10 minute și o oră. După ce acul a fost format prin procedeul expus la punctele 1 și 2, se recomandă ca el să fie deplasat într-o nouă regiune, pentru că este posibil ca suprafața de sub ac să fi fost afectată.

Experimentatorii din domeniul STM sunt de acord că un ac care sub un microscop optic, la o mărire de 200x sau peste, apare ascuțit (raza de curbură nu poate fi măsurată) va conduce la rezoluție atomică ori de câte ori este folosit procedeul indicat (dacă în timpul operațiunilor nu este atins de suprafață, lucru deloc simplu!).

Pentru atingerea rezoluției atomice este recomandabil ca raza de curbură a acului să fie sub 2000Å.

II.1.7 Viitorul microscopiei tunel. Alte aplicații

Una dintre cele mai uluitoare aplicații întrevăzute în viitorul apropiat, se bazează pe observația că *acul poate manipula atomii sau moleculele suprafeței*. Cu alte cuvinte, acul are posibilitatea de a scrie mesaje pe suprafața investigată. Acest procedeu deschide calea *litografiei cuantice*, care poate deveni una dintre tehnicile ce vor revoluționa microelectronica viitorului apropiat.

Dând dovadă de un remarcabil spirit de previziune, Richard Feynman, unul dintre cei mai mari fizicieni ai secolului nostru, spunea, acum aproape treizeci de ani, că *suntem încă foarte departe de orice limite impuse de natură miniaturizării în diferite domenii, cum ar fi cel al calculatoarelor sau roboților*. El mai adăuga: "...dacă vom putea aranja atomii și moleculele așa cum vrem, vom obține materiale cu

proprietăți neașteptate și o mulțime de aplicații ale acestor proprietăți." Ideile lui Feynman au devenit astăzi realitatea microelectronicii de vârf.

II.2 Microscopul scanning de detecție a forțelor inter-atomice (Atomic Force Microscope - AFM)

II.2.1 Principii generale

Microscopia tunel este limitată sever de cerința ca materialele studiate să fie conductori suficient de buni pentru a permite o detecție comodă a curentului tunel. Această limitare nu permite studiul unor materiale izolatoare, deosebit de interesante din punct de vedere al aplicațiilor: oxizi, ceramici, materiale biologice, polimeri, etc. Din acest motiv, Binnig, Quate și Gerber [86BIN] au propus și realizat experimental un microscop care permite detecția forțelor locale de interacție inter-atomică între ac și suprafață.

Principiul este asemănător celui folosit la construcția microscopului tunel, numai că de această dată nu este detectat curentul de tunelare, ci forța de interacție inter-atomică dintre ac și suprafață. Când acul se apropie de suprafață, el va fi supus mai întâi unei forțe de atracție. Dacă distanța scade sub o anumită valoare critică, forța de interacție devine repulsivă și practic acul atinge suprafața. Ideal este nu ca acul să atingă suprafața "brutal" (aici termenul *brutal* semnifică interacții care ar provoca defecte locale ale suprafeței și ar distruge acul). El trebuie menținut la distanța care permite "mângâierea" suprafeței studiate. Referitor la principiul de funcționare al microscopului tunel și al microscopiei de forță inter-atomică, un specialist al domeniului a făcut o afirmație din care putem înțelege cel mai bine în ce fel progresele tehnologiei au schimbat radical modul de gândire al teoreticienilor: "*...dacă acum douăzeci de ani un fizician serios mi-ar fi spus că are de gând să construiască un microscop bazat pe aceste principii, aș fi gândit că are probleme cu sănătatea!*"

II.2.2 Detecția forței inter-atomice

Forța de interacție dintre ac și suprafață exercită o presiune extrem de mică asupra cristalului piezoelectric pe care este fixat acul, provocând o deplasare detectabilă a frecvenței de rezonanță a brațului. Deplasarea brațului este proporțională cu amplitudinea și sensul forței. Deplasarea frecvenței de rezonanță este proporțională cu gradientul forței pe direcția z. Când proba este deplasată în lungul acului, distanța dintre probă și ac poate fi controlată printr-o buclă de feedback care menține fie deflexia brațului, fie frecvența de rezonanță constantă. Deflexia brațului sau deplasarea frecvenței de rezonanță pot fi măsurate cu un al doilea ac montat pe același braț; cel de-al doilea ac dă pentru curentul de tunelare o dependență

exponențială cu deflexia brațului. Metodele utilizate astăzi utilizează o tehnică mult mai comodă și mai precisă, bazată pe interferometrie laser. Aceasta permite măsurarea unor deplasări ale brațului de 0.01 nm [87MAR]

II.3 Concluzii

Dacă acest capitol vi s-a părut lung sau plictisitor, rețineți măcar următoarele fapte importante

a) Principiul de funcționare al microscopului tunel este bazat pe efectul tunel

b) Există două moduri fundamentale de operare: *în curent constant* (indicat pentru studiul suprafețelor care nu sunt atomic plane) și *în distanță constantă* (indicat în studiul suprafețelor atomic plane).

c) Acul microscopului tunel descrie o suprafață pe care nivelul Fermi al stărilor energetice ale suprafeței libere rămâne constant.

d) *Rezoluțiile laterale* ale microscopelor tunel actuale permit cu ușurință rezolvarea atomilor situați la distanțe medii sub 3Å.

e) *Rezoluțiile verticale* sunt suficiente pentru a detecta efecte datorate reconstrucției suprafețelor. Ele ating în mod curent 0.02Å.

f) *Vibrațiile parazite* afectează rezoluția microscopului

g) Microscopul tunel poate studia suprafețele unor *conductori*. Dacă probele studiate sunt izolatori, curentul tunel are valori foarte mici care sunt greu de controlat.

h) Probele care sunt izolatori pot fi studiate cu ajutorul microscopului de detecție al forței inter-atomice (AFM).

i) A fost deschisă calea către *litografia cuantică*; acul microscopului tunel poate manipula atomi sau grupări de atomi. Datorită posibilității de funcționare în diferite medii, inclusiv apă, microscopul tunel oferă o șansă unică pentru studiul replicării DNA.

III. STRUCTURA DE BENZI A SUPER-REȚELELOR APROXIMAȚIA FUNCȚIEI ANVELOPĂ

III.1 Introducere

Motivul esențial pentru care vă descriem *metoda funcției anvelopă* (Envelope-Function Approximation, EFA) este acela că, *în ciuda simplității, ea reproduce cu acuratețe observațiile experimentale*. În plus, această metodă este suficient de versatilă pentru a include efectele câmpurilor exterioare și pentru a permite descrierea self-consistentă a fenomenelor de redistribuție a sarcinilor în vecinătatea interfețelor.

Observație

În modelarea dispozitivelor nanometrice, suntem conduși, în mod natural, către studiul mișcării purtătorilor de sarcină prin *super-rețelele*. Pe tot parcursul acestui capitol vom înțelege prin *super-rețea* o structură cristalină care prezintă o periodicitate spațială aproape macroscopică, suprapusă periodicității naturale a așezării atomilor în cristalul de bază. În cele mai multe cazuri, periodicitatea naturală a rețelei este modificată de-a lungul unei singure direcții (numită și *direcție de creștere a super-rețelei*, Fig.III.1) prin creșterea periodică a unor straturi semiconductoare monocristaline, aproape izomorfe structural, având compoziția chimică sau gradul de dopaj diferite (vezi cap. I, paragraful I.2).

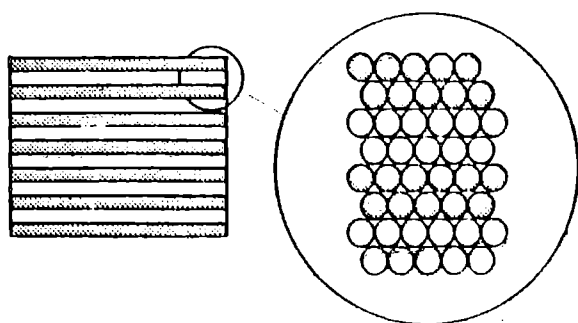


Fig III.1 Reprezentare schematică a unei structuri cristaline semiconductoare, crescute strat atomic cu strat atomic.

Deși, în general, în acest capitol vom analiza structuri de tip *super-rețea*, putem de asemenea extinde rezultatele asupra *gropilor de potențial izolate* (Isolated Quantum Wells, IQW) și asupra

heterojuncțiunilor izolate, observând că aceste sisteme reprezintă *cazuri limită* ale unei *super-rețele*:

a) *gropile de potențial izolate* se obțin atunci când materialul cu bandă interzisă largă (regiunile hașurate în Fig.III.1, de exemplu) are grosimi foarte mari în comparație cu distanța pe care funcțiile de undă în regiunea clasic interzisă se atenuează practic complet;

b) *heterojuncțiunile izolate* sunt generate crescând foarte mult grosimea materialului cu bandă interzisă îngustă (regiunile nehașurate în Fig.III.1, de exemplu).

Astfel, se constată că teoria generală include și alte cazuri de interes

experimental. Cu toate acestea, este recomandabil ca aspectele particulare ale unor asemenea configurații să fie analizate separat, folosind metode mai bine adaptate (sau chiar mai simple).

Idea de bază a metodei EFA a apărut în urma studiului impurităților puțin adânci [57KOH] și este următoarea: *efectul rețelei cristaline periodice asupra mișcării purtătorilor de sarcină este înglobat într-o mărime numită masă efectivă*. Acest punct de vedere simplifică în mod considerabil interpretarea fizică a rezultatelor și conduce la o viziune unitară asupra fenomenelor cuantice asociate mișcării într-un potențial periodic.

Să presupunem că suprapunem peste energia potențială periodică $V_{per}(\mathbf{r})$, a purtătorului de sarcină în rețeaua cristalină, o energie potențială adițională, $U(\mathbf{r})$. Ecuația lui Schrödinger are forma:

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_{per}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (III.1)$$

unde m_0 este masa electronului în spațiul liber. Vom presupune că energia potențială adițională este lent variabilă la scara constantei de rețea cristalină și că este suficient de mică pentru a putea fi considerată drept perturbație.

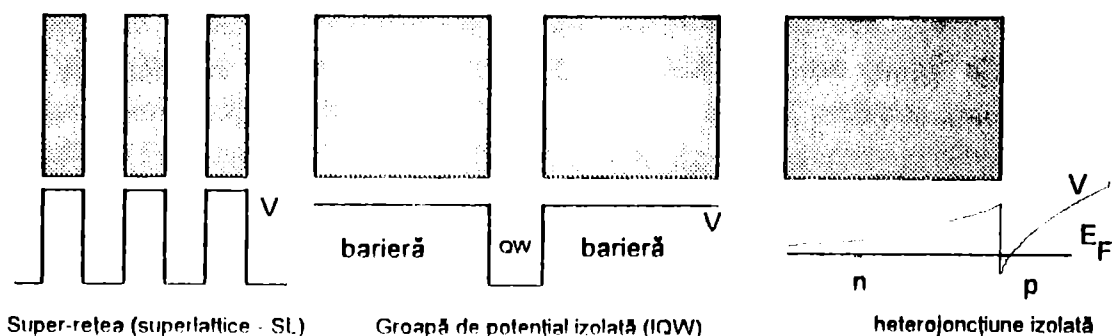


Fig. III.2 Câteva exemple de potențial adițional: cel datorat barierelor într-o super-rețea, pentru o groapă de potențial izolată și pentru o heterojuncțiune izolată.

Dacă potențialul adițional este absent, soluțiile ecuației (III.1) sunt funcțiile Bloch $\psi_{nk}(\mathbf{r})$. Ele satisfac ecuația:

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V_{per}(\mathbf{r}) \right] \psi_{nk}(\mathbf{r}) = E_n \psi_{nk}(\mathbf{r}) \quad (III.2a)$$

și au forma cunoscută:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}) \quad (III.2b)$$

unde $u_{nk}(\mathbf{r})$ sunt periodice. În ecuațiile (III.2a) și (III.2b) vectorul de undă ia valori în prima zonă Brillouin. Trecem acum la analiza ecuației complete. În prezența potențialului adițional noile funcții de undă sunt combinații liniare ale funcțiilor de undă de tip Bloch (III.2b), fiindcă ele formează un sistem complet de funcții:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} \Phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{III.3})$$

Ecuatia pentru amplitudinile $\Phi_n(\mathbf{k})$ se obține înlocuind dezvoltarea (III.3) în ecuația (III.1):

$$[E_n(\mathbf{k}) - E] \Phi_n(\mathbf{k}) + \sum_{n',\mathbf{k}'} \langle \psi_{n\mathbf{k}} | U(\mathbf{r}) | \psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle \Phi_{n'}(\mathbf{k}') = 0 \quad (\text{III.4})$$

unde elementele de matrice asociate energiei potențiale adiționale $U(\mathbf{r})$ sunt date de:

$$\int \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d^3r = \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) d^3r \quad (\text{III.5})$$

Deoarece produsul $u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ este periodic, el poate fi dezvoltat în serie Fourier, utilizând vectorii rețelei reciproce, adică:

$$u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{G}} c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'; \mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{III.6})$$

Înlocuind această dezvoltare în integrala (III.5) se constată că elementele de matrice (III.5) reprezintă combinații liniare de transformate Fourier ale energiei potențiale adiționale:

$$\int \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d^3r = \sum_{\mathbf{G}} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{G}) c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'; \mathbf{G}) \quad (\text{III.5}')$$

Deoarece am presupus că energia potențială adițională este lent variabilă pe distanțe de ordinul celor ale celulei elementare, transformata Fourier \tilde{U} va avea valori foarte mici, în afara cazurilor în care argumentul $\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{G}$ are valori mult mai mici decât lărgimea zonei Brillouin. În multe aplicații vom considera doar stările energetice situate în vecinătatea minimului zonei de conducție sau a maximului zonei de valență. În plus, în arseniura de galiu (GaAs) și în majoritatea compușilor de tip AIII BV acestea sunt localizate la $\mathbf{k}=0$. De aici deducem că, pentru o stare energetică dată, sunt mixate de energia potențială adițională $U(\mathbf{r})$ și contribuie la dezvoltarea (III.4) doar stările \mathbf{k} dintr-o regiune restrânsă a zonei Brillouin. Nu vom introduce erori semnificative dacă neglijăm contribuția termenilor cu $\mathbf{G} \neq 0$. Expresia elementului de matrice devine, în acest caz, considerabil mai simplă:

$$\langle \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) | U(\mathbf{r}) | \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle = \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'; 0) \quad (\text{III.7})$$

Următoarea etapă constă în evaluarea coeficienților $c(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'; 0)$. În vecinătatea lui $\mathbf{k}=0$, funcțiile periodice $u_{n\mathbf{k}}$ și $u_{n'\mathbf{k}'}$ pot fi exprimate utilizând funcțiile periodice u_{m0} cu ajutorul variantei \mathbf{k}_p a teoriei perturbației:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{m}_n}{m_n [E_n(0) - E_m(0)]} u_{m0}(\mathbf{r}) + \dots \quad (\text{III.8})$$

Observații:

a) Aceasta este o aproximație foarte bună dacă banda energetică n este bine separată de celelalte benzi energetice. În aceste condiții, pentru $\mathbf{k} \approx 0$, numitorii sunt mult mai mari ca numărătorii fracțiilor care figurează în suma din (III.8).

b) Dacă există benzi interzise înguste, cuplaj între benzi, sau dacă pentru $\mathbf{k}=0$ există degenerare, trebuie utilizată o metodă diferită. Aceasta se bazează pe

identificarea sub-benzilor energetice care au o contribuție comparabilă, urmată de analiza comportării acestora în vecinătatea punctului $\mathbf{k}=0$.

c) Termenii neglijați în ecuația (III.8) au ordinul de mărime $\mathbf{k}p_{mn} / m_0 [E_m(0) - E_n(0)]^2$ sau mai mic

Combinând ecuațiile (III.8) și (III.6), deducem expresia coeficienților $c(\mathbf{n}\mathbf{k}, \mathbf{n}'\mathbf{k}'; 0)$:

$$c(\mathbf{n}\mathbf{k}, \mathbf{n}'\mathbf{k}'; 0) = \delta_{\mathbf{nn}'} + \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')p_{\mathbf{nn}'}}{m_0 [E_n(0) - E_{n'}(0)]} (1 - \delta_{\mathbf{nn}'}) \quad (III.9)$$

Notând în (III.9) cu $\Lambda_{\mathbf{nn}'}$ contribuția termenilor nediagonali din al doilea termen al membrului drept, se obține pentru elementele de matrice ale potențialului $U(\mathbf{r})$ o expresie de forma:

$$\langle \psi_{\mathbf{n}\mathbf{k}} | U(\mathbf{r}) | \psi_{\mathbf{n}'\mathbf{k}'} \rangle = \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [\delta_{\mathbf{nn}'} + \Lambda_{\mathbf{nn}'} (1 - \delta_{\mathbf{nn}'})] \quad (III.10)$$

Observație:

Dacă energia de cuplaj nu are valori mari, contribuția termenilor nediagonali poate fi ignorată fără a introduce erori semnificative. Ea corectează energia în al doilea ordin de perturbație. Corecția pentru funcțiile de undă este de ordinul

$$\frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')p_{\mathbf{nn}'}}{m_0 [E_n(0) - E_{n'}(0)]} \frac{U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{[E_n(0) - E_{n'}(0)]} \psi_{\mathbf{n}'} \quad (III.11)$$

adică mai mică printr-un factor proporțional cu $\langle |U| \rangle / E_g$ decât corecția $\mathbf{k}p$ de ordinul întâi dată de (III.8). ($\langle |U| \rangle$ este element de matrice al potențialului). E_g are valori tipice de ordinul 1 eV, iar prin energie mică de cuplaj înțelegem că valoarea raportului $\langle |U| \rangle / E_g$ este, de asemenea, mică.

Neglijând în ecuația (III.10) contribuția termenilor nediagonali, (III.4) poate fi rescrisă sub o formă considerabil mai simplă:

$$[E_n(\mathbf{k}) - E] \Phi(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \Phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{k}') \approx 0 \quad (III.12)$$

Întrucât suntem interesați de o zonă restrânsă în jurul punctului $\mathbf{k}=0$, $E(\mathbf{k})$ poate fi aproximată satisfăcător în ordinul al doilea $\mathbf{k}p$ al teoriei perturbației:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm}^\alpha p_{nm}^\beta + p_{nm}^\beta p_{nm}^\alpha}{E_n(0) - E_m(0)} \right] k_\alpha k_\beta \quad (III.13)$$

în această expresie indicii α, β având valorile x, y sau z.

Observație:

Dacă banda de conducție are un extrem simplu, izotrop și nedegenerat, așa cum se petrece în GaAs și în semiconductorii cu structură cristalină de același tip, în ecuația (III.13) contribuțiile nediagonale se anulează, adică:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (III.13a)$$

unde:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{P_{nm}^\alpha P_{nm}^\alpha}{E_n(0) - E_m(0)} \quad (\text{III.13b})$$

este *inversul masei efective* asociată sub-benzii energetice n . În ecuația (III.13b) α ia valorile x, y sau z . Transformând Fourier ecuația (III.2a), în care utilizăm dezvoltarea (III.3), ecuația (III.13) și aproximațiile (III.13a,b) (ca și cum acestea ar fi valabile în tot spațiul \mathbf{k}), obținem:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - E_n(0)] F(\mathbf{r}) \quad (\text{III.14})$$

În această ecuație $F(\mathbf{r})$ este transformata Fourier a funcției $\Phi_n(\mathbf{k})$. **Ecuația (III.14) este celebra ecuație a masei efective**, des utilizată în teoria impurităților superficiale, funcția de undă $F(\mathbf{r})$ fiind cunoscută sub numele de *funcție anvelopă*.

În continuare *ne propunem să extragem semnificația fizică a funcției anvelopă*. Mai întâi să observăm că aproximațiile folosite și ecuațiile (III.3), (III.8), permit scrierea funcției de undă totale astfel:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \Phi_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{\mathbf{k} \mathbf{p}_{mn}}{m_0 [E_n(0) - E_m(0)]} u_{m0}(\mathbf{r}) \right] = \\ &= F(\mathbf{r}) u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{-i[\nabla F(\mathbf{r})] \mathbf{p}_{mn}}{m_0 [E_n(0) - E_m(0)]} u_{m0}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

În prima aproximație, *funcția anvelopă $F(\mathbf{r})$ joacă rolul unei modulații lente a factorului Bloch $u_{n0}(\mathbf{r})$* , rapid variabil la scara constantei de rețea cristalină. Observați că *următorul termen reprezintă o corecție, datorată celorlalte funcții Bloch pentru $k=0$, proporțională cu gradientul funcției anvelopă $F(\mathbf{r})$* . De cele mai multe ori se neglijează această contribuție, astfel încât veți întâlni ecuația (III.15) în forma ei simplificată. Cu toate acestea *acest termen are un rol important atunci când suntem interesați de comportarea derivatei funcției de undă $\psi(\mathbf{r})$* , adică atunci când sunt studiate condițiile la limită impuse funcției de undă totale.

III.2 Condițiile la limită impuse funcției anvelopă

Dacă analizăm ecuația (III.14) constatăm că ea are o proprietate remarcabilă: *toate detaliile microscopice de structură cristalină ale semiconductorului sunt "ascunse" (înglobate) în mărimea m^* , numită masă efectivă, și în valoarea extremului sub-benzii n , $E_n(0)$* . Acest fapt a fost posibil pentru că am presupus că energia potențială $U(\mathbf{r})$ variază lent și nu are valori apreciabile.

Ce se petrece atunci când realizăm o interfață între două materiale semiconductoare diferite, A și B? Acum lucrurile se complică apreciabil, pentru că cei doi parametri amintiți mai sus, m^* și $E_n(0)$ au valori care sunt sensibil diferite în cele

două materiale. În plus, așa cum am arătat în capitolele anterioare, tehnologiile utilizate curent permit obținerea unor interfețe abrupte, regiunea de tranziție de la materialul de tip A la materialul de tip B ocupând doar câteva constante de rețea cristalină.

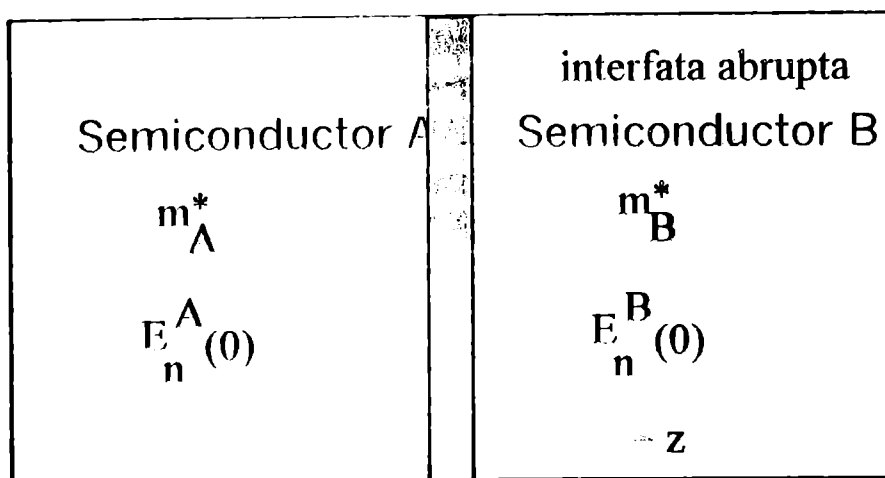


Fig. III.3 Interfață abruptă între doi semiconductori cu structuri cristaline diferite.

Trebuie să generalizăm ecuația (III.14), astfel încât să o putem aplica și în cazurile în care minimul benzii de conducție și masa efectivă sunt funcții de poziție. Dependența de poziție (în lungul direcției z , perpendiculară pe planul interfeței) a extremului benzii de conducție $E_n(k=0, z)$ poate fi inclusă în energia potențială $U(\mathbf{r})$, mișcarea purtătorului de sarcină având loc într-un câmp cu energia potențială efectivă $U(\mathbf{r}) + E_n(0, z)$. Urmându-i pe Harrison [61HAR], Ben Daniel și Duke [66BEN] vom scrie operatorul energiei cinetice într-o formă care conservă caracterul hermitic al hamiltonianului:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(z)} \nabla \right) + U(\mathbf{r}) + E_n(0, z) \right] F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}) \quad (\text{III.16})$$

Această ecuație trebuie privită cu circumspecție deoarece variația extremului benzii de conducție între $E_n^A(0, z)$ și $E_n^B(0, z)$ este cuprinsă (în toate cazurile de interes practic) între 0.1-1 eV și are loc pe distanțe de câteva constante de rețea cristalină. Datorită acestui fapt, variația energiei potențiale este prea rapidă pentru ca aproximația funcției anvelopă, așa cum a fost descrisă până acum, să fie valabilă. Cu toate acestea, putem extrage din ecuația (III.16) informații ce privesc natura condițiilor la limită asociate funcției anvelopă. În mod firesc, acestea vor trebui adaptate cazurilor reale, astfel încât rezultatele cantitative să fie în acord cu observațiile experimentale. Considerăm că variațiile masei efective și ale extremului benzii de conducție au loc într-o regiune infimezimală de grosime 2ϵ , în vecinătatea interfeței care separă semiconductorii A,B. Integrăm între $-\epsilon$ și $+\epsilon$:

$$F^{\wedge}(-\varepsilon) - F^{\text{B}}(\varepsilon) \quad (III.17)$$

$$\frac{1}{m_{\text{A}}^*} \frac{\partial}{\partial z} F^{\wedge} \Big|_{-\varepsilon} = \frac{1}{m_{\text{B}}^*} \frac{\partial}{\partial z} F^{\text{B}} \Big|_{\varepsilon}$$

Pentru a atribui sens fizic condițiilor la limită (III.17) trebuie să analizăm implicațiile lor asupra funcției de undă totale (este vorba de funcția de undă III.15). Pentru ca aceasta să fie continuă simultan cu funcția anvelopă F, trebuie să presupunem că

$$u_{\text{no}}^{\wedge} \cong u_{\text{no}}^{\text{B}} \quad (III.18)$$

și că al doilea termen din contribuția la funcția de undă (III.15) este mic (așa cum au demonstrat Ben Daniel și Duke [66BEN]). *Ecuatia (III.18) este plauzibilă în sistemele de semiconductori AIII-BV, atâta timp cât considerăm același extrem al benzilor de ambele părți ale interfeței (de exemplu minimul benzii de conducție, corespunzător benzii interzise directe).*

În continuare ne concentrăm atenția asupra operatorului densității curentului de probabilitate. În cazul stărilor staționare, densitatea de probabilitate de localizare nu depinde de timp. Aceasta implică o aceeași valoare a densității curentului de probabilitate în lungul axei z, de ambele părți ale interfeței. În consecință, media acestei componente a densității curentului de probabilitate, calculată pentru un volum microscopic Ω , volum care include una sau mai multe celule unitate, va fi aceeași de ambele părți ale interfeței. Această medie se poate calcula folosind elementele de matrice ale operatorului asociat impulsului, corespunzătoare funcțiilor u_{n,m_0}

$$\int_{\text{celula}} u_{\text{no}}^* \frac{\partial}{\partial z} u_{\text{mo}} d^3r = \frac{i}{\hbar} p_{mn} \quad (III.19)$$

Observație:

În cazul compușilor de tipul AIII-BV, pentru extremele benzii de valență și de conducție care conduc la apariția benzii interzise directe, datorită simetriei, elementele de matrice (III.19) se anulează ori de câte ori $m=n$ [66KAN].

Media densității curentului de probabilitate de localizare, calculată pentru fața A a interfeței prin utilizarea relațiilor (III.13b) și (III.15), se poate scrie sub forma:

$$\langle J_{\text{A}} \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \text{Im} \int_{\Omega} \psi_{\text{A}}^* \frac{\partial}{\partial z} \psi_{\text{A}} d^3r = \frac{\hbar}{m_{\text{A}}^*} \text{Im} \left[F_{\text{A}}^*(0) \frac{\partial}{\partial z} F_{\text{A}}(0) \right] \quad (III.20)$$

Cu ajutorul ecuației (III.20) deducem că, din continuitatea mediei densității curentului de probabilitate la traversarea interfeței, decurge egalitatea importantă:

$$\frac{\hbar}{m_{\text{A}}^*} \text{Im} \left[F_{\text{A}}^*(0) \frac{\partial}{\partial z} F_{\text{A}}(0) \right] = \frac{\hbar}{m_{\text{B}}^*} \text{Im} \left[F_{\text{B}}^*(0) \frac{\partial}{\partial z} F_{\text{B}}(0) \right] \quad (III.21)$$

sau, prin cuvinte, *condițiile la limită (III.17) implică o densitate medie constantă a densității curentului de probabilitate*

Această concluzie este în concordanță cu observațiile experimentale, astfel încât vom utiliza în cele ce urmează condiții la limită de tipul (III.17).

III.3 Efectul cuplajului între benzile energetice

Așa cum am precizat într-o observație anterioară (pagina 41), *neglijarea cuplajului existent între benzile energetice nu conduce întotdeauna la rezultate corecte*. Situațiile practice în care se manifestă asemenea abateri se încadrează de obicei în următoarele cazuri:

a) *aparitia degenerării benzii energetice în apropierea unui extremi*, situație specifică tuturor semiconductorilor care cristalizează în sistemul cubic, unde *maximul benzii de valență este degenerat în punctul Γ al zonei Brillouin ($k=0$)* (Fig.

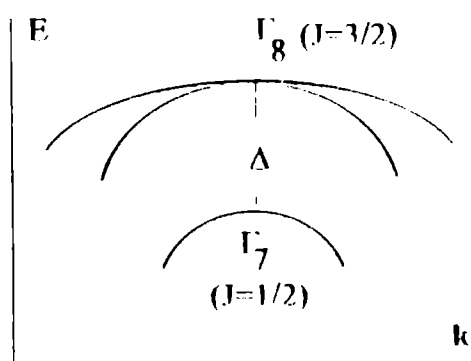


Fig. III.4 Reprezentare schematică a vârfului benzii de valență pentru semiconductorii care cristalizează în sistemul cubic. Notațiile sunt cele utilizate în cazul compușilor zinc-blendă. Cu Δ s-a notat desplicarea spin-orbită. (după M. Altarelli, *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices*)

III.4).

b) *Cuplajul benzilor produce deviații de la aproximația parabolică*. O asemenea situație este des întâlnită în cazul benzii de conducție a semiconductorilor cu bandă interzisă directă. În cazul special al semiconductorilor cu bandă interzisă îngustă, de exemplu, pentru stibiura de indiu InSb , o asemenea abatere este importantă chiar în vecinătatea minimului benzii de valență [66KAN]. Chiar și în arseniura de galiu GaAs , dacă energia electronilor aflați în banda de conducție depășește 0.1 eV , se va obține un efect sesizabil. În capitolul dedicat studiului numeric al interfețelor vom reveni asupra acestui aspect important.

c) *În anumite situații importante, aproximația uni-bandă nu este aplicabilă*. Acest fenomen este datorat unei configurații particulare a diagramei benzilor energetice la interfața structurii. Un caz tipic este cel al interfeței InAs/GaSb (Fig.III.5). Așa cum putem observa, într-un domeniu energetic important și interesant pentru aplicații, funcțiile de undă au caracterul specific purtătorilor aflați în banda de conducție pentru o parte a structurii (InAs), pentru cealaltă parte a joncțiunii (GaSb) caracterul fiind cel specific purtătorilor aflați în banda de valență. De și o asemenea comportare complică în mod considerabil analiza interfeței, multe efecte cuantice interesante au ca sursă tocmai un asemenea aranjament exotic al benzilor energetice.

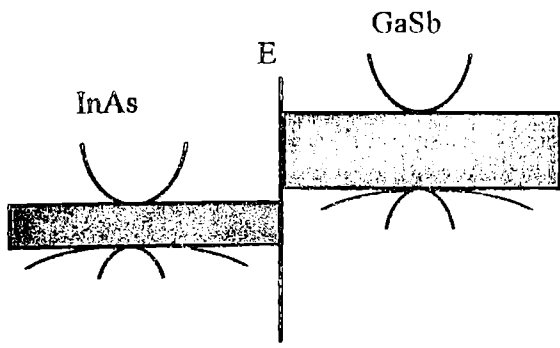


Fig. III.5 Reprezentare schematică a aranjamentului benzilor energetice la interfața structurii InAs/GaSb. Regiunea hașurată reprezintă banda interzisă. (figura este desenată după M. Altarelli, *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices*).

Analiza aproximației uni-bancă s-a bazat, în esență, pe teoria dezvoltată pentru impuritățile donoare (numite și impurități puțin adânci, sau superficiale, în sensul că ele plasează o sub-bandă energetică îngustă în banda interzisă și în imediata vecinătate a minimumului benzii de conducție.). Dacă mai multe sub-benzi energetice au o pondere comparabilă în dezvoltarea funcției de undă totale, aproximația utilizată este specifică teoriei dezvoltate pentru impuritățile acceptoare [57KOH].

Începem prin a identifica acele sub-benzi, specifice semiconductorilor masivi, care au o contribuție comparabilă, apoi studiem comportarea lor în vecinătatea punctului $k=0$. Ecuația (III.13) poate fi scrisă sub o formă mai generală:

$$H_{lm}(\mathbf{k}) = E_l(0)\delta_{lm} + \sum_{\alpha=1}^3 p_{lm}^{\alpha} k_{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 D_{lm}^{\alpha,\beta} k_{\alpha} k_{\beta} \quad (\text{III.22})$$

În (III.22) $l,m=1,2,\dots,n$, iar indicii direcțiilor α,β au valorile x,y sau z . Odată ce vectorul de îndă \mathbf{k} este precizat, $E_l(\mathbf{k})$ se obține determinând valorile proprii ale matricii $n \times n$ $H_{lm}(\mathbf{k})$. Termenii de cuplaj direct $\mathbf{k}\mathbf{p}$ între cele n benzi energetice sunt descriși de contribuțiile $p_{lm}^{\alpha} k_{\alpha}$, în care matricea p^{α} este dată de:

$$p_{lm}^{\alpha} = \frac{\hbar}{m_0} \langle u_l | p^{\alpha} | u_m \rangle \quad (\text{III.23})$$

Termenii pătratici, proporționali cu matricea $D^{\alpha,\beta}$, reflectă cuplajul indirect între două benzi energetice, prin intermediul celorlalte benzi neincluse în set.

Exemplu:

Să considerăm matricea 6×6 , precizată prin Tabelul I, care reprezintă banda de conducție și componenta superioară, provenită din desplicarea spin-orbită, a benzii de valență. O asemenea descriere este potrivită pentru materialele în care desplicarea spin-orbită are valori apreciabile. În punctul Γ al zonei Brillouin ($\mathbf{k}=0$) este prezentă legea de dispersie pentru banda de conducție, având un puternic caracter s și, de asemenea, sunt prezente stările spin-up și respectiv spin-down. Masa efectivă m^* care apare în termenii diagonali corespunzători își are originea în cuplajul cu benzile neincluse în set, în primul rând cu cele ale benzii de valență, neafectate de desplicare [59ROT]. Banda de valență are caracter p iar ramura superioară, generată de interacția spin-orbită, corespunde stărilor cu moment cinetic $J=3/2$, clasificate prin cele patru valori posibile ale proiecției pe axa z , de la $J_z = -3/2$, la $3/2$. Parametrul P este definit prin intermediul elementelor de matrice inter-bandă ale impulsului,

$iP = \langle s | p_x | p_x \rangle$, unde p_x indică un caracter p_x de valență, al funcției de undă, iar s pe cel de conducție în punctul Γ .

TABELUL I

Hamiltonianul kp ce descrie interacția benzii de conducție de tip s , în prezența degenerării de spin, cu ramura superioară spin-orbită ($p_{3/2}$) a benzii de valență. Cele patru extreme degenerate ale benzii de valență sunt indexate prin valorile lui $J_z = -3/2, -1/2, 1/2$ sau $3/2$. Partea inferioară a matricii hamiltonianului se obține prin conjugare hermitică. Valorile sunt date în unități atomice, $\hbar/2\pi m_0 = 1$ (după M. Altarelli, *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices*)

	S-up	3/2	-1/2	S-down	1/2	-3/2
S-up	$E_c + \frac{k^2}{2m^*}$	$\frac{iP}{\sqrt{2}}(k_x + ik_y)$	$\frac{-i}{\sqrt{6}}P(k_x - ik_y)$	0	$-1\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	0
3/2		$E_v - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}\right)k_x^2$ $-\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2)$ $-i\sqrt{2}\gamma_3 k_x k_y$	0	$\sqrt{3}\gamma_3$ $(k_x - ik_y)k_z$	0
-1/2			$E_v - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right)k_x^2$ $\left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2)$	$i\frac{\sqrt{2}}{3}Pk_z$	0	$-\sqrt{3}\gamma_3$ $(k_x - ik_y)k_z$
S-down				$E_c + \frac{k^2}{2m^*}$	$\frac{i}{\sqrt{6}}P(k_x + ik_y)$	$\frac{-i}{\sqrt{2}}P(k_x - ik_y)$
1/2					$E_v - \left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right)k_x^2$ $-\left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2)$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2)$ $-i\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y$
-3/2						$E_v - \left(\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}\right)k_x^2$ $-\left(\frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2)$

Aceasta înseamnă că masa efectivă este de forma $m^{*-1} = 1 + 2P^2/2(E_c - E_v + \Delta)$, unde Δ este mărimea despicerii spin-orbită. Dacă suntem interesați de zona energetică din vecinătatea vârfulu benzii de conducție, putem neglija cu totul banda de conducție; o asemenea aproximație se reduce la înlocuirea liniei și coloanelor 1 și 4 (valorile coeficienților $(\gamma_{1,2,3})$ trebuind renormalizate). Matricea rezultantă 4×4 este așa numitul hamiltonian Luttinger [56LUT] care descrie despicarea vârfulu benzii de valență și generarea golurilor grele și ușoare, pentru $k \neq 0$. Parametrii $\gamma_{1,2,3}$ sunt specific fiecărui material pentru care se construiesc matricile $D^{\alpha,\beta}$. Acum suntem pregătiți să generalizăm ecuațiile (III.14), (III.15) și (III.17) pentru cazul multi-bandă, prin analogie cu procedeul folosit de Luttinger și Kohn în cazul impurităților acceptoare. Vom obține următorul sistem de ecuații:

$$\sum_{m=1}^n [H_{lm}(-i\nabla) + U(\mathbf{r})\delta_{lm}] F_m(\mathbf{r}) = EF_l(\mathbf{r}) \quad (III.24)$$

pentru funcția de anvelopă cu n componente ($l=1,2,\dots,n$). Prin analogie cu ecuația (III.15), funcția de undă totală va avea forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^n \left[F_l(\mathbf{r}) u_{l0}(\mathbf{r}) + \sum_{m>n} \frac{-i(\nabla F_l(\mathbf{r})) p_{lm}}{m_o [E_l(0) - E_m(0)]} u_{m0}(\mathbf{r}) \right] \quad (\text{III.25})$$

Observații:

a) Partea de energie cinetică este descrisă prin înlocuirea în ecuația (III.22) a vectorului de undă \mathbf{k} cu $-\text{igrad}$;

b) *Termenul de energie potențială este diagonal în indicele de bandă, aceasta fiind consecința supoziției că energia potențială variază lent (ea poate fi considerată constantă în fiecare celulă unitate și deci elementele sale de matrice nedigonale se anulează datorită ortogonalității funcțiilor de undă Bloch).*

Acum generalizăm condițiile la limită. Pentru $l=1,2,\dots,n$, găsim $F_l^A(-\epsilon) = F_l^B(\epsilon)$. Prin urmare suma

$$\sum_{m=1}^n \left[p_{lm}^z - i \sum_{\alpha=1}^3 (D_{lm}^{\alpha z} + D_{lm}^{\alpha z}) \nabla_{\alpha} \right] F_m \quad (\text{III.26})$$

este continuă la $z=0$, pentru $l=1,2,\dots,n$. *Trebuie, de asemenea, să presupunem valabilă ecuația (III.18) pentru toate sub-benzile n care ne interesează.* Termenii care nu conțin operatorul de diferențiere (proveniți din p_{lm}) și cei care implică diferențierea în raport cu x și y , provin din termenii de mixaj $k_x k_z$, $k_y k_z$ și, respectiv, $k_y k_x$ în H_{lm} . Să urmărim cum se scriu concret aceste condiții la limită pentru o interfață plană, ideală, realizată între doi semiconductori izomorfi cristalin, în cazul luării în considerare a 6 sub-benzi energetice (Tabelul I). Pentru această situație, energia potențială $U(\mathbf{r})$ depinde numai de z , iar k_x și k_y sunt numere cuantice bune. Funcția de undă anvelopă se poate scrie:

$$F^{A,B}(\mathbf{r}) = e^{i(k_x x + k_y y)} F^{A,B}(z) \quad (\text{III.27})$$

Înlocuind în ecuația (III.26), mai întâi se deduce continuitatea expresiei

$$\sum_{m=1}^6 \left[p_{lm}^z + \sum_{\alpha=x,y} (D_{lm}^{\alpha z} + D_{lm}^{\alpha z}) k_{\alpha} - 2i D_{lm}^{\alpha z} \frac{\partial}{\partial z} \right] F_m \quad (\text{III.28a})$$

Pe de altă parte, *dacă se presupune că relația (III.18) este valabilă pentru $l=1,2,\dots,n$, elementele de matrice p_{lm} între aceste funcții Bloch trebuie să fie egale* deoarece sunt elementele de matrice care mixează funcțiile de undă pentru aceleași benzi de valență și de conducție. *Aceste elemente de matrice depind în mod esențial numai de constanta rețelei cristaline [72CAR]; ca urmare, pentru materiale izomorfe, ele au aproape aceeași valoare.* Având în vedere această observație, din continuitatea expresiei (III.28), deducem și continuitatea contribuției

$$\sum_{m=1}^6 \left[\sum_{\alpha=x,y} (D_{lm}^{z\alpha} + D_{lm}^{\alpha z}) k_{\alpha} - 2iD_{lm}^{zz} \frac{\partial}{\partial z} \right] \Gamma_m \quad (\text{III.28b})$$

Aceasta este forma uzuală a condițiilor la limită utilizate pentru determinarea structurii benzilor energetice în super-rețele de tipul InAs/GaSb [83ALT].

III.4 Aspecte critice ale aproximației funcției anvelopă

Un aspect interesant, legat de aproximația funcției anvelopă, este acesta: *dacă se compară predicțiile aproximației cu rezultatele experimentale, se obține o concordanță chiar mai bună decât aceea la care ne-am așteptat, ținând cont de faptul că am introdus, uneori fără o justificare foarte serioasă, restricții și ipoteze severe.* În mod normal, trebuie să analizăm critic anumite ipoteze făcute pe parcursul calculelor anterioare și să precizăm condițiile în care acestea nu afectează semnificativ acuratețea rezultatelor cu relevanță fizică. Întrucât sistemul GaAs/AlGaAs va fi, pe parcursul capitolelor următoare, utilizat frecvent, ne vom concentra asupra consecințelor aplicării aproximației funcției anvelopă pentru descrierea sa.

a) *Variația lentă.* Dacă analizați figura I.7a, veți constata că stările cuantice ale căror energii au valori mai mici decât înălțimea gropilor de potențial (GaAs) și sunt situate în vecinătatea minimului benzii de conducție al arseniurii de galiu, corespund unei regiuni "adânci" în banda interzisă a aliajului AlGaAs. *La interfață, atenuarea funcțiilor de undă, în zona clasic interzisă, este extrem de rapidă și condiția de variație lentă este violată.* Din aceleași motive, ne așteptăm ca amplitudinea funcției de undă în zona clasic interzisă a AlGaAs să fie foarte mică. *În consecință, folosirea unei aproximații nu tocmai potrivite (în această regiune) va afecta puțin rezultatele finale.*

b) *Condiții la limită.* Vom presupune că ecuația (III.18) este numai aproximativ adevărată, iar în membrul drept al ecuației (III.15) vom neglija termenul de corecție $\mathbf{k}p$. Tentativa de a scrie o ecuație (III.18) "îmbunătățită" este însoțită de dificultatea introducerii unor parametri cu valoare necunoscută. În mod firesc, atât timp cât aproximațiile mai simple nu intră în conflict cu rezultatele experimentale, o asemenea abordare complicată nu este justificată. *De asemenea, vom presupune că rețeaua cristalină a ambilor semiconductori este perfect periodică, exceptând regiunea planului interfeței.* Realist vorbind, ar trebui să avem în vedere nu un plan ci un strat de interfață înglobând câteva plane atomice, caracterizat prin coeficienții de reflexie și transmisie (cu valoare nedeterminată). *Literatura de specialitate subliniază frecvent că analiza teoretică a condițiilor la limită este, în stadiul actual, nesatisfăcătoare.* În plus, utilizarea matricilor $\mathbf{k}p$ pentru descrierea comportării în structurile masive a extremelor benzilor de energie poate conduce la situații neașteptate. Schuurmans și 't Hooft au arătat că un hamiltonian de forma (III.22) conduce, în condiții anumite, la soluții a căror semnificație fizică este discutabilă.

III.5 Aplicații pentru sisteme de tipul $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Abandonarea self-consistenței.

Dacă fracția molară a aluminiului satisface condiția $0 < x < 0.45$, aliajul digital $Al_xGa_{1-x}As$ are, în punctul Γ al zonei Brillouin, bandă interzisă directă [78CAS]. Atunci când valorile fracției molare x depășesc sensibil limita superioară a intervalului precizat, funcțiile de undă ale benzii de conducție nu mai satisfac ecuația (III.18). Cu toate acestea, se pot calcula spectrele energetice pentru banda de valență.

În cele ce urmează, vom presupune că super-rețelele sunt sintetizate din materiale semiconductoare intrinseci, astfel încât să se poată neglija acumularea sarcinii electrice în vecinătatea interfețelor și în gropile de potențial formate în GaAs. Practic, aceasta înseamnă că neglijăm energia potențială $U(\mathbf{r})$ și considerăm că în groapa de potențial extremul benzii de conducție este plat.

Mărimea discontinuității benzii interzise, la interfețele care separă cele două tipuri de materiale, reprezintă unul dintre cei mai importanți parametri implicați în calculele spectrului energetic. Împreună cu poziția maximumului benzii de valență, aceasta permite stabilirea configurației benzilor energetice la interfață. Așa stând lucrurile, s-ar putea crede că acest parametru este cunoscut cu acuratețe, măcar pentru sistemele de interes major. Din nefericire, în ciuda importanței sale, valoarea discontinuității nu poate fi, cel puțin în prezent, prezisă teoretic cu precizia reclamată de aplicațiile practice, nici măcar pentru cel mai studiat sistem, $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. Pe plan experimental, rezultatele publicate pentru discontinuitatea benzii de valență prezintă variații în domeniul 15% (R. Dingle) - 40% [84MIL, 84WAN], din diferența benzilor interzise. Din acest motiv, este important să se specifice valoarea folosită în calcule, ori de câte ori sunt prezentate comparații numerice cu rezultatele obținute de alți cercetători (în multe cazuri, o concordanță mai bună cu rezultatele experimentale nu înseamnă o metodă mai adecvată, ci utilizarea unor valori "potrivite" pentru parametrii relevanți).

*Super-rețelele sintetizate utilizând procedeul MBE au axa de creștere orientată în lungul direcției (001) (axa z în cele discutate până acum) [82PLO]. Deducem că, **într-o super-rețea, zona Brillouin este puternic aplatizată în lungul axei z** (lărgimea fiind $2\pi/d$, unde $d \gg a$ este perioada super-rețelei, iar a este constanta rețelei cristaline), pe direcțiile x, y având lărgimea $2\pi/a$. **Structura de benzi va fi puternic asimetrică**, asemănătoare celei din structurile masive (cu lărgimi ale sub-benzilor de $\sim 10\text{eV}$) în planul k_x, k_y , dar cu sub-benzi mult mai înguste ($\sim (d/a)^2(10\text{eV}) \sim 10\text{meV}$) în direcția k_z .*

În cele mai multe cazuri, legea de dispersie în lungul direcției z este ușor de analizat, chiar dacă suntem interesați de efectele cuplajului între benzi. Această simplitate relativă este datorată faptului că cei mai mulți termeni nediagonali se anulează pentru $k_{x,y}=0$. Se observă că stările cu $J = \pm 3/2$, corespunzând golurilor

grele, se decuplează, comportându-se ca particule cu masa efectivă $m_{hh} = 1/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$. Pentru stările din banda de conducție situația este ceva mai complicată. Ele sunt cuplate prin intermediul elementelor de matrice P (găsiți definiția acestora la pagina 48) cu golurile ușoare, corespunzând stărilor cu $J_z = \pm 1/2$.

Observație:

Modelul 6x6 reprezintă o aproximație rezonabilă pentru descrierea situației fizice în sistemele GaAs/AlGaAs, atât timp cât analizăm stări cu energie care diferă de extremul benzii de valență sau de conducție cu mai puțin decât mărimea despiciării spin - orbită a benzii de valență (340 meV). În cazul golurilor grele, suntem conduși la o problemă de valori proprii de tip Kronig-Penney, condiția la limită fiind:

$$\left. \frac{1}{m_{hh}^A} \frac{dF^A}{dz} \right|_{0^-} = \left. \frac{1}{m_{hh}^B} \frac{dF^B}{dz} \right|_{0^+}$$

În acest caz, Bastard a arătat [81BAS] că se obține următoarea relație analitică pentru legea de dispersie:

$$\cos(k_z d) = \cos(k_{zA} d_A) \cos(k_{zB} d_B) - \frac{1}{2} \left(\frac{m_{hh}^A k_{zB}}{m_{hh}^B k_{zA}} + \frac{m_{hh}^B k_{zA}}{m_{hh}^A k_{zB}} \right) \sin(k_{zA} d_A) \sin(k_{zB} d_B) \quad \text{III.29}$$

unde

$$k_{zA,B}^2 = 2m_{hh}^{A,B} (E - E_v^{A,B}) \quad \text{(III.29a)}$$

iar perioada super-rețelei este determinată de grosimea d_A (d_B) a materialului A(B). Pentru golurile ușoare și electronii de conducție avem o matrice 2x2 între stările cu spin-up și $J_z = +1/2$, sau una echivalentă pentru spin-down și $J_z = -1/2$:

$$\begin{aligned} E_c + \frac{1}{2m^*} k_z^2 & & -i\sqrt{2/3} P k_z \\ i\sqrt{2/3} P k_z & & E_v - \frac{1}{2} (\gamma_1 + 2\gamma_2) k_z^2 \end{aligned} \quad \text{(III.30)}$$

expresii în care au fost utilizate unități de măsură astfel încât $\hbar = 1$, $m_0 = 1$. Determinarea sub-benzilor de energie ale super-rețelei în cazul existenței cuplajului se poate face după procedeul descris anterior, sau, *dacă suntem interesați de stările din imediata vecinătate a extremului benzii*, determinând valorile proprii asociate matricii (III.30) apoi descriind dispersia non-parabolică prin utilizarea unor mase efective dependente de energie:

$$\xi_c(k_z) = E_c + \frac{1}{2m^*(E)} k_z^2, \quad \xi_v(k_z) = E_v - \frac{1}{2m_{hh}(E)} k_z^2 \quad \text{(III.31)}$$

Să considerăm acum cazul mai general, în care $k_x, y \neq 0$. Acesta este un caz foarte interesant, dar mult mai dificil de analizat. Putem extrage informațiile interesante apelând la următorul model: *banda de conducție este decuplată de golurile ușoare și grele, sub-benzile aparținând golurilor fiind puternic cuplate între ele de un hamiltonian de tip Luttinger*. Pentru banda de conducție ajungem din nou la problema de tip Kronig - Penney, posibilele corecții de neparabolicitate putând fiind incluse în

dependența masei efective de energie. Astfel, putem presupune că ecuația (III.29) este în continuare valabilă, însă ecuația (III.29a) trebuie înlocuită în ambii semiconductori A și B cu:

$$k_{z,A,B}^2 = 2m^*(E)(E - E_v^{A,B}) - k_x^2 - k_y^2 \quad (\text{III.29b})$$

Să remarcăm că, datorită invarianței la translație în lungul interfeței, $k_{x,y}$ au aceeași valoare în ambele materiale A,B și sunt numere cuantice bune.

Pentru benzile de conducție avem un hamiltonian 4x4, de tip Luttinger, pe care îl vom scrie sub forma:

$$H = \begin{matrix} & 3/2 & -1/2 & -3/2 & -3/2 \\ 3/2 & a_+ & c & b & 0 \\ -1/2 & c^* & a_- & 0 & -b \\ 1/2 & b^* & 0 & a_- & c \\ -3/2 & 0 & -b^* & c^* & a_+ \end{matrix} \quad (\text{III.32})$$

notațiile fiind următoarele:

$$\begin{aligned} a_{\pm} &= E_v - \frac{1}{2}(\gamma_1 \pm \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{1}{2}(\gamma_1 \mp 2\gamma_2)k_z^2 \\ b &= \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y)k_z \\ c &= \sqrt{3/2}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3k_xk_y] \end{aligned} \quad (\text{III.32a})$$

Soluțiile corespunzând hamiltonianului (III.32), pentru semiconductorii masivi, conduc la determinarea sub-benzilor asociate golurilor grele și golurilor ușoare, degenerate după spin. În materialele în care simetria la inversie este violată (de tip zinc-blendă, cum este GaAs) această degenerare este ridicată datorită termenilor liniari în vectorul de undă k . Însă acești termeni au, în general, valoare foarte mică și îi putem neglija. *Deoarece banda de valență este anizotropă, ne așteptăm ca efectul să se păstreze și în cazul super-rețelelor, adică legile de dispersie să depindă de direcția aleasă în planul k_x, k_y .* Acest efect este însă suficient de mic și se poate utiliza, pentru simplificarea calculelor, un model axial [D. A. Broido, L. J. Sham, 1984], [M. Altarelli, U. Ekenberg, A. Fasolino] în care parametrii γ_2 și γ_3 , din elementele de matrice c , sunt înlocuiți de $\bar{\gamma} = 1/2(\gamma_2 + \gamma_3)$. În felul acesta, ecuația (III.32) prezintă în mod clar simetrie cilindrică în jurul axei z , iar legea de dispersie este izotropă în planul k_x, k_y . Condițiile la limită pentru funcția anvelopă cu patru componente sunt precizate prin ecuațiile (III.26), care cer ca, la interfața $z=0$, componentele matricii:

$$\begin{pmatrix}
i(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) & 0 \\
0 & i(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & 0 & -\sqrt{3}\gamma_3(k_x - ik_y) \\
\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & i(\gamma_1 + 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z} & 0 \\
0 & -\sqrt{3}\gamma_3(k_x + ik_y) & 0 & i(\gamma_1 - 2\gamma_2) \frac{\partial}{\partial z}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
F_{3/2}(z) \\
F_{-1/2}(z) \\
F_{1/2}(z) \\
F_{-3/2}(z)
\end{pmatrix} \quad (\text{III.33})$$

să fie continue. Determinarea celor patru componente ale funcției anvelopă este posibilă, în general, doar pe cale numerică. În Tabelul II sunt date, utilizând unități atomice, valorile parametrilor implicați în calcule, pentru GaAs și AlAs.

TABELUL II

Parametrii de bandă ai arseniurii de galiu (GaAs) și ai arseniurii de aluminiu (AlAs). Acești parametri sunt cei din Tabelul I. Valorile sunt precizate utilizând unități atomice. Setul (a) corespunde matricii complete 6x6, precizate prin Tabelul I. Setul (b) corespunde situației în care este neglijat cuplajul benzii de conducție cu ramura superioară a benzii de valență. Banda interzisă directă E_g și mărimea despicării spin-orbită sunt date în eV (după M. Altarelli).

	GaAs		AlAs	
	(a)	(b)	(a)	(b)
P	0.65	----	0.65	---
m^*	0.195	0.067	0.307	0.124
γ_1	1.8	6.85	1.00	3.45
γ_2	-0.42	2.10	-0.54	0.68
γ_3	0.38	2.90	0.07	1.29
γ	-1.32	1.20	-1.10	0.12
E_g	1.52	1.52	3.13	3.13
Δ	0.34	0.34	0.275	0.275

III.6 Aproximații self-consistente

O situație mult mai interesantă decât cea în care este neglijat transferul de sarcină între diferite regiuni ale structurii, apare atunci când sunt realizate sisteme (deosebit de importante datorită aplicațiilor practice) în care semiconductorii sunt dopați. În aceste condiții, energia potențială $U(\mathbf{r})$ din ecuația masei efective (III.14) este determinată de densitatea de sarcină corespunzătoare funcțiilor de undă aparținând stărilor ocupate de purtătorii transferați între regiunile semiconductoare. Aceasta este o problemă complicată, care necesită un tratament separat. O vom analiza în capitolul care urmează.

IV. FIZICA TRANZISTORILOR HEMT CU HETEROJONCTIUNE $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$

IV.1 Interfața $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$

IV.1.1 Introducere

În acest capitol vom prezenta contribuția conceptului de dopare modulată la nașterea unei noi generații de tranzistori controlați prin efect de câmp. De fapt este mai corect să vorbim despre apariția unei noi generații de dispozitive electronice, cu frecvențe de lucru din ce în ce mai ridicate. Creșterea frecvenței conduce la apariția efectelor parazite, cum ar fi influența capacităților dispozitivului, care limitează domeniul de frecvență la valorile pentru care aceste influențe nu sunt supărătoare.

Pentru a înțelege adevărata importanță a conceptului de dopare modulată, introdus de Esaki și Tsu [69ESA, 70ESA], trebuie să avem în vedere, pe lângă dispozitivele electronice discrete, problemele tehnice legate de folosirea în aplicațiile digitale a circuitelor integrate pe scară largă. Unul dintre parametrii cheie, de care depind performanțele unor asemenea circuite, este *timpul cel mai scurt, necesar comutării din stare blocată, în stare deschisă*. Al doilea parametru care ne interesează în mod deosebit este *puterea disipată de dispozitiv în timpul procesului de comutare*. O întrebare se impune în mod natural: *de ce sunt acești doi parametri atât de importanți?* Răspunsul, relativ simplu, este următorul:

- *Timpul de comutare* stabilește limita superioară a vitezei de lucru (procesare) a dispozitivului.
- *Puterea disipată* stabilește densitatea structurilor (deci gradul de integrare) pe cipul semiconductor, astfel încât disiparea căldurii să nu devină o problemă.

Viteza de comutare a unui dispozitiv discret depinde de timpul în care purtătorii de sarcină pot transmite un puls de la intrarea dispozitivului, la ieșirea lui, la care trebuie adăugat timpul de încărcare a diferitelor capacități ale dispozitivului (de intrare și ieșire, spre exemplu). În circuitele integrate, capacitatea dispozitivelor active este de obicei mult mai mică decât cea a conexiunilor aferente. Cu toate acestea, atât timpul de tranzit cât și capacitățile proprii trebuie micșorate cât mai mult.

Observație:

Timpul de tranzit ar putea fi redus, micșorând lungimea canalului de tranzit. Curentul maxim suportat de dispozitiv este însă proporțional atât cu viteza purtătorilor cât și cu densitatea lor. Pentru canale foarte scurte, densitatea purtătorilor devine foarte mică și efectele parazite de transport au pondere mare.

În dispozitivele de tip MESFET (Metal-Semiconductor Field Effect Transistor) stratul semiconductor, cu rol de canal conductiv, este un strat de volum, dopat uniform. *Electronii și donorii ionizați se află în aceeași regiune spațială și interacționează, în primul rând, prin intermediul câmpului coulombian.* Această interacție micșorează mobilitatea purtătorilor. Pentru a menține niveluri importante de curent, concentrația atomilor dopanți trebuie mărită, deci împrăștierea pe impurități va deveni mai puternică. Acest mecanism menține un nivel mare de zgomot (datorat fluctuațiilor vitezei) și mobilități mici. Pentru GaAs, unul dintre compușii semiconductori utilizați cu predilecție de tehnologiile actuale, viteza maximă a electronilor descrește de la $2.1 \times 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ în materialul pur, la $1.8 \times 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ pentru niveluri de dopaj de aproximativ 10^{17} cm^{-3} [86DRU].

Micșorarea drastică a efectului împrăștierii purtătorilor de sarcină, pe impuritățile ionizate poate fi realizată separând spațial donorii (sau acceptorii) ionizați de electroni (sau goluri).

Din punct de vedere cuantic, această decuplare este posibilă dacă amplitudinea funcției de undă asociată sistemului electronilor de conducție este neglijabilă în regiunea impurităților ionizate. Prin urmare, există două condiții esențiale care trebuie satisfăcute simultan, pentru ca decuplarea să devină efectivă:

- Transferul electronilor (sau al golurilor) într-o regiune în care nu există impurități sau în care densitatea lor volumică este foarte mică. Într-o asemenea regiune, electronii (golurile) vor avea mobilitate amplificată datorită reducerii pronunțate a amplitudinii potențialului de împrăștiere. Există însă și un alt efect, mai subtil, care influențează considerabil valorile mobilității. *Acest efect este legat de modificarea spectrului energetic al electronilor transferați.* În paragrafele următoare vom arăta că, pentru electronii transferați, aproximația spectrului energetic cuasi-continuu nu este valabilă. Vom încerca să vă explicăm intuitiv în ce fel această modificare a spectrului energetic poate conduce la mărirea suplimentară a mobilității. Să considerăm un electron aflat în banda de conducție; ca urmare a interacției cu fononii rețelei, electronul poate trece dintr-o stare inițială, caracterizată prin vectorul de undă \mathbf{k} , într-o stare finală în care vectorul de undă este \mathbf{k}' , cu condiția respectării legii conservării impulsului și a energiei:

$$\hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \hbar\mathbf{q} \quad (\text{IV.1})$$

$$\hbar\omega(\mathbf{k}') - \hbar\omega(\mathbf{k}) = \hbar\omega(\mathbf{q}) \quad (\text{IV.2})$$

unde \mathbf{q} este vectorul de undă asociat fononului absorbit sau emis, iar $\omega(\mathbf{k}')$, $\omega(\mathbf{k})$, $\omega(\mathbf{q})$ sunt legile de dispersie corespunzătoare. Relațiile de mai sus iau în considerare numai procese uni-fononice. Sunt însă posibile situații

în care interacția este multi-fononică. Procesele descrise sunt posibile dacă starea inițială este ocupată, iar cea finală este liberă. Să presupunem acum că, pe o anumită direcție în cristal (de exemplu z), componenta k_z poate lua doar valori situate în intervale relativ înguste, de lărgime $\Delta k_{z,i}$, și că între diferitele intervale permise "i" există intervale de valori interzise. Mai presupunem că lărgimea intervalelor interzise este mult mai mare decât a celor permise. Datorită distribuției discontinue a valorilor lui k_z , din mulțimea proceselor de împrăștiere la care participă fononi al căror cuasi-impuls este dirijat după axa z , vor fi selectate doar acelea în care, potrivit legilor de conservare (IV.1) și (IV.2), starea finală aparține fie intervalului permis inițial (*împrăștiere fononice intra-bandă*), fie unui alt interval permis (*împrăștiere fononice interbandă*).

Rezultatul global este acela că spectrul de frecvențe al fononilor participanți la împrăștierea purtătorilor este filtrat de spectrul energetic al electronilor de conducție.

Datorită efectului de filtraj, numărul mediu de fononi care participă la împrăștiere este mai mic decât în cazul în care distribuția energiei electronilor este cuasicontinuă. La temperatura camerei, interacția cu fononii optici limitează mobilitatea la $9000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Dacă temperatura scade, contribuția modurilor optice se diminuează rapid și, sub $50 \text{ }^\circ\text{K}$, mobilitatea unui cristal fără defecte este limitată la aproximativ $1-5 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, de interacția fononică predominant de tip piezoelectric.

O observație importantă: aceste valori (foarte mari) ale mobilităților *nu se pot obține efectiv* în dispozitivele electronice, chiar dacă, aparent, ar fi îndeplinite condițiile de mai sus. Motivul esențial este acela că, în prezența câmpului electric, sistemul electronilor de conducție se "încălzește" la temperaturi echivalente mai mari decât temperatura camerei. *Regimul de funcționare al dispozitivelor nanometrice este astfel schimbat de la cel al mobilității limitate de interacțiile fononice, în cel al vitezelor saturate de prezența câmpurilor înalte.*

• A doua condiție care trebuie avută în vedere este aceea că transferul electronilor în regiunea de mobilitate ridicată trebuie să fie simultan cu evitarea transferului în sens invers. *Micșorarea fluxului de purtători, asociat transferului în sens invers, este posibilă în heterostructurile care prezintă o discontinuitate apreciabilă a benzilor de conducție (valență) la interfață.* La traversarea interfeței, într-un sens electronii vor ceda energie rețelei, iar în sens opus vor trebui să primească energie de la aceasta. La temperaturi obișnuite al doilea proces are probabilitate termodinamică foarte

mică, dacă înălțimea barierei este $4-5 k_B T$ (probabilitatea de escaladare a barierei prin activare termică este, într-o primă aproximație, proporțională cu $\exp(-\Delta E_C/k_B T)$).

IV.1.2 Echilibrul termodinamic al interfeței

Să presupunem că, utilizând două materiale cu structuri cristaline aproape identice (*structuri izomorfe*), se realizează o heterojuncțiune. Un exemplu des întâlnit în tehnologia tranzistorilor HEMT (sau MODFET) este cel al heterojuncțiunii realizate între compușii $Al_xGa_{1-x}As$ și GaAs. Există mai multe motive pentru care această structură este preferată de tehnologi:

- Structurile cristaline ale celor două materiale sunt aproape identice (neconcordanța între valorile constantelor de rețea cristalină fiind sub 1%). *Datorită acestei compatibilități cristaline și a nivelului tehnologic actual, (state of art) prin epitaxie din fascicul molecular MBE, sau prin tehnica MOCVD se pot obține regiuni de trecere abrupte (2-3 plane atomice, respectiv 10-15 Å), lipsite de defecte cristaline majore (sau cu o densitate extrem de scăzută a stărilor de interfață).*
- Mobilitatea intrinsecă a arseniurii de galiu (pure) poate atinge $8000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, una dintre cele mai mari valori întâlnite la compușii semiconductori. *Tehnologia de obținere a monocristalelor de arseniură de galiu, cu puritate ridicată și număr mic de defecte cristaline, este foarte bine pusă la punct.*
- *Controlul discontinuității benzilor de conducție și de valență la interfață poate fi realizat comod prin schimbarea compoziției aliajului digital (aceast deziderat este realizat experimental prin controlul riguros al fracției molare a aluminiului, x). Dependența valorilor ΔE_C și ΔE_V de fracția molară x a aluminiului este bine studiată experimental și teoretic (aici trebuie să aveți în vedere și obiecțiile formulate în capitolul III).*
- *Dependența poziției nivelului energetic Fermi (măsurată față de minimul benzii de conducție a $Al_xGa_{1-x}As$) de concentrația impurităților este bine cunoscută datorită unui număr mare de lucrări experimentale. Este de asemenea bine investigată experimental dependența poziției nivelurilor donoare de fracția molară x și de concentrația impurităților donoare [84CHA].*
- *Diagrama benzilor energetice pentru GaAs este una dintre cele mai bine studiate teoretic și experimental.*
- Atât GaAs cât și $Al_xGa_{1-x}As$ sunt compuși stabili metalurgic (această afirmație nu este tocmai exactă în cazul $Al_xGa_{1-x}As$), asigurând conservarea în timp a valorilor parametrilor dispozitivelor.

Există bineînțeles și alte motive. Noi le-am enumerat aici pe cele considerate ca fiind mai importante. Fie N_D concentrația impurităților donoare în $Al_xGa_{1-x}As$. Compusul GaAs se consideră intrinsec, el conținând doar impuritățile care au fost introduse accidental în timpul procesului de creștere al monocristalului. În condițiile nivelului atins de tehnologiile actuale, densitatea impurităților accidentale este foarte mică (este de ordinul 10^{13} - 10^{14} cm^{-3}). Diagrama schematică a benzilor energetice, înainte de stabilirea echilibrului termodinamic, este reprezentată în Fig IV.1

Considerăm un nivel energetic E , situat în apropierea minimului benzii de conducție a aliajului AlGaAs (pentru simplificarea notațiilor, nu vom mai scrie indicele stoichiometric x). Probabilitățile de ocupare cu electroni, asociate acestui nivel energetic, calculate de o parte și de cealaltă a interfeței, sunt:

$$f_1(E) = 1/[1+\exp(E-E_{F1}/k_B T)] \quad (IV.3)$$

$$f_2(E) = 1/[1+\exp(E-E_{F2}/k_B T)] \quad (IV.4)$$

f_i ($i=1,2$) fiind funcțiile de distribuție Fermi-Dirac.

Cum $(E-E_{F1}) > (E-E_{F2})$, rezultă imediat că $f_2(E) > f_1(E)$ și, prin urmare, va exista un flux net de electroni dinspre AlGaAs spre GaAs. Acest proces continuă atât timp cât la interfață $E_{F2}-E_{F1} \neq 0$. Echilibrul termodinamic se atinge atunci când $f_1(E)=f_2(E)$, pentru orice E (evident, aici s-a presupus că temperaturile celor două regiuni sunt identice).

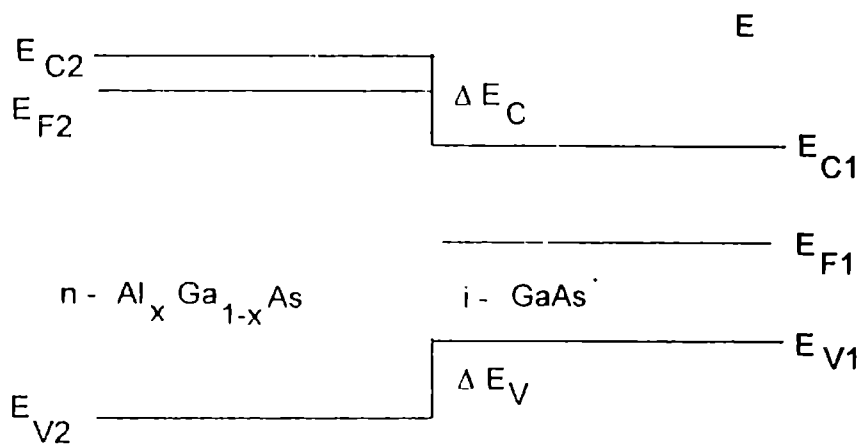


Fig. IV.1 Diagrama schematică a aliniamentului benzilor energetice la interfață, înainte de stabilirea echilibrului termodinamic. Lățimea benzii interzise a aliajului digital $Al_xGa_{1-x}As$ este controlată de fracția molară x .

Electronii traversează interfața (datorită gradientului de concentrație a impurităților) și cedează o cantitate de energie mai mică, sau chiar egală cu ΔE_C . În toate cazurile de interes practic, la temperatura camerei, $\Delta E_C \gg k_B T$ (uzual ΔE_C are valori apropiate de 0.3 eV). **Transportul sarcinii electrice peste interfața structurii este un proces limitat de efectele electrostatice.** Împreună cu donorii ionizați, se formează un strat dipolar care conține donorii ionizați pe o față, electronii difuzați pe cealaltă. Atunci când energia acestui strat dipolar

este aproximativ ΔE_C , se atinge echilibrul electrostatic. *Consecința imediată a limitării electrostatice a transferului sarcinii electrice, peste interfață, în GaAs, este aceea că electronii sunt confinați lângă interfață, într-o groapă de potențial cuasi-triunghiulară (Fig. IV.2).*

În Fig.IV.2 $-z_2$ este abscisa punctului care delimitează regiunea de sarcină spațială, datorată donozilor ionizați, de regiunea neutră a stratului de volum din GaAs. Riguros vorbind, aceasta este numai o aproximație. În apropiere de $-w_2$ numărul donozilor ionizați scade practic exponențial cu distanța.

Urmare a difuziei electronilor în GaAs, în apropierea interfeței se dezvoltă un potențial de difuzie. În GaAs ia naștere o groapă de potențial. Energia potențială $V(z)$ și spectrul energetic asociat mișcării electronilor de-a lungul direcției z pot fi determinate rezolvând simultan sistemul alcătuit de ecuațiile Schrödinger și Poisson (procedura self-consistentă) sau apelând la aproximații rezonabile (literatura abundă în aproximații care devin "rezonabile" abia după ce comparația cu calculul self-consistent le justifică).

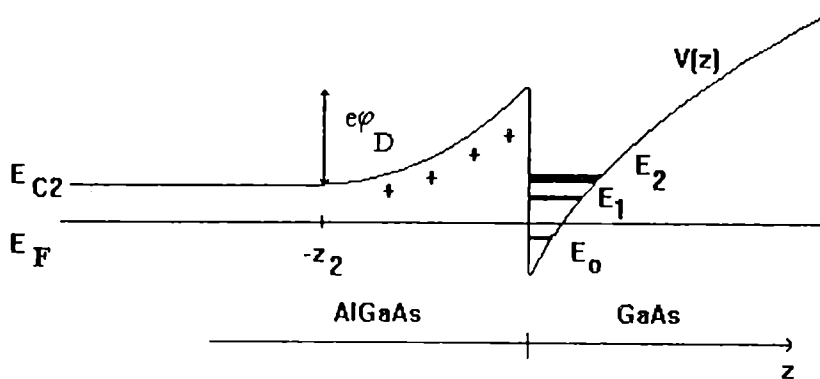


Fig.II.2 Diagrama schematică a benzilor de energie, la echilibru termodinamic, pentru heterojuncțiunea $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$. *Electronii sunt confinați lângă interfața structurii, în groapa de potențial formată de discontinuitatea benzii de conducție și energia potențială $V(z)$, dând naștere unui sistem electronic bidimensional 2DEG.* Precizăm că $V(z)$ include atât contribuția sarcinii gazului electronic bidimensional cât și contribuția datorată impurităților din GaAs, efectelor de schimb, corelație, etc.

Trebuie precizat că energia potențială este o sumă de contribuții, datorate gazului electronic, impurităților din GaAs, efectelor de schimb și corelație, etc.

IV.1.3 Confinarea la interfața heterojuncțiunii $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$

Putem obține informații interesante, referitoare la proprietățile sistemului electronic aflat în groapa de potențial de la interfața structurii, fără efectuarea unor calcule lungi și complicate. În primul rând observăm că, *în canalul de conducție format la interfață, energiile asociate mișcării electronilor (în lungul axei z) sunt cuantificate.* Ele aparțin sub-benzilor energetice E_0, E_1, \dots (E_i reprezintă valorile minime în fiecare sub-bandă. Aceste valori se obțin

pentru $k_{x,y}=0$). Mișcarea electronilor este în continuare liberă (atât timp cât neglijăm alte interacții) în planul interfeței (alcătuit din direcțiile x și y). Datorită valorii mari a discontinuității benzilor de conducție la interfață, probabilitatea transferului electronilor din groapa de potențial în stratul din AlGaAs este extrem de mică. Deosebit de interesantă (și utilă) este distribuția spațială a electronilor confinați la interfață. **Valoarea mare a discontinuității benzilor de conducție conduce la o atenuare extrem de rapidă a funcțiilor de undă asociate mișcării în lungul axei z .** Ea are loc, practic complet, pe distanțe de câteva constante de rețea (calculule self-consistente pe care le vom prezenta arată că această distanță este de ordinul 30-40Å). O fracțiune din numărul total de electroni confinați la interfață se mișcă, datorită penetrației funcției de undă, în regiunea donozilor ionizați. Putem evalua această fracțiune destul de ușor (cel puțin principal). Să notăm n_s concentrația superficială totală a electronilor confinați la interfață, n_i concentrația superficială a electronilor din sub-banda E_i și fie $\Phi_i(z)$ funcțiile de undă asociate cu mișcarea de-a lungul axei z . Ocuparea cu electroni a nivelurilor E_i se poate caracteriza prin fracțiile subunitare n_i/n_s ($i=0,1, 2, 3, \dots$) (numite și **grad de ocupare**) care satisfac condiția evidentă $\sum_i n_i/n_s=1$. Cu aceste precizări și notații, fracțiunea η care se mișcă în regiunea donozilor ionizați este:

$$\eta = \frac{n_0}{n_s} \int_{-L}^0 \Phi_0^2 dz + \frac{n_1}{n_s} \int_{-L}^0 \Phi_1^2 dz + \dots \quad (IV.5)$$

Dacă nu este prezent un câmp magnetic exterior funcțiile de undă de-a lungul axei z pot fi alese reale, iar L este o distanță de ordinul lungimii pe care atenuarea funcției de undă este practic completă. *Pentru a evita micșorarea mobilității, datorită efectului de penetrație în regiunea donozilor ionizați, stratul din AlGaAs nu trebuie dopat până la interfață.* O porțiune de câteva zeci de angströmi trebuie să aibă caracter intrinsec. Stratul intrinsec din AlGaAs, adiacent gropii cuantice de potențial, decuplează aproape complet electronii (confinați în groapa de potențial generată în GaAs) de donozii ionizați aflați în stratul dopat din AlGaAs. Acest strat intrinsec este cunoscut sub numele de **decuplor coulombian** sau, mai simplu, **spacer**. Precizăm că trebuie realizat un compromis între reducerea cuplajului coulombian (amplificarea suplimentară a mobilității), măbind grosimea spacerului și scăderea simultană a concentrației 2DEG (micșorarea densității de curent în planul interfeței) provocată de această opțiune.

O primă concluzie se impune:

- *Prin procedee tehnologice care permit obținerea unor interfețe lipsite de defecte majore, purtătorii de sarcină pot fi confinați lângă interfața structurii și au mobilități ridicate în planul interfeței. Sistemul electronic (sau cel al golurilor) capătă astfel caracterul unui gaz bidimensional (Two Dimensional Electron (Hole) Gas, 2DEG respectiv 2DHG).*

IV.1.4 Dinamica purtătorilor în zona Brillouin.

Insistăm încă de la început asupra următorului aspect: datorită potențialului $V(z)$, neperiodic, care modulează (lângă interfața structurii) de-a lungul axei z potențialul periodic al rețelei cristaline, în vecinătatea interfeței nu se poate vorbi despre zone Brillouin, în accepțiunea uzuală. Cu toate acestea, dacă potențialul $V(z)$ are variație lentă la scara constantei de rețea, în multe cazuri putem păstra (cu precauțiile de rigoare) terminologia obișnuită. Variația lentă la scara constantei de rețea a potențialului $V(z)$ înseamnă, din punct de vedere matematic, că transformata sa Fourier are valori foarte mici, cu excepția cazurilor în care argumentele transformatei Fourier devin mult mai mici decât lărgimea zonei Brillouin (amintiți-vă discuția din capitolul anterior). Dacă aproximația variației lente este corectă, se pot scrie ecuații cuantice de evoluție care sunt asemănătoare celor din teoria masei efective, ca în cazul impurităților puțin adânci [57KOH].

Fie z_i punctele de întoarcere ale mișcării clasice pentru direcția z . Dacă ne situăm exact în z_i , energia cinetică de mișcare în lungul lui z se anulează, dar electronul se poate deplasa liber în planul x - y . Vom încerca să corelăm poziția spațială a electronilor 2DEG cu distribuția vectorilor de undă în prima zonă Brillouin. În cele ce urmează, vom folosi ca referință pentru indicarea valorilor E_i , nivelul benzii de conducție în GaAs, la interfață. Dacă electronul este aproape de interfață ($z \ll z_0$), valorile posibile locale ale vectorului de undă pe direcția cristalină Δ sunt cuantificate și cuprind întreg spectrul posibil (k_{z0}, k_{z1}, \dots). Orice vector k , ce descrie o stare posibilă în zona Brillouin, are vârful conținut în planele ce intersectează ortogonal direcția Δ , în punctele k_{z0}, k_{z1} . *Pe măsură ce energia nivelului crește, diferența dintre două valori consecutive permise pentru k_z se micșorează și densitatea stărilor energetice ale electronului capătă caracter tridimensional.* Datorită simetriei cristalului cubic, în punctele X și L ale zonei Brillouin se găsesc extreme ale energiei, anume "văile" X și L. *Când planele paralele cu interfața se apropie de fețele zonei Brillouin, în cazul energiilor mari devine posibil transferul din "valea" Γ în văile X și L.* Înainte de a discuta mai amănunțit în ce condiții acest transfer devine efectiv posibil, vă atragem atenția că valorile permise k_{zi} depind de poziția centroidului pachetului de unde. *Valea Γ , bidimensională în cazul electronilor apropiați de interfață, se transformă într-o vale Γ tridimensională la distanțe mari de interfață.* Condiția esențială ca electronul să tranziționeze în una dintre văile satelit (X sau L) este aceea ca valea Γ să coexiste cu acestea în regiunea spațială în care se găsește electronul. Valoarea maximă V_{\max} , a barierei energetice dezvoltate ca urmare a difuziei electronilor, conduce la o limită superioară a spectrului discret, inferioară

minimului energetic al văii X. În aceste condiții, un transfer din valea Γ bidimensională în valea X devine posibil doar dacă intervin mecanisme de împrăștiere. *Dacă interfața este în echilibru termodinamic, probabilitatea proceselor de împrăștiere în care sunt implicate variații mari ale vectorului de undă și ale energiei este foarte mică.* De fapt, chiar în cazul în care structura nu este în echilibru termodinamic, probabilitatea unui transfer important din valea Γ în văile L și X rămâne mică (dar nu totdeauna neglijabilă). Între minimul energetic al văii X și cel al văii Γ există o diferență energetică de aproximativ 0.4 eV. *La temperaturi obișnuite (300 °K), nivelurile energetice cu pondere efectivă în transferul electronilor între văi sunt cele cu energie ridicată.* Electronii care participă la asemenea procese au deci un grad scăzut de confinare și vor avea tendința să difuzeze fie în volumul stratului din GaAs, fie în stratul adiacent din AlGaAs. *Valorile cele mai mari ale energiilor E_i , pentru care se mai poate considera că electronii formează un sistem bidimensional, sunt de ordinul 0.25 eV (sau ceva mai mici).* Până la atingerea valorii critice, de aproximativ 0.4 eV, necesară transferului în valea L sau X, rămâne o barieră energetică importantă. La temperatura camerei electronii termalizați au energii de ordinul 0.03 eV și probabilitatea escaladării barierei pe cale termică este foarte mică. Ne așteptăm deci la un transfer neglijabil, dacă valorile câmpului electric paralel cu interfața sunt mici. Prin câmpuri electrice mici, înțelegem câmpurile în care energia căpătată de electronul accelerat în câmp nu modifică în mod considerabil funcția de distribuție la echilibru termodinamic. Pentru câmpuri peste 10^5 V/m distribuția de echilibru termodinamic este puternic afectată și o teorie realistă a funcționării dispozitivelor necesită luarea în considerare a proceselor de transfer pe care le-am discutat.

IV.1.5 Densitatea de stări energetice a sistemelor bidimensionale

În cazul sistemelor fermionice bidimensionale, o celulă a spațiului fazelor, de volum h^2 conține două stări energetice (incluzând spinul). Elementul de volum $d\Gamma$ al spațiului cvadridimensional al fazelor poate fi exprimat folosind spațiul bidimensional al pozițiilor și cel al vectorilor de undă, după cum urmează:

$$d\Gamma = h^2 dk_x dk_y dS \quad (\text{IV.6})$$

(reamintim că mișcarea este cuantificată în lungul axei z). În apropierea minimului energetic al benzii de conducție dependența energiei de vectorul de undă \mathbf{k} este bine descrisă de relația:

$$E(\mathbf{k}) = E_i + E_{x-y} = E_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{x-y}^2 = E_i + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (\text{IV.7})$$

unde E_i este energia în sub-banda "i", E_{x-y} este energia în planul interfeței structurii iar m^* se consideră constantă.

Există multe efecte interesante care nu pot fi descrise rezonabil de o aproximație simplă, ca cea reprezentată prin ecuația (IV.7). În asemenea cazuri este necesar să luăm în considerare efectul neparabolicității asupra spectrului energetic. Într-o regiune restrânsă în jurul punctului $\mathbf{k}=0$, dependența $E(\mathbf{k})$ a energiei de vectorul de undă se poate obține cu ajutorul teoriei perturbației $\mathbf{k}\mathbf{p}$, în aproximația de ordinul al doilea [91ALT] (revedeți neapărat capitolul al III-lea):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm}^\alpha p_{mn}^\beta + p_{nm}^\beta p_{mn}^\alpha}{E_n(0) - E_m(0)} \right) k_\alpha k_\beta \quad (\text{IV.8})$$

unde $\alpha, \beta = x, y, z$. În cazul GaAs, extremul Γ al benzii de conducție este nedegenerat (cel al benzii de valență este degenerat), iar legea de dispersie este izotropă. În suma care figurează în partea dreaptă a ecuației (IV.8) aduc contribuție doar termenii diagonali ($\alpha = \beta$) și dependența energiei poate fi scrisă într-o formă simplificată, similară cu (IV.7):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad (\text{IV.9})$$

în care:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{p_{nm}^\alpha p_{mn}^\alpha}{E_n(0) - E_m(0)} \quad (\text{IV.10})$$

este inversul masei efective în banda de conducție n. Pentru energii până la 200 meV, în cazul arseniurii de galiu, expresia (IV.8) poate fi simplificată în continuare [79RAY]:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} \left[1 - c \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*} \right) \frac{1}{E_g} \right] \quad (\text{IV.11})$$

astfel încât dependența masei efective de energie devine mult mai simplă:

$$\frac{1}{m^*(E)} = \frac{1}{m_0^*} \left(1 - 4c \frac{E}{E_g} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.12})$$

unde E_g este lărgimea benzii interzise iar c este un parametru care caracterizează neparabolicitatea benzii energetice. Factorul de neparabolicitate este (în general) foarte greu de calculat. El depinde de mărimea benzii interzise și de mărimea despiciării spin-orbită. În GaAs factorul c, de neparabolicitate, are valori apropiate de 0.81.

Densitatea superficială a stărilor energetice poate fi exprimată cu ajutorul relației (IV.6):

$$\frac{\text{numarul de stari principial posibile}}{\text{unitatea de suprafata}} = 2 \frac{d\Gamma}{h^2 dS} \quad (\text{IV.13})$$

sau cu ajutorul cu **densității bidimensionale** $D(E)$ a stărilor (numărul de stări principial posibile/unitate de suprafață x unitate de interval energetic):

$$D(E)dE = 2 \frac{d\Gamma}{h^2 dS} \quad (\text{IV.14})$$

Prin diferențierea relației (IV.7) se obține:

$$dE = \frac{\hbar^2}{m^*} k_{x-y} dk_{x-y} \quad (\text{IV.15})$$

În spațiul vectorilor \mathbf{k} , expresia $2\pi k_{x-y} dk_{x-y}$ este exact aria unei coroane circulare de rază k_{x-y} , centrată și perpendiculară pe axa z . Numărul stărilor descris de relația (IV.14) este, prin urmare, suma (calculată pentru coroana circulară de mai sus) numărului de stări (IV.13):

$$dN = \frac{k_{x-y} dk_{x-y}}{\pi} \quad (\text{IV.16})$$

Folosind relația (IV.15) obținem pentru $D(E)$ expresia simplă:

$$D(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (\text{IV.17})$$

În limita aproximațiilor folosite s-a obținut rezultatul remarcabil că **densitatea de stări energetice pentru sistemele bidimensionale nu depinde de energie**. Înlocuind valoarea masei efective a electronilor (în punctul Γ al zonei Brillouin) în expresia (IV.17) a densității de stări, obținem pentru GaAs ($m^* \cong 0.067m_0$) valoarea:

$$D \cong 3.24 \times 10^{17} / \text{m}^2 \text{eV} \quad (\text{IV.18})$$

Această valoare se află într-o concordanță foarte bună cu cea obținută de Delagebeaudeuf și Linh [82DEL] prin studiul efectului Shubnikov-DeHaas și măsurători de rezonanță ciclotronică în tranzistori Metal/(n)AlGaAs/GaAs.

IV.1.6 Densități de sarcină asociate nivelurilor energetice

În cele ce urmează, vom calcula concentrațiile superficiale n_i ale electronilor 2DEG care ocupă sub-benzile energetice ale gropii de potențial. Variația dn_i a numărului de electroni 2DEG pe nivelul energetic "i", datorată variației infinitezimale dE_F a poziției nivelului Fermi față de sub-banda considerată, poate fi scrisă astfel:

$$dn_i = Df(E_i)dE_F \quad (\text{IV.19})$$

$f(E)$ fiind funcția de distribuție Fermi-Dirac. Folosind expresia explicită a funcției de distribuție, putem exprima variația concentrației superficiale dn_i într-o formă foarte simplă:

$$dn_i = Dk_B T d \left\{ \ln \left[\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right] \right\} \quad (IV.20)$$

Prin urmare, concentrațiile superficiale n_i ale fiecărei sub-benzi sunt:

$$n_i = Dk_B T \ln \left[\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (IV.21)$$

Concentrația superficială totală n_s este suma concentrațiilor fiecărei sub-benzi, adică:

$$n_s = Dk_B T \ln \prod_{i=0} \left[\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (IV.22)$$

Faptul că, pentru sisteme bidimensionale, densitatea stărilor energetice este independentă de energie, simplifică în mod considerabil calculele. Semnificația fizică a acestui rezultat este, așa cum am arătat, dependența pătratică de vectorul de undă (a energiei) în vecinătatea extremului. Putem scrie relația (IV.21) astfel încât să evidențiem fracțiile de ocupare η_i ale nivelurilor E_i :

$$\eta_i = D \frac{k_B T}{n_s} \ln \left[\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (IV.23)$$

Ecuatia (IV.23) poate fi folosită (ca o relație test) pentru verificarea corectitudinii calculelor numerice (sau precizia lor) făcute în timpul rezolvării numerice, self-consistente, a sistemului format din ecuațiile Schrödinger și Poisson.

Astfel, atunci când nivelul energetic E_i coincide cu nivelul Fermi, $E_F = E_i$ și, prin urmare, potrivit cu (IV.23), are loc egalitatea:

$$\eta_i = D \frac{k_B T}{n_s} \ln 2 \quad (IV.24)$$

Este important să remarcăm că pentru o anumită concentrație 2DEG și la temperatură constantă, (IV.24) definește un invariant, specific sistemului bidimensional. Întrucât valoarea acestui invariant este pozitivă și mai mică decât unitatea, coincidența între poziția nivelului Fermi și cea a nivelului energetic este posibilă numai dacă gazul electronic are concentrația superficială mai mare decât valoarea critică

$$n_{s,critic} = Dk_B T \ln 2 \quad (IV.25)$$

La temperatura de 300 °K $n_{s,critic} \cong 5.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, deci intersecția poate avea loc numai doar la valori ridicate ale concentrației 2DEG. Concentrații de acest ordin de mărime (și mai mari) sunt foarte frecvente în tranzistorii HEMT care vehiculează curenți importanți. *La temperatura camerei, o fracție importantă*

(peste 60%) din electronii 2DEG ocupă prima sub-bandă energetică. Primul nivel energetic interceptat de nivelul Fermi, pe măsura creșterii concentrației superficiale, va fi nivelul energetic al sub-benzii fundamentale. De asemenea observăm că valoarea invariantului (IV.24) scade liniar cu temperatura. Deducem că la temperaturi mici și concentrații relativ ridicate nivelul Fermi nu poate intersecta nivelul fundamental.

IV.1.7 Spectrul energetic al electronilor 2DEG

Analiza ecuației (IV.21) arată că problema esențială, aceea a determinării concentrațiilor superficiale corespunzătoare diferitelor sub-benzi, nu a fost rezolvată complet. Am obținut doar o relație care evidențiază dependența concentrațiilor n_j de temperatură și de poziția energetică a sub-benzilor față de nivelul Fermi. Determinarea poziției nivelului Fermi reprezintă o problemă crucială pentru că, fără rezolvarea ei, diagrama benzilor de energie la interfață rămâne nedeterminată. Ne putem da seama, în mod intuitiv, de importanța deosebită a acestei probleme dacă ne reamintim că eficacitatea controlului concentrației electronilor 2DEG, prin variația potențialului aplicat pe poarta Schottky a unui tranzistor HEMT, depinde drastic de distanța spațială efectivă între poartă și poziția medie a "planului" 2DEG. În paragraful IV.1.4 am discutat un alt aspect important, anume posibilitatea apariției transferului către văile satelit L și X, mediat de câmpurile electrice intense și de împrăștierea pe fononi. Acest fenomen influențează mobilitatea electronilor 2DEG și deci performanțele globale ale dispozitivului. Pentru calculul ratei acestor tranziții este necesară evaluarea elementelor de matrice ale potențialului de perturbație între starea finală și cea inițială, calcul care nu poate fi efectuat dacă funcțiile de undă asociate stărilor sunt necunoscute. Determinarea funcțiilor de undă reclamă cunoașterea dependenței de z a energiei potențiale $V(z)$, iar precizarea acestei dependențe nu se poate face decât dacă se cunoaște distribuția sarcinii la interfață, adică, până la urmă a funcțiilor de undă proprii.

În concluzie:

Problema determinării diagramei benzilor de energie la interfața AlGaAs/GaAs este complicată și impune rezolvarea self-consistentă a sistemului format de ecuațiile lui Schrödinger și Poisson, cu includerea tuturor interacțiilor relevante (electrostatică, de schimb-corelație, etc...).

Pentru început vom determina dependența de distanța z față de interfață a potențialului $V(z)$. Deși tehnica MBE permite obținerea unor straturi din GaAs ultra-pure, ele conțin totuși o concentrație scăzută de impurități care produc un dopaj de fond (*background doping*). Pentru ca influența acestuia să fie neglijabilă au fost depuse eforturi tehnologice impresionante. Este ușor de

înțeles că prezența impurităților de fond produce micșorarea mobilității. Concentrația volumică a acestora trebuie să fie atât de mică încât efectul decuplajului coulombian să domine net. Uzual, această cerință implică dopaje de fond caracterizate de concentrații care nu depășesc $10^{14}/\text{cm}^3$. Fie N_{A1} , N_{D1} concentrația impurităților de fond acceptoare, respectiv donoare. Concentrația netă a impurităților acceptoare va fi $n_A = N_{A1} - N_{D1}$. Pe măsură ce electronii trec din AlGaAs în GaAs, golurile sunt compensate. La concentrații suficient de mari ale electronilor, în regiunea interfeței apare un strat de inversie. Departe de interfață sarcina netă se amortizează practic exponențial. Transferul electronilor peste interfață continuă până când nivelul Fermi are aceeași poziție de fiecare parte a interfeței.

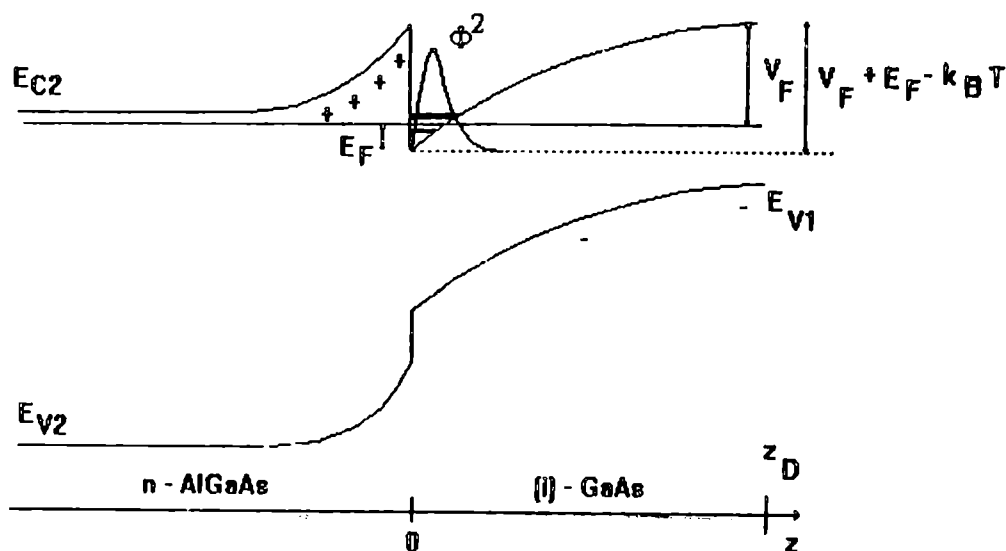


Fig.IV.3 Diagrama benzilor de energie ale heterojuncțiunii AlGaAs/GaAs la echilibru termodinamic, în prezența stratului de inversie. Electronii sunt confinați lângă interfață și formează canalul de conducție 2DEG. Distanța medie z_{av} la care este poziționat planul 2DEG la interfață satisface condiția $z_{av} \ll z_D$, z_D fiind lărgimea zonei de câmp electric în GaAs. Notățiile sunt cele utilizate în text.

• Contribuția dopajului de fond

Contribuția dopajului de fond la energia potențială $V(z)$, se poate obține rezolvând ecuația lui Poisson:

$$\frac{d^2 \varphi_D}{dz^2} = \frac{en_A}{\epsilon_1} \quad (\text{IV.26})$$

cu condițiile la limită:

$$\left(\frac{d\varphi_D}{dz} \right)_{z_D} = 0 \quad ; \quad \varphi_D(0) + \varphi_{2\text{DEG}, \text{max}} = 0 \quad (\text{IV.27})$$

Soluția ecuației (IV.26), care satisface condițiile la limită (IV.27), este:

$$\varphi_D(z) = \frac{en_\Lambda}{2\epsilon_1} (z - 2z_D)z - \frac{en_s}{\epsilon_1} z_{av} \quad (IV.28)$$

unde z_{av} este distanța medie a electronilor 2D față de interfața structurii iar z_D este lărgimea regiunii de câmp electric în GaAs. Pentru a determina z_D se utilizează condiția la limită (Fig.IV.3):

$$\varphi_D(z_D) = -\frac{E_F(n_s) + V_F - k_B T}{e} \quad (IV.29)$$

Ecuțiile (IV.28) și (IV.29) conduc la următoarea expresie pentru z_D :

$$z_D = \left[\frac{2\epsilon_1}{en_\Lambda} \left(\frac{E_F + V_F - k_B T}{e} - \frac{en_s}{\epsilon_1} z_{av} \right) \right]^{1/2} \quad (IV.30)$$

În (IV.30) au rămas nedeterminate poziția E_F a nivelului Fermi, măsurată față de minimul benzii de conducție în GaAs la interfață și distanța medie z_{av} . Le vom determina într-o secțiune ulterioară.

• Contribuția 2DEG

Densitatea volumică de sarcină $\rho(z)$ a electronilor 2DEG, în absența mixajului datorat împrăștiilor, este:

$$\rho(z) = -en_s \sum_i \eta_i \Phi_i^2(z) \quad (IV.31)$$

unde $\Phi_i(z)$ sunt funcțiile proprii asociate mișcării cuantificate în lungul axei z . Această relație are o semnificație fizică simplă: în fiecare punct, densitatea de sarcină 2DEG este o sumă de contribuții ale sub-benzilor, fiecare dintre ele modulată de densitatea de probabilitate de localizare în punctul respectiv. Ecuația lui Poisson, satisfăcută de potențialul generat de electronii 2D, poate fi scrisă sub forma:

$$\frac{d}{dz} \left(z \frac{d\varphi_{2DEG}}{dz} \right) - \frac{d\varphi_{2DEG}}{dz} = \frac{en_s}{\epsilon_1} \sum_i \eta_i z \Phi_i^2(z) \quad (IV.32)$$

Integrând această ecuație între $z=0$ și $z=\infty$, obținem contribuția V_{2DEG} a gazului electronic bidimensional la înălțimea barierei energetice:

$$V_{2DEG} = \frac{e^2 n_s}{\epsilon_1} \sum_i \eta_i \int_0^\infty z \Phi_i^2(z) dz \quad (IV.33)$$

Pentru a obține această relație am presupus că $z d\varphi_{2DEG}/dz$ se anulează la distanțe mari de interfață. Deoarece funcțiile de undă Φ_i se atenuază rapid în stânga interfeței și se presupun ortonormate (datorită valorii mari a discontinuității benzilor de conducție), expresia:

$$z_{av} = \sum_i \eta_i \int_0^\infty z \Phi_i^2(z) dz \quad (IV.34)$$

reprezintă tocmai distanța medie la care se situează electronii 2DEG de interfață.

• **Calcul numeric self-consistent**

Considerând ambele contribuții la energia potențială $V(z)$ obținem:

$$\frac{d^2V}{dz^2} = -\frac{e^2 n_A}{\epsilon_1} \theta - \frac{e^2 n_s}{\epsilon_1} \sum_i \eta_i \Phi_i^2(z) \quad (IV.35)$$

unde:

$$\theta = \begin{cases} 1 & \text{pentru } 0 \leq z \leq z_D \\ 0 & \text{pentru } z > z_D \end{cases} \quad (IV.36)$$

La interfață, prima derivată a energiei potențiale satisface condiția (obținută prin aplicarea legii lui Gauss):

$$\left(\frac{dV}{dz} \right)_{z=0} = \frac{e^2}{\epsilon_1} (n_s + n_{s,A}) \quad (IV.37)$$

în care:

$$n_{s,A} = z_D n_A \quad (IV.38)$$

este concentrația superficială a impurităților de fond. Ecuația (IV.35) trebuie rezolvată simultan cu ecuația lui Schrödinger pe care o satisfac funcțiile de undă proprii Φ_i ale mișcării cuantificate în lungul axei z :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Phi_i}{dz^2} + [E_i - V(z)]\Phi_i = 0 \quad (IV.39)$$

Masa efectivă m^* care intră în ecuația (IV.39) este masa efectivă pe direcția (100) a cristalului de GaAs. Dacă funcțiile Φ_i sunt ortonormate, funcția de undă care descrie mișcarea electronilor 2D, în lungul axei z , este:

$$\Phi = \sum_i \sqrt{\eta_i} \Phi_i \quad (IV.40)$$

Algoritmul numeric utilizat pentru rezolvarea numerică self-consistentă a sistemului de ecuații Schrödinger-Poisson, împreună cu condițiile la limită (IV.27, IV.29, IV.36, IV.37) conține următoarele etape importante:

- Pentru fiecare concentrație superficială n_s și n_A introducem în ecuația lui Schrödinger un potențial inițial, de încercare (uzual liniar), $V^{(0)}(z)$ și determinăm valorile proprii ale energiei $E_i^{(0)}$ și funcțiile proprii $\Phi_i^{(0)}(z)$, pentru n sub-benzi (uzual trei sau patru).
- Folosind valorile pentru $E_i^{(0)}$ și sistemul format de ecuațiile (IV.23) ($i=1,2,3,\dots,n$) în aproximația $\sum_i \eta_i = 1$, se determină poziția nivelului Fermi $E_F^{(0)}$ și numerele de ocupare $\eta_i^{(0)}$.
- Cu ajutorul funcțiilor de undă $\Phi_i^{(0)}(z)$, al fracțiilor de ocupare $\eta_i^{(0)}$ și al ecuației (IV.34) se determină $z_{av}^{(0)}$.
- Cu $z_{av}^{(0)}$ se calculează lărgimea $z_D^{(0)}$ a regiunii sărăcite și apoi $n_{s,A}^{(0)}$.

- Se utilizează ecuația (IV.37) pentru calculul derivatei energiei potențiale la interfață.
- Se rezolvă numeric ecuația Poisson (IV.35) și se obține dependența $U^{(0)}(z)$.
- Convergența rapidă și stabilitatea numerică sunt asigurate dacă în pasul următor se utilizează o combinație liniară a potențialelor $V^{(0)}(z)$ și $U^{(0)}(z)$, utilizând o fracție de mixaj, subunitară, $s^{(0)}$:

$$V^{(1)}(z) = [1-s^{(0)}]V^{(0)}(z) + s^{(0)}U^{(0)}(z) \quad (IV.41)$$

Fracția de mixaj introduce un efect asemănător reacției din dispozitivele electronice, în care o fracțiune din semnalul de ieșire este întors la intrarea dispozitivului. Această metodă de accelerare a convergenței nu este specifică algoritmului descris mai sus și poate fi folosită într-o mulțime de alte implementări numerice. *Ideea centrală a introducerii fracției de mixaj este următoarea:* dacă în (IV.41) s are valori mici convergența va fi lentă iar dacă s are valori apropiate de 1 rezultatele parțiale (E_F , de exemplu) vor oscila sau vor deveni divergente. Când s are valoarea maximă (critică) pentru care rezultatele nu oscilează, este de presupus că vom obține o convergență rapidă. Este interesant de remarcat că parametrul s joacă pentru acest algoritm același rol cu cel al rezistenței critice în aparatele de măsură. *Parametrul s trebuie să realizeze compromisul optim între tendința comportării monotone și cea a comportării oscilatorii.* În cursul rulării programului se memorează valorile E_F obținute după trei iterații consecutive. Dacă aceste valori oscilează, s este micșorat cu un factor $\xi_1 < 1$; dacă ele au comportare monotonă, s este amplificat cu factorul $\xi_2 > 1$, cu condiția ca s să rămână subunitar. ***Valorile factorilor ξ_1 și ξ_2 sunt constante care nu depind de numărul de iterații.*** O metodă similară, cu $\xi_1 = 0.8$ și $\xi_2 = 1.125$, a fost folosită de Appelbaum și Baraff [71APP] pentru a studia efectul câmpului magnetic asupra spectrului energetic al electronilor superficiali.

- Se repetă etapele expuse până când $|E_F^{(n)} - E_F^{(n-1)}| < \gamma$, unde γ este o valoare prestabilită (uzual 10^{-4} eV). În cele mai multe cazuri, această condiție este satisfăcută după 10-12 iterații (în multe cazuri 5-6 iterații sunt suficiente).

Pentru efectuarea calculelor numerice și prelucrarea grafică automată a rezultatelor intermediare se poate scrie un program în limbaj PASCAL. Rularea acestui program pe un calculator PC 486/40 MHz durează aproximativ 90 secunde pentru obținerea rezultatelor corespunzătoare unei concentrații date. În aproximativ 20 minute se obțin informații complete pentru 10 concentrații superficiale 2DEG. Fig.IV.4 vă prezintă o variație posibilă a coeficientului s , de mixaj, în timpul derulării etapelor de calcul.

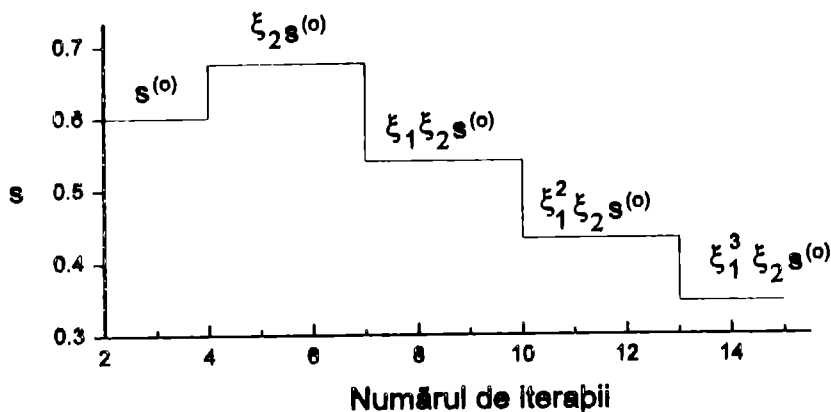


Fig. IV.4 Variația tipică a coeficientului s de mixaj cu numărul de iterații. În acest caz valoarea inițială a factorului de amestec a fost 0.6 (aceasta fiind o valoare tipică de start). Programul a modificat această valoare inițială după fiecare trei iterații pentru a obține o convergență rapidă. Pentru exemplul de mai sus, din comportarea parametrului s deducem că soluțiile intermediare au avut caracter preponderent oscilatoriu. Nu trebuie să tragem concluzia că pentru fiecare set de parametri inițiali, evoluția factorului de amestec este cea de mai sus.

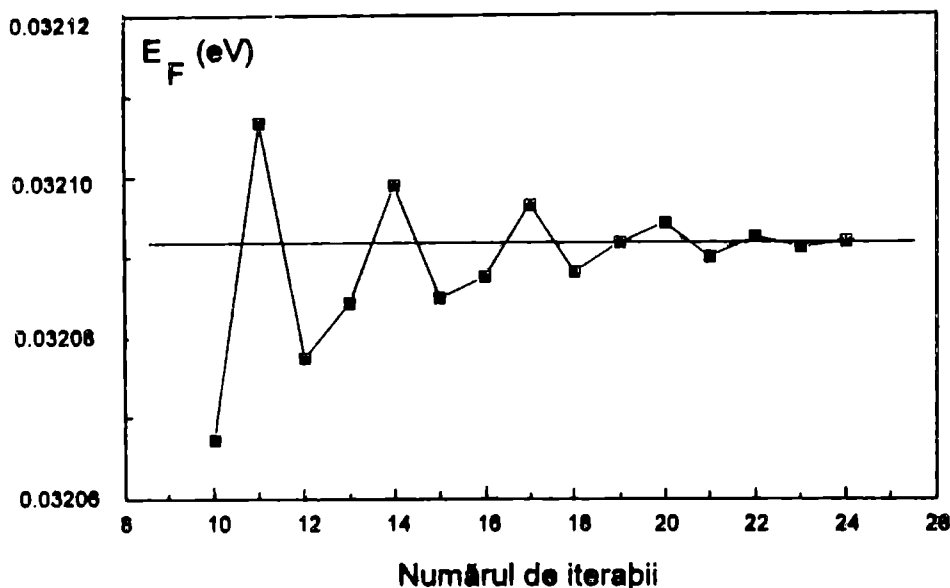


Fig. IV.5 Detaliu al evoluției poziției nivelului Fermi E_F către valoarea selfconsistentă. Se observă că, pe măsură ce numărul iterațiilor crește, amplitudinea oscilațiilor "în jurul soluției" se amortizează rapid. În realitate, programul folosește un truc, bazat pe această observație, pentru accelerarea suplimentară a convergenței (el determină care este amplitudinea medie de oscilație și introduce o corecție statistică a valorii obținute după 10-12 iterații).

În Fig. IV.5 este prezentat un detaliu al evoluției nivelului Fermi către valoarea selfconsistentă. Amplitudinea oscilațiilor în jurul soluției se amortizează rapid.

În Fig. IV.6 este prezentată influența pasului spațial de discretizare, utilizat în scrierea ecuațiilor cu diferențe finite, asupra soluției pentru densitatea de probabilitate de localizare. Influența valorii pasului de discretizare asupra rezultatelor finale reprezintă un aspect critic pentru orice abordare numerică a unei probleme. În multe cazuri, deplasările introduse de o alegere nepotrivită a acestuia pot influența în mod decisiv rezultatele. Din punct de

vedere fizic, ne așteptăm ca rezultatele să fie corecte, dacă pasul spațial este ales astfel încât să rămână mult mai mic decât lungimea locală de undă, pe tot intervalul spațial de integrare numerică.

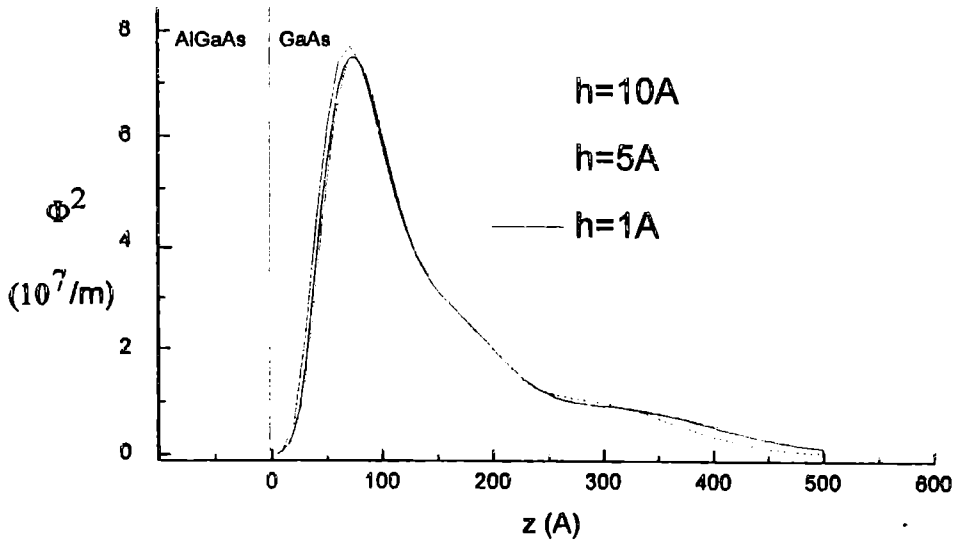


Fig.IV.6 Influența pasului spațial h , folosit în ecuațiile cu diferențe finite, asupra soluției pentru densitatea de probabilitate de localizare 2DEG. Este important să observăm că între soluția obținută cu $h=1\text{\AA}$ și cea corespunzătoare lui $h=10\text{\AA}$ nu există diferențe semnificative.

Rezultatele prezentate în Fig.IV.6 evidențiază că între rezultatele calculului selfconsistent efectuat un pas spațial $h=1\text{\AA}$ și cele corespunzătoare unui pas $h=10\text{\AA}$, nu există diferențe semnificative. Aceleași rezultate se obțin și în cazul poziției sub-benzilor energetice. Pe măsură ce pasul de discretizare spațial este mărit treptat, de la 1\AA la 7\AA , distanța medie z_{av} se micșorează cu ceva mai mult de 0.5\AA , diferență care, în mod evident, nu are nici o semnificație. Trebuie însă precizat că energiile proprii trebuie calculate foarte exact (mergând până la 12 cifre semnificative sau chiar mai mult). Deși o precizie atât de mare nu este justificată din punct de vedere fizic, ea este impusă de faptul că forma funcțiilor de undă (în special comportarea asimptotică) este drastic alterată de valoarea energiei. După efectuarea calculului se reține doar valoarea cu relevanță experimentală.

Observație: *Calculul numeric al poziției nivelurilor, efectuat prin metoda TWA (Triangular Well Approximation), Fig.IV.7, evidențiază că energia E_i a nivelurilor energetice crește liniar cu puterea $2/3$ a concentrației superficiale a electronilor 2DEG (și deci cu puterea $2/3$ a câmpului electric în GaAs).*

Această dependență se poate justifica (parțial) și pe cale analitică, calculând, în limita unor aproximații (aparent severe), energiile proprii corespunzătoare

mişcării confinate într-o regiune de câmp constant (nenul). Acest calcul va fi efectuat în secțiunea dedicată metodelor analitice.

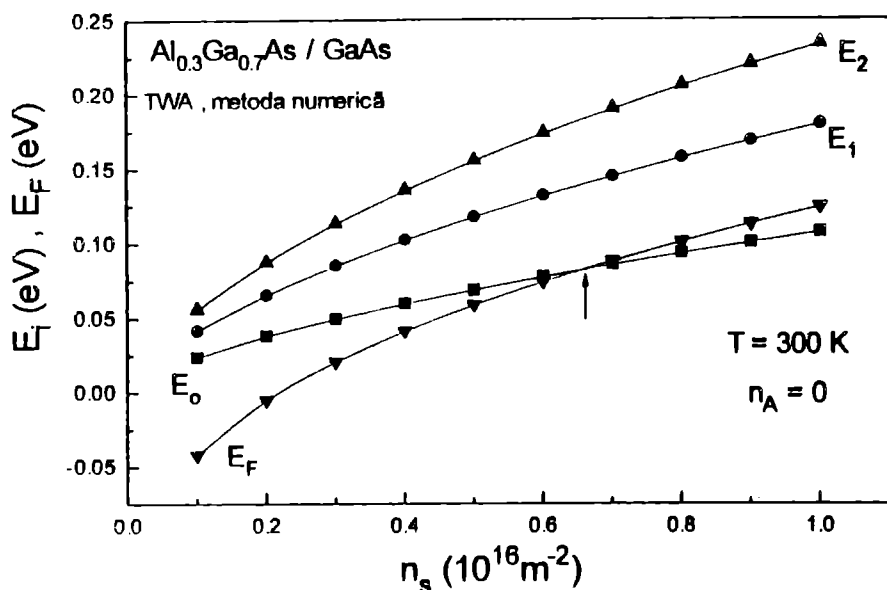


Fig.IV.7 Dependența poziției nivelurilor energetice ($k_x=k_y=0$) de concentrația superficială 2DEG, în aproximația gropii triunghiulare de potențial (TWA). Pasul spațial folosit în discretizarea numerică este $h=1\text{\AA}$.

Energiile proprii pot fi obținute pe o cale simplă, utilizând relația:

$$E_i = \gamma_i n_s^{2/3} \quad (\text{IV.42})$$

cu $i=0, 1, 2$ și $\gamma_0=2.29 \cdot 10^{-12} \text{ eV m}^{4/3}$, $\gamma_1=3.79 \cdot 10^{-12} \text{ eV m}^{4/3}$, $\gamma_2=4.86 \cdot 10^{-12} \text{ eV m}^{4/3}$.

Coeficienții au fost calculați numeric cu ecuația (IV.42) și rezultatele din Fig.IV.7. Rezultatele aproximației TWA ne permit să facem două observații, importante pentru modelările analitice ale interfețelor AlGaAs/GaAs:

- A) Distanța medie z_{av} , la care se poziționează electronii 2DEG de interfață, crește *aproximativ liniar* cu puterea $-1/3$ a concentrației superficiale, adică:

$$z_{av} = \beta_{TWA} n_s^{-1/3} - z_{0,TWA} \quad (\text{IV.43})$$

Valorile pentru β_{TWA} și pentru $z_{0,TWA}$ au fost determinate prin fitare numerică și au valorile:

$$\beta_{TWA}=2.02 \cdot 10^{-3} \text{ m}^{1/3}, \quad z_{0,TWA}=4.091 \cdot 10^{-9} \text{ m}.$$

Deși relații de forma (IV.43) sunt întâlnite curent în literatura de specialitate, putem arăta că pentru tot domeniul concentrațiilor importante în aplicații ($0.2 \cdot 10^{16} / \text{m}^2 \leq n_s \leq 10^{16} / \text{m}^2$) o dependență de tipul:

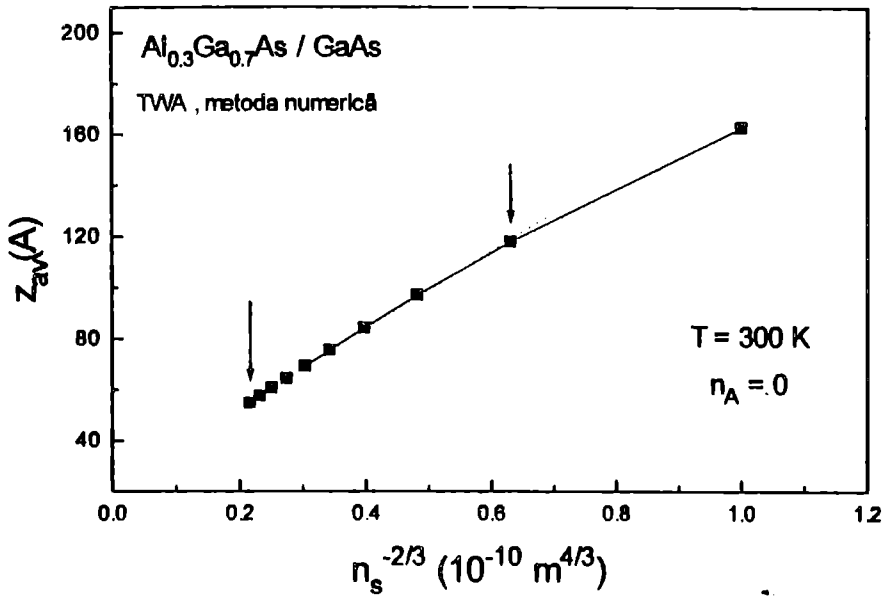


Fig.IV.8 Dependența distanței medii față de interfață (metoda TWA), calculată cu expresia (IV.34), de puterea $-2/3$ a concentrației superficiale 2DEG ($h=1A$, $n_A=0$). Această dependență este *liniară*, în domeniul indicat prin săgeți ($0.2 \cdot 10^{16}/m^2 \leq n_s \leq 10^{16}/m^2$).

$$z_{av} = \beta_{TWA} n_s^{-2/3} - z_{0,TWA} \quad (IV.43a)$$

cu $\beta_{TWA}=153.12m^{-1/3}$, $z_{0,TWA}=2.26 \cdot 10^{-9}m$, descrie cu mai mare acuratețe dependența distanței medii de concentrația superficială 2D.

• B) Poziția nivelului Fermi este o funcție *liniară* de puterea $1/3$ a concentrației:

$$E_F \text{ (eV)} = 1.438 \cdot 10^{-6} n_s^{1/3} - 0.186 \quad (IV.43b)$$

În Fig.IV.9 sunt prezentate funcțiile de undă ale primelor trei sub-benzi energetice, calculate selfconsistent, pentru o concentrație superficială 2DEG fixată la $n_s=0.5 \cdot 10^{16}/m^2$. Aceasta este o valoare tipică pentru structurile de tip tranzistor HEMT (sau MODFET), în regim mediu de polarizare a porții. Concentrația dopajului de fond a fost neglijată. *Electronii 2D, situați în sub-banda energetică fundamentală, sunt puternic confinați lângă interfață, funcția de undă amortizându-se aproape complet pe distanțe de ordinul 250Å.* În același timp, pentru concentrația utilizată, gradul de ocupare cu electroni al acestei sub-benzi se situează în jurul valorii 0.65 (Fig.IV.18), astfel încât forma distribuției spațiale a densității de probabilitate asociată sub-benzii fundamentale stabilește practic distribuția spațială a electronilor la interfața structurii. *Funcțiile de undă ale primelor două niveluri excitate au o extensie*

spațială considerabil mai mare, aproximativ 600Å pentru primul nivel excitat, respectiv 900Å pentru al doilea, datorită gradului de localizare mai redus al electronilor cu energie ridicată. Această comportare a funcțiilor de undă proprii permite extragerea unor concluzii importante, referitoare la dependența de tensiunea sursă-poartă a capacității de poartă a structurii

Densitatea de probabilitate de localizare, corespunzătoare stării fundamentale, are un singur maxim, astfel încât electronii 2D sunt distribuiți pe o singură "pătură" plană.

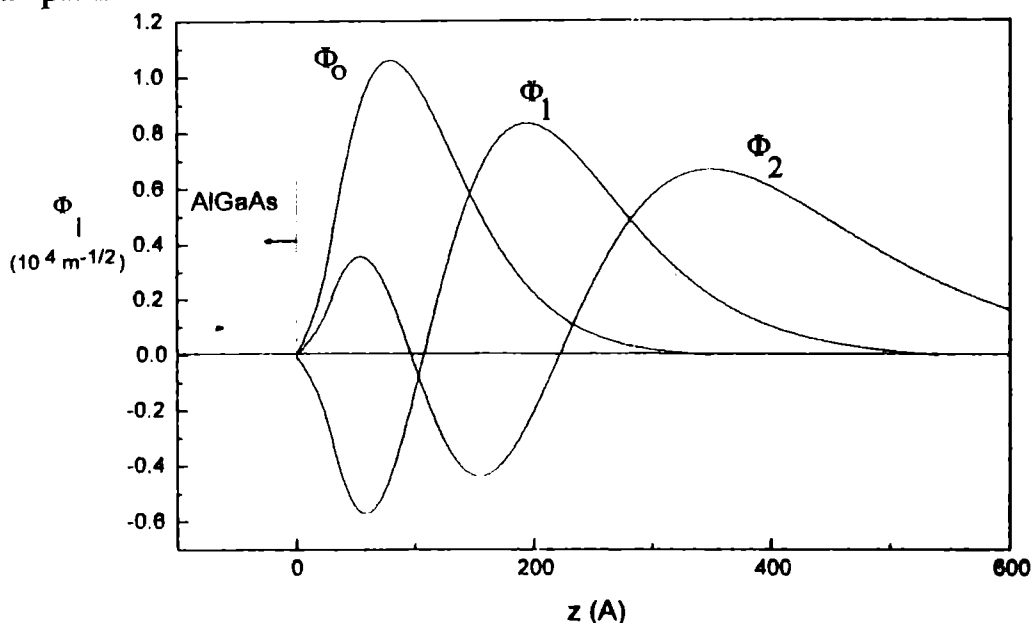


Fig.IV.9 Primele trei funcții de undă proprii ($i=0,1,2$), calculate selfconsistent, asociate mișcării cuantificate în lungul axei z , la interfața heterojuncțiunii $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ ($n_s=0.5 \times 10^{16} \text{m}^{-2}$, $n_A=0$, $T=300\text{K}$, $h=1\text{Å}$). Linia punctată indică poziția interfeței.

Împreună cu donorii ionizați, necompensați, aflați în stratul adiacent din AlGaAs, ei vor forma un condensator plan-paralel, distanța dintre armăturile acestui condensator fiind tocmai valoarea medie a lui z , calculată folosind Φ_0 . Întrucât această distanță depinde de concentrația electronilor 2D, sub-benzii fundamentale i se poate asocia, în regim tranzitoriu, o capacitate diferențială, dependentă de tensiunea sursă-poartă. Considerente asemănătoare arată că fiecărei sub-benzi îi corespunde o capacitate diferențială, dependentă de tensiunea sursă-poartă. Dinamica acestei dependențe este influențată de concentrația electronilor 2D. Odată cu creșterea concentrației superficiale, câmpul electric în regiunea interfeței crește, determinând reducerea distanței medii. Capacitatea de poartă a structurii crește, reducând impedanța circuitului de intrare.

Profilul benzii de conducție în GaAs este prezentat în Fig.IV.10, pentru trei valori ale concentrației superficiale, 0.3, 0.5 și $0.7 \cdot 10^{16}/\text{m}^2$. Pe măsură ce concentrația 2D crește, câmpul electric la interfața structurii se mărește,

determinând o groapă de potențial, cu adâncime din ce în ce mai mare. Precizăm că rezultatele prezentate în Fig.IV.10 includ numai contribuția electronilor 2D. Valoarea maximă a adâncimii gropii de potențial variază între ≈ 0.07 eV pentru $n_s=3 \cdot 10^{15}/m^2$ și ≈ 0.1 eV pentru $n_s=7 \cdot 10^{15}/m^2$. Aceste valori sunt atinse de îndată ce funcția de undă se atenuază practic complet, adică la aproximativ 300Å de interfață.

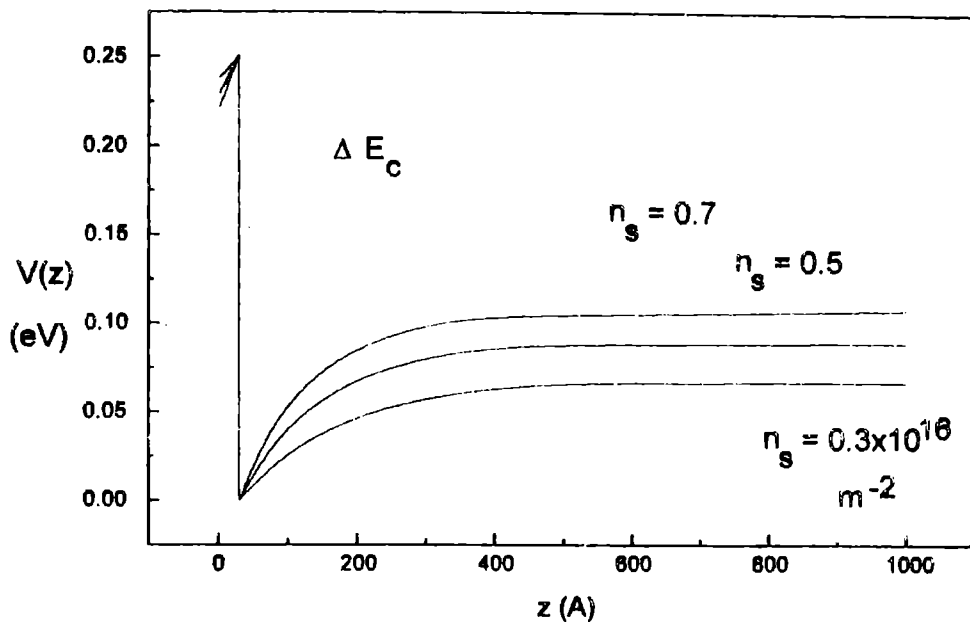


Fig.IV.10 Profilul benzii de conducție (calcul selfconsistent, cu parametrii din Fig.IV.9) pentru $n_s=0.3, 0.5, 0.7 \times 10^{16} m^{-2}$.

Precizăm că originea a fost translatată în zona stratului din AlGaAs cu aproximativ 30Å.

Dependența poziției nivelului Fermi de concentrația superficială

Unul dintre rezultatele foarte importante obținute în urma calculelor selfconsistente este acela că poziția nivelului Fermi depinde liniar de puterea $1/3$ a concentrației 2D, pe tot domeniul concentrațiilor de interes practic (Fig.IV.11):

$$E_F(\text{eV}) = K n_s^{1/3} - L \quad (\text{IV.44})$$

în care K și L sunt constante cu valorile $K=1.078 \cdot 10^{-6} \text{ eV} m^{2/3}$, $L=0.161 \text{ eV}$. Semnificația fizică a constantei L este foarte simplă: - L reprezintă poziția nivelului Fermi pentru $n_s=0$, adică în absența electronilor 2D. Aceasta este tocmai condiția de blocare a tranzistorilor HEMT de tipul N-ON (cu canal inițial). Relația analitică (IV.44) permite un calcul comod al tensiunii de blocare, pentru structuri cu parametri (grosimea stratului AlGaAs, nivelul dopajului, grosimea spacerului, fracția molară a aluminiului, etc.) distribuiți într-un domeniu larg.

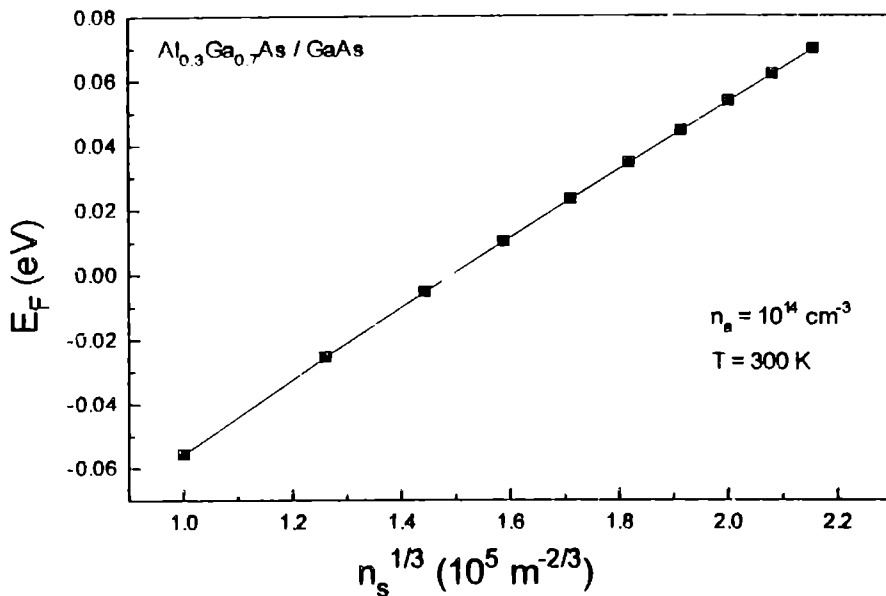


Fig.IV.11 Dependența poziției nivelului Fermi (referința este minimul benzii de conducție în GaAs, la $z=0$) de puterea $1/3$ a concentrației superficiale 2DEG (calcul selfconsistent). Excluzând concentrația acceptorilor din GaAs, parametrii sunt cei din Fig.IV.9.

Rezultatele numerice obținute numeric confirmă dependența propusă în 1985 de Moloney, Ponse și Morkoç [85MOL], în care constantele au valori ușor diferite ($K=1.09 \cdot 10^{-6}$, $L=0.155$) dar diferă de cea propusă în 1988 de Shey și Ku [88SHE], $K n_s^{2/3} - L$, unde K și L sunt de asemenea constante {ecuația (6) în ref. [88SHE]}. Precizăm totuși că relația propusă de Shey și Ku descrie rezonabil dependența nivelului Fermi de concentrație, deși a fost obținută prin metode analitice, care folosesc aproximația TWA pentru poziția nivelurilor energetice {ecuația (IV.42)}. Datorită acestei împrejurări, ei găsesc, pe cale analitică, pentru dependența distanței medii de concentrația 2DEG, expresia (IV.43) {ecuația (8) în lucrarea citată}, în care constanta z_0 este neglijată.

Observație: Atunci când veți studia numeric valabilitatea relației propuse de Shey și Ku, veți constata că o relație de forma $E_F(\text{eV}) = K n_s^{2/3} - L$ concordă rezonabil cu calculul selfconsistent numai pentru concentrații superficiale care satisfac condiția $n_s > 4 \cdot 10^{15} / \text{m}^2$. În acest caz, veți găsi pentru constantele K , L , valori apropiate de: $K = 2.905 \cdot 10^{-12} \text{ m}^{4/3}$, $L = 0.063 \text{ eV}$. La concentrații mai mici decât $4 \cdot 10^{15} / \text{m}^2$ poziția nivelului Fermi este supraevaluată. În concluzie, regiunea de blocare a tranzistorilor HEMT va fi descrisă incorect.

Densitatea totală de probabilitate de localizare este reprezentată în Fig.IV.12, pentru trei valori ale concentrației 2D, $n_s = 0.3, 0.5$ și $0.7 \cdot 10^{16} / \text{cm}^2$.

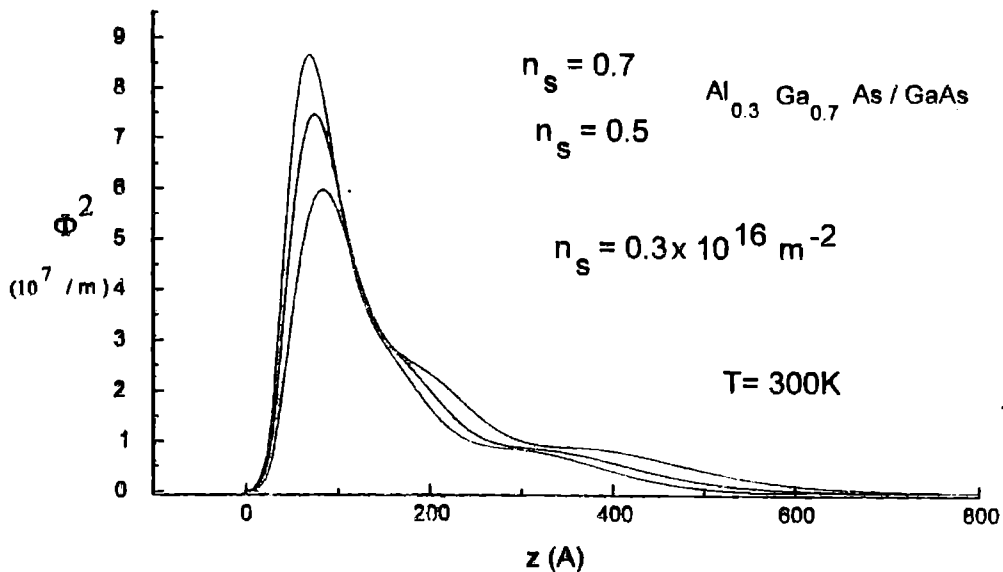


Fig.IV.12 Densitatea de probabilitate de localizare (normată) a electronilor 2DEG la interfața heterojuncțiunii $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$, calculată cu relația (IV.40), pentru trei concentrații superficiale 2DEG, $n_s=0.3, 0.5, 0.7 \times 10^{16} \text{m}^{-2}$ (calcul numeric selfconsistent, $n_A=0$). Au fost luate în considerație trei sub-benzi energetice, $i=0,1,2$.

Pe măsură ce concentrația 2DEG crește, amplitudinea maximului în zona interfeței crește, poziția sa fiind practic independentă de concentrația superficială. Este totuși vizibilă o apropiere lentă de interfață, odată cu creșterea concentrației. În zona distanțelor "mari" sunt vizibile oscilațiile ale densității de sarcină, datorate distribuției pe sub-benzile superioare. *Oscilațiile densității de sarcină sunt pronunțate la concentrații mici* (datorită ocupării comparabile a nivelurilor) și se atenuează treptat la concentrații ridicate. Structura spațială a densității de probabilitate este asemănătoare pe tot domeniul concentrațiilor investigate și se poate afirma că efectul esențial, produs de creșterea concentrației, constă în creșterea probabilității de localizare în vecinătatea maximului. Întrucât funcția totală de undă, asociată mișcării cuantificate în lungul axei z , este normată, integrala mărimii $\Phi^2 dz$ nu depinde de concentrație, astfel că scăderea amplitudinii maximului conduce la o extensie spațială mai mare. Acest efect confirmă scăderea gradului de localizare, pe măsura diminuării concentrației superficiale. *Cunoașterea distribuției spațiale a electronilor 2D este esențială pentru studiul efectelor de împrăștiere pe fononii superficiali și de volum* (mecanism care influențează mobilitatea electronilor și pe care îl veți analiza în detaliu la cursurile de fizica solidului).

Configurația pe care tocmai am analizat-o arată că pentru tensiuni sursă-poartă la care concentrația superficială a electronilor 2D este apreciabilă, electronii sunt localizați în zona interfeței. Interacția cu fononii superficiali poate fi, la temperatura camerei, comparabilă ca intensitate cu cea datorată împrăștierii slabe pe donorii ionizați din stratul de AlGaAs. La tensiuni mici de poartă, concentrația electronilor 2D scade, determinând scăderea gradului de confinare (Fig.IV.13).

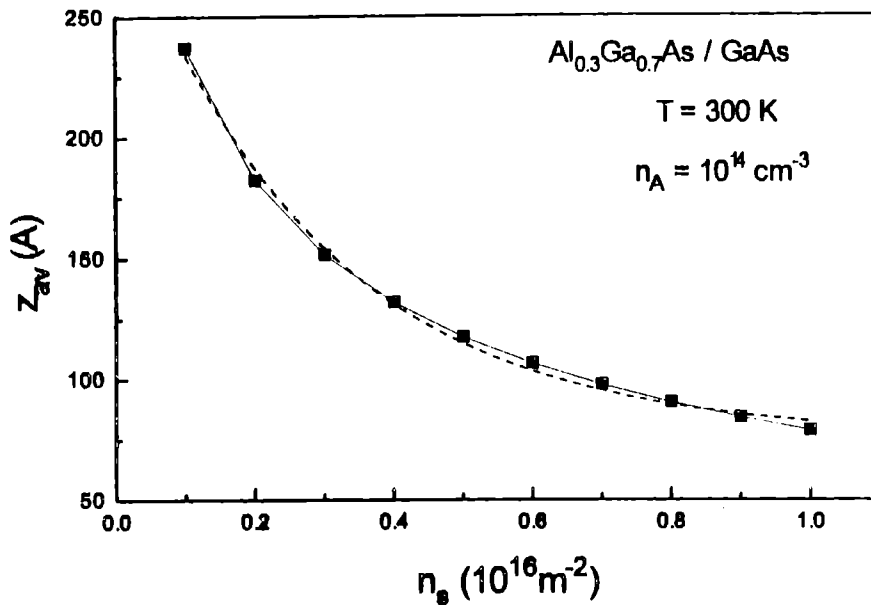


Fig.IV.13 Dependența distanței medii z_{av} , față de interfața structurii, de concentrația electronilor 2DEG. (calcul selfconsistent, cu includerea a trei sub-benzi energetice $i=0,1,2$).

Acest efect diminuează intensitatea interacției cu modurile fononice de suprafață dar o mărește considerabil pe cea cu modurile fononice de volum.

Observație:

Aceste probleme au început să fie studiate intens la începutul perioadei '80. Primele studii s-au axat pe calculul ratelor de împrăștiere și au fost efectuate de Ferry [78FER], Hess [79HES], Drummond și col. [81DRU]. Studiile au fost continuate de Das Sarma [84SAR] prin includerea efectelor datorate polaronilor bidimensionali și au continuat cu studii de rezonanță ciclotronică, efecte de relaxare a electronilor fierbinți, etc. Cele mai multe rezultate au fost obținute prin utilizarea teoriei lui Fröhlich și au neglijat efectul prezenței interfețelor asupra spectrului fononilor optici [84KLE]. În cazul sistemelor generate de semiconductorii biatomici, polari, cu interfață simplă sau dublă (de exemplu, AlAs/GaAs/AlAs), acest efect a fost studiat în detaliu de către Mori și Ando [89MOR].

Calculul selfconsistent arată că distanța medie, față de planul interfeței, depinde drastic și nelinier (ca și în cazul metodei TWA) de concentrația 2D (Fig.IV.13). La concentrații reduse $n_s \approx 10^{15}/m^2$, distanța medie se apropie de 230Å. Această distanță se reduce la aproximativ 80Å, în cazul în care concentrația atinge $10^{16}/m^2$. Rezultatele prezentate în Fig.IV.13 {în care sunt incluse efectele neparabolicității și de schimb-corelație, prin metoda

parametrizării analitice, datorată lui Hedin și Lundqvist [71HED], apoi implementată în simularea numerică a interfeței AlGaAs/GaAs de către Stern și Das Sarma [84STE]) arată că pentru tot domeniul concentrațiilor superficiale investigate ($0.1 \cdot 10^{16} - 10^{16}/m^2$), dependența distanței medii z_{av} , de puterea $-1/3$ a concentrației 2DEG, este liniară:

$$z_{av} = \beta n_s^{-1/3} - z_0 \quad (IV.45)$$

unde $\beta = 3.15 \cdot 10^{-3} m^{1/3}$, $z_0 = 6.69 \cdot 10^{-9} m$. Ambele valori sunt, așa cum era de așteptat, mai mari decât cele găsite prin metoda TWA (de ce?). În mod remarcabil însă, relația (IV.45), satisfăcută numai cu aproximație de electronii confinați într-o groapă triunghiulară, reproduce excelent rezultatele calculului selfconsistent. În multe lucrări autorii deduc, folosind aproximații mai mult sau mai puțin acceptabile, relații de tipul (IV.45), în care constanta z_0 este neglijată. Neglijarea constantei introduce erori apreciabile pe tot domeniul concentrațiilor de interes.

Datorită faptului că echilibrul termodinamic al interfeței este controlat electrostatic, vom insista asupra ideii că între concentrația superficială totală 2DEG și distanța medie z_{av} , se poate găsi o relație diferită de (IV.45), dar compatibilă cu ea, care să aibă o semnificație fizică simplă. Există motive serioase să credem că lucrurile stau așa: dacă sistemul electronic 2D este plasat prea departe de interfață (z_{av} mare), energia potențială totală va crește în dauna energiei cinetice; invers, dacă plasăm electronii prea aproape de interfață (z_{av} mic), energia cinetică se mărește în dauna energiei potențiale totale. Structura energetică a sistemului 2D este înglobată în produsul din partea dreaptă a ecuației (IV.22). Cea mai naturală presupunere este aceea că acest produs este puterea ξ a unei funcții liniare, adimensionale, de distanța medie z_{av} , adică:

$$\prod_{i=0} \left[\exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) + 1 \right] = \left(\frac{z_{av}}{z_0} + \delta\right)^\xi \quad (IV.46)$$

unde z_0 , δ și ξ sunt constante ce urmează să fie determinate. Prin urmare, comparând (IV.46) cu (IV.22), deducem că distanța medie z_{av} este legată de concentrația superficială 2D, prin relația:

$$z_{av} = z_0 \left[\exp\left(\frac{n_s}{Dk_B T \xi}\right) - \delta \right] \quad (IV.47)$$

Întrucât distanța medie scade cu concentrația, deducem că ξ este negativ. Rezultatele numerice selfconsistente, prezentate în Fig.IV.13, demonstrează clar că o dependență de forma (IV.47) (linia întreruptă) descrie foarte bine dependența distanței medii de concentrația 2DEG (la 300 K) dacă pentru constante se aleg valori foarte apropiate de:

$$\xi = -2/5, \delta = -1/3, z_0 = 2.24 \cdot 10^{-8} m \quad (IV.48)$$

Forma relației (IV.47) sugerează introducerea unei energii care caracterizează global dinamica spațială a electronilor 2DEG, prin relația:

$$E_s = \frac{n_s}{|\xi|D} = \hbar \frac{\pi\hbar}{|\xi|m^*} n_s = \hbar\omega_s \quad (IV.48)$$

în care:

$$\omega_s = \frac{n_s}{|\xi|D\hbar} = \frac{5}{2} \frac{n_s}{D\hbar} \quad (IV.49)$$

definește o pulsație specifică sistemului 2D. În aceste condiții, relația (IV.47) poate fi rescrisă într-o formă "clasică":

$$z_{av} = z_0 \left[\exp\left(-\frac{E_s}{k_B T}\right) + |\delta| \right] \quad (IV.50)$$

Întrucât este de presupus că această dependență nu este rapid alterată de variația temperaturii, deducem că *distanța medie scade odată cu scăderea temperaturii*. Într-adevăr, odată cu scăderea temperaturii, gradul de ocupare al sub-benzii fundamentale crește, determinând apropierea electronilor de interfață.

Observație: Relația (IV.50) nu este valabilă pentru concentrații mai mici decât $5 \cdot 10^{14}/m^2$.

În Fig.IV.14 prezentăm dependența energiei sub-benzilor de concentrația superficială 2DEG. Se constată prin calcul numeric simplu că energiile sub-benzilor satisfac, cu o bună aproximație, relații de tipul (IV.42):

$$E_i = \gamma_i n_s^{2/3} + E_{i,0} \quad (IV.51)$$

unde γ_i și $E_{i,0}$ sunt precizate în tabelul de mai jos:

i	$\gamma_i (10^{-12} eV m^{4/3})$	$E_{i,0} (10^{-3} eV)$
0	1.24	4.28
1	2.025	8.73
2	2.39	11.1

Aceste rezultate sunt foarte importante pentru o clasă întreagă de aplicații în domeniul spectroscopiei în infraroșul îndepărtat (VFIR). În prezența câmpului de radiație au loc tranziții între nivelurile E_1 și E_0 , de exemplu, dacă frecvența radiației satisface ecuația:

$$\hbar\omega_{0,1} = E_1 - E_0 = (\gamma_1 - \gamma_0) n_s^{2/3} + (E_{1,0} - E_{0,0}) \quad (IV.52)$$

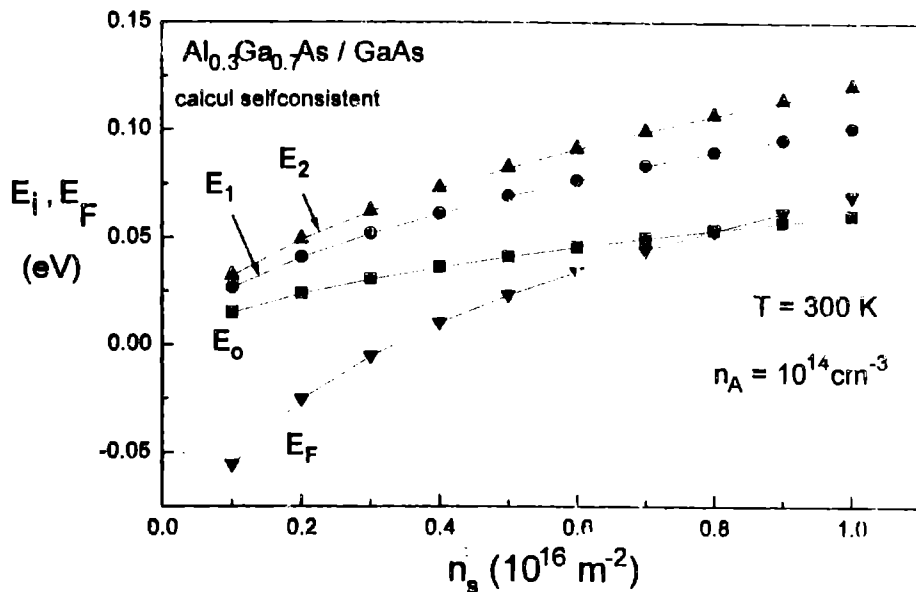


Fig.IV.14 Rezultatul calculului selfconsistent pentru dependența pozițiilor primelor trei sub-benzi energetice ($k_x, y=0$, $n_A=10^{14}/\text{cm}^3$), de concentrația 2DEG.

În urma absorbției radiației electromagnetice, se modifică concentrația superficială a sub-benzilor și deci distribuția spațială a electronilor 2DEG. Această modificare produce o variație mică, dar detectabilă, a capacității de poartă a structurii. Așa cum vom arăta, concentrația superficială 2DEG poate fi ușor controlată cu ajutorul tensiunii sursă-poartă. Ecuația (IV.52) ne arată că frecvența radiației absorbite depinde de n_s și prin urmare ea este de asemenea controlată de tensiunea de poartă. Pe baza acestui principiu se pot obține detectori extrem de sensibili, acordabili în frecvență, pentru infraroșul îndepărtat. Există multe efecte parazite care fac dificilă (dar nu imposibilă) sarcina realizării unor asemenea fotodetectori. Unul dintre cele mai importante îl reprezintă interacția cu fononii superficiali și de volum; acest tip de interacție introduce un zgomot de fond care de cele mai multe ori nu poate fi separat eficient de semnalul util. O altă sursă de zgomot (importantă la niveluri scăzute de semnal) este datorată variațiilor vitezei, variații produse de împrăștierea purtătorilor pe impuritățile de fond.

• Efectul impurităților acceptoare din GaAs

Impuritățile acceptoare din GaAs au o influență considerabilă asupra spectrului energetic, chiar la concentrații echivalente mult mai mici decât cele corespunzătoare electronilor 2DEG (Fig.IV.15). Ușor de anticipat, *efectul impurităților acceptoare constă în mărirea energiei sub-benzilor* {ecuația (IV.37), arată că derivata energiei potențiale, la interfața structurii, crește}. Efectul este mai mare la concentrații 2DEG scăzute și scade în intensitate pe măsură ce concentrația gazului bidimensional se mărește.

Diferența $E_1 - E_0$ este drastic influențată de concentrația dopajului de fond (Fig.IV.16) Nivelul dopajului de fond nu poate fi reprodus sau determinat cu precizie atunci când concentrația coboară sub $10^{15}/\text{cm}^3$. Acesta este unul dintre motivele împrăștierii rezultatelor obținute prin experimente de absorbție optică, rezonanță ciclotronică, etc.

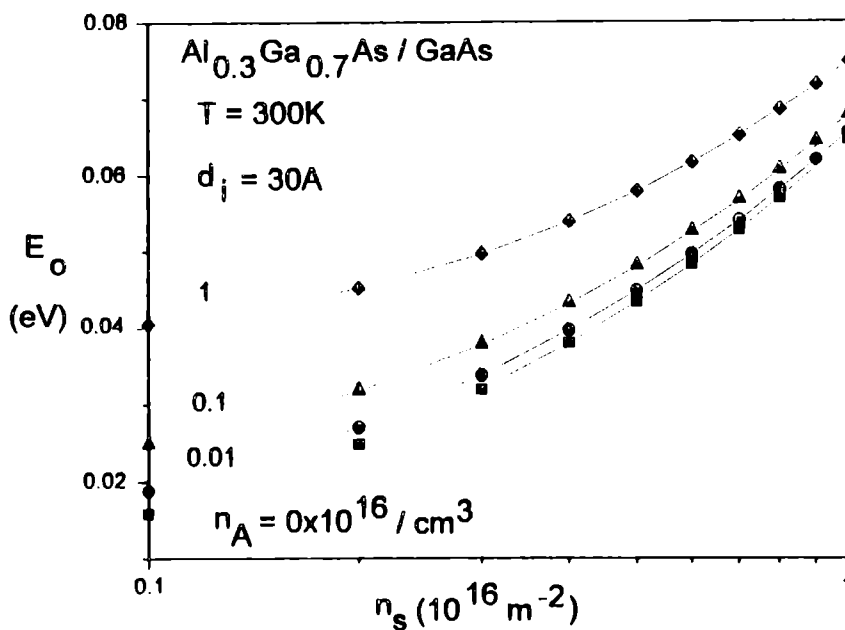


Fig.IV.15 Influența concentrației de fond n_A a impurităților acceptoare din GaAs, asupra poziției sub-benzii fundamentale E_0 . (calcul selfconsistent, cu includerea a trei sub-benzi energetice).

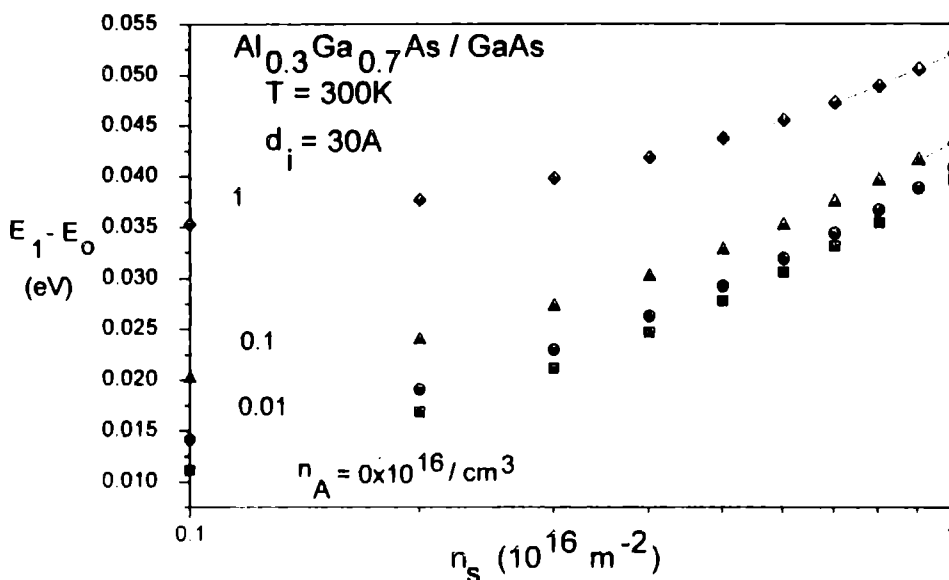


Fig.IV.16 Influența concentrației de fond n_A a impurităților acceptoare din GaAs, asupra energiei de excitare $E_0 - E_1$. (calcul selfconsistent, cu includerea a trei sub-benzi energetice).

Rezultatele prezentate în tabelul anterior (pagina 90) pentru γ_i arată că valorile estimate de Delagebeaudeuf și Linh [82DEL] corespund unui fond

acceptor relativ ridicat (probabil peste $3 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$. La un fond acceptor de $10^{16}/\text{cm}^3$, chiar la concentrații 2DEG ridicate, efectul depășește 30%.

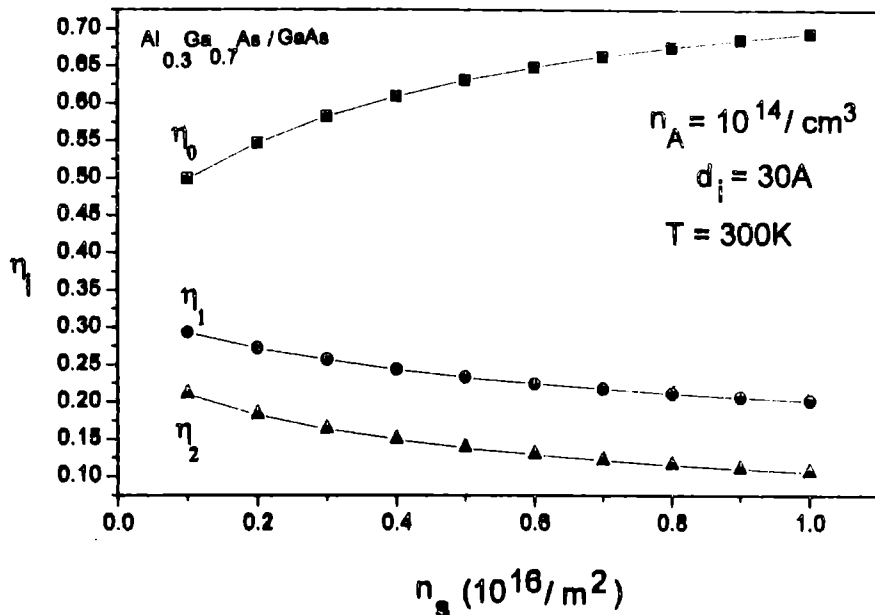


Fig.IV.17 Dependența de concentrația 2DEG a gradului de ocupare a sub-benzilor energetice (calcul selfconsistent, cu includerea primelor trei sub-benzi, $i=0,1,2$).

O comparație între rezultatele prezentate în Fig.IV.17 și IV.18 arată că un nivel ridicat al dopajului de fond ($10^{16}/\text{cm}^3$, echivalent cu o concentrație superficială $4.69 \cdot 10^{15}/\text{m}^2$) reduce în mod considerabil dependența de concentrație a numerelor de ocupare.

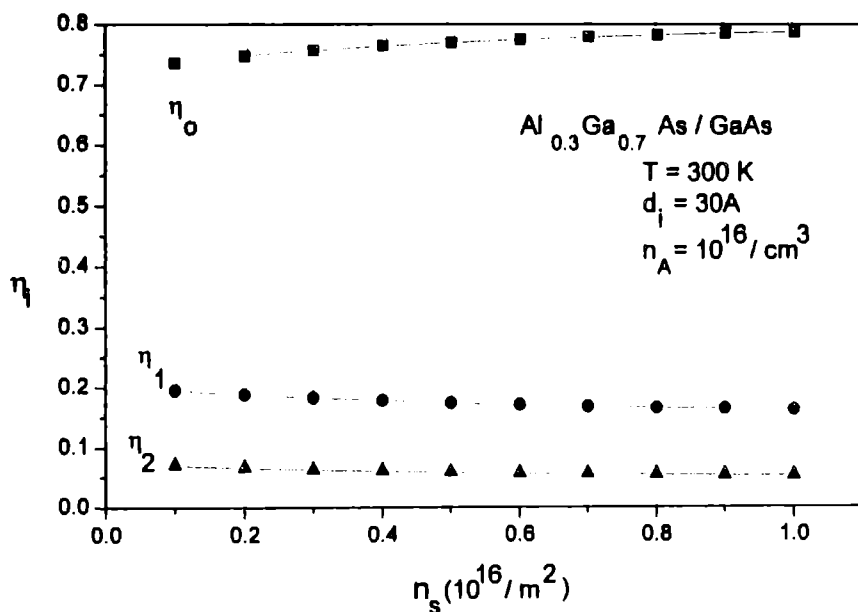


Fig.IV.18 Aceeași dependență ca în Fig.IV.17, dar pentru o concentrație a impurităților acceptoare $n_A=10^{16}/\text{cm}^3$.

• *Influența temperaturii*

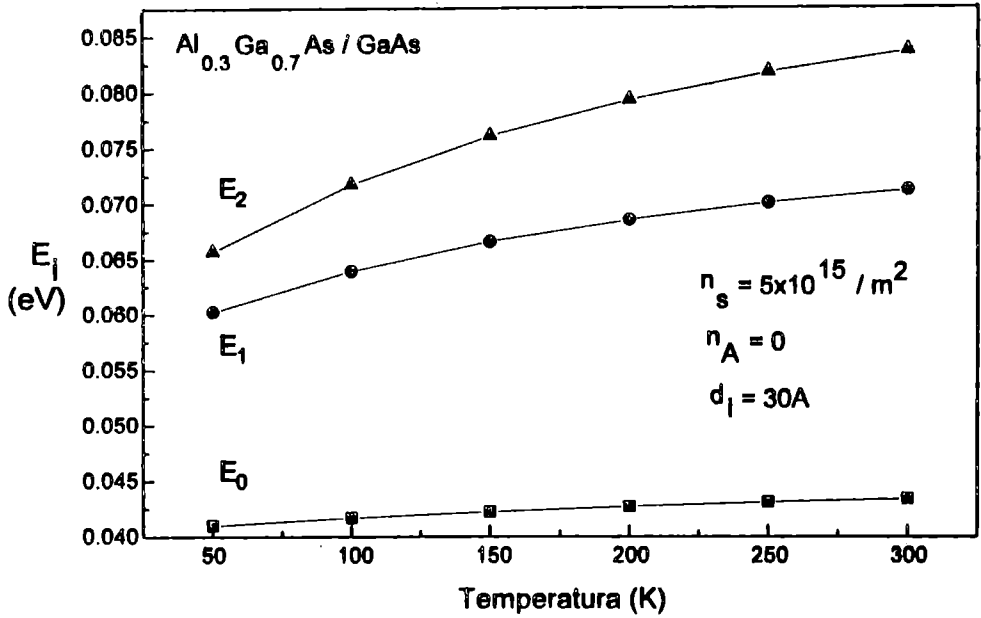


Fig.IV.19 Dependența de temperatură a poziției primelor trei niveluri energetice ($k_x-y=0$).

Corelând rezultatele prezentate în Fig.IV.19 și Fig.IV.20 înțelegem de ce este dificil de prezis direct din ecuațiile (IV.22) și (IV.44), comportarea cu temperatura a distanței medii z_{av} . Atât E_i cât și E_F cresc odată cu temperatura și prin urmare, fără un calcul exact, nu putem prezice sensul variației raportului $(E_F-E_i)/k_B T$ (de fapt putem intui ce se petrece prin compararea ordinului de mărime al variațiilor) Pe domeniul de valabilitate ecuația (IV.50) arată direct că distanța medie scade odată cu scăderea temperaturii.

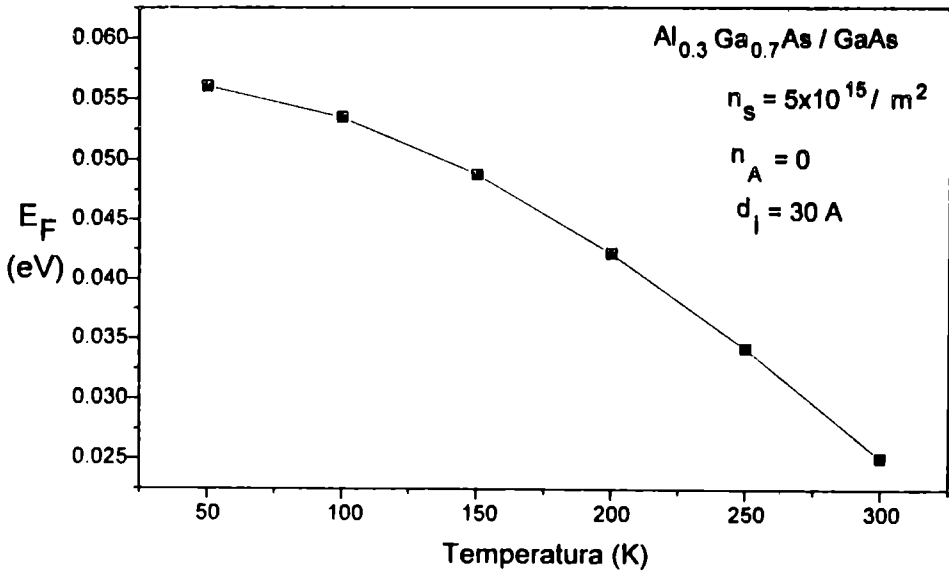


Fig.IV.20 Dependența de temperatură a poziției nivelului Fermi (calcul selfconsistent, cu includerea primelor trei sub-benzi energetice).

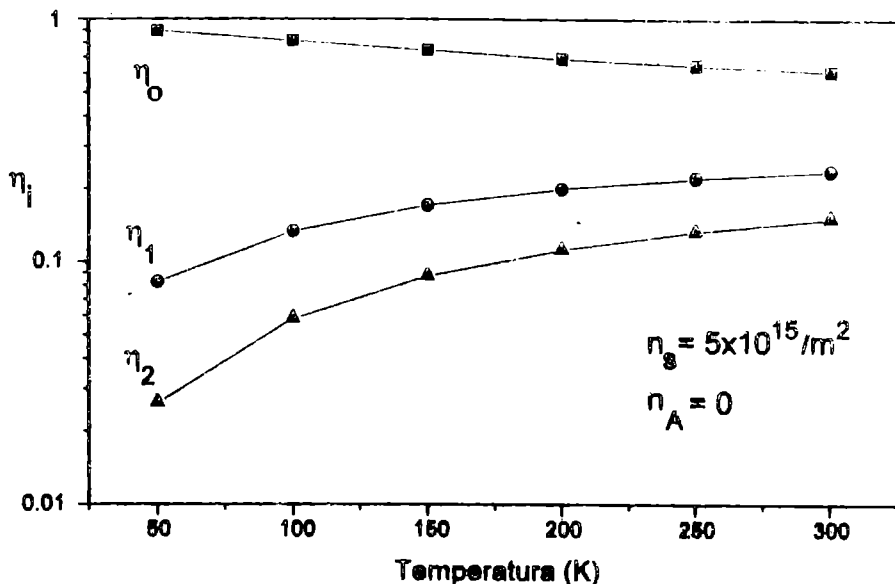


Fig.IV.21 Influența temperaturii asupra gradului de ocupare al sub-benzilor energetice.

De asemenea observăm că diferențele $E_{i+1}-E_i$ ($i=0,1,2$) se micșorează dacă temperatura scade. Acesta este un efect de care trebuie să se țină seama atunci când sunt comparate rezultatele experimentelor de absorbție optică, efectuate la temperaturi diferite.

Gradul de ocupare al sub-benzii fundamentale se apropie de unitate la temperaturi scăzute (Fig.IV.21). În multe cazuri această observație simplifică în mod considerabil calculele pentru că $n_s \cong n_0 \cong D(E_F - E_0)$, pentru $E_F > E_0$. (ecuația IV.22).

Observație:

Rezultatele prezentate evidențiază importanța deosebită pe care o are cunoașterea poziției nivelului Fermi pentru calculul configurației bezilor la interfață. Primele calcule selfconsistente pentru interfața AlGaAs/GaAs au fost efectuate de Stern și Das Sarma în 1984 [84STE]. Ele au fost obținute prin generalizarea metodei aplicate în cazul straturilor de inversie la suprafața Si [72STE, 72aSTE] Rezultatele pe care vi le-am prezentat se află într-o concordanță excelentă cu cele obținute de cei doi autori dar diferă (uneori diferența fiind considerabilă) de cele obținute prin unele aproximații analitice, utilizate des în literatură. Fiecare abordare analitică are un domeniu limitat de aplicare (uneori extrem de restrâns) astfel încât nu există o singură cale de a obține rezultate rezonabile, pe o plajă largă de concentrații sau temperaturi. Mai mult, dacă în analiza structurii sunt implicate și funcțiile proprii, aproape cert vom fi nevoiți să facem toate calculele complicate pe care vi le-am prezentat. Există multe metode care aproximează bine energia nivelurilor, dar conduc la rezultate dezastruoase pentru funcțiile de undă. Calculul inexact al funcțiilor de undă conduce la erori mari în calculul elementelor de matrice pentru tranziții efectuate sub influența perturbațiilor și deci la o apreciere nerealistă a mărimii efectelor produse.

• **Metode analitice. Metoda gropii triunghiulare de potențial (TWA)**

Cea mai simplă cale de obținere a unor expresii analitice ale spectrului energetic 2DEG, presupune că groapa de potențial, care confânează electronii, este triunghiulară. *Atât timp cât densitatea superficială a sarcinii 2DEG este mult mai mică decât cea echivalentă a stratului sărăcit, aproximația va fi bună (uneori excelentă).* Dacă densitatea sarcinii superficiale 2DEG devine comparabilă cu cea din stratul sărăcit, rezultatele vor fi, în general, diferite de cele corecte.

Problema determinării aproximative a spectrului energetic prin metoda TWA se reduce la studiul mișcării unidimensionale, într-un semi-spațiu cu câmp electric constant, nenul, adiacent semi-spațiului complementar în care energia potențială are valoare constantă, finită, sau infinită (Fig.Fig.IV.22). În mod surprinzător, în cele mai multe din tratatele dedicate mecanicii cuantice, studiul acestei probleme, deosebit de importante pentru aplicațiile ei, se oprește odată cu precizarea formei funcțiilor de undă proprii.

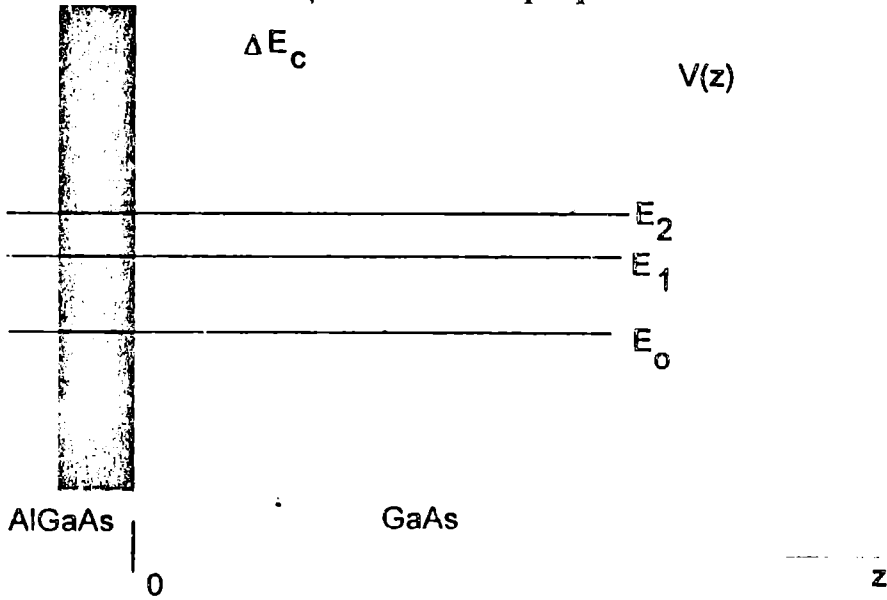


Fig.IV.22 Groapa triunghiulară de potențial, formată din regiunea de câmp electric constant (GaAs) și discontinuitatea ΔE_c a energiei potențiale la interfață.

Soluțiile ecuației lui Schrödinger, pentru mișcarea într-o regiune de câmp constant, sunt combinații liniare ale funcțiilor Airy, $A(z)$ și $B(z)$. Pentru mișcarea confinată funcția de undă în regiunea de câmp constant, la $z=0$, {coeficientul care înmulțește $B(z)$ este nul, pentru ca funcția să fie integrabilă în modul pătrat} trebuie să treacă continuu (inclusiv derivata) în funcția de undă care descrie mișcarea în zona clasic interzisă, unde energia potențială este constanta ΔE_c ($z<0$). Pentru că ΔE_c este de ordinul 0.3 eV, este de așteptat ca, în regiunea cu $z<0$, funcția de undă să se amortizeze rapid. Nu vom face o eroare prea mare dacă vom considera că, la interfață, înălțimea barierei de potențial este infinită. *Trebuie totuși precizat că această procedură introduce o*

confinare suplimentară (și deci energiile proprii vor avea valori ceva mai mari; acest efect este mai important pentru nivelurile cu energie ridicată). Ecuația lui Schrödinger, în aproximația câmpului constant și a masei efective, este ($\xi > 0$):

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Phi}{dz^2} + (E - eE_s z)\Phi = 0 \quad (IV.53)$$

unde E_s este câmpul electric în GaAs. Prin schimbarea de variabilă:

$$\xi = \left(z + \frac{E}{F} \right) \left(\frac{2m^* F}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (IV.54)$$

unde $F = -eE_s$ este "forța" exercitată asupra electronului, ecuația (IV.53) este adusă la forma clasică a ecuației satisfăcută de funcțiile Airy:

$$\frac{d^2\Phi}{d\xi^2} + \xi\Phi = 0 \quad (IV.55)$$

Soluțiile ecuației (IV.55), care satisfac condițiile de regularitate, au forma funcțiilor Airy:

$$\Phi(\xi) = C \text{Ai}(-\xi) \quad (IV.56)$$

unde C sunt constante de normare iar:

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right) du \quad (IV.57)$$

reprezintă funcția Airy, $\text{Ai}(\xi)$. O discuție a proprietăților remarcabile ale acestor funcții găsiți în lucrarea editată de Abramowitz și Stegun [64ABR].

Pentru $\xi > 0$ și mare (cât de mare ?), funcțiile (IV.56) au comportarea asimptotică:

$$\Phi(\xi) \sim \frac{1}{\xi^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (IV.58)$$

În (IV.58) ξ depinde parametric de E . Dacă E este mare, putem prelunge comportarea asimptotică (IV.58) la valori mici ale lui z , în particular chiar pentru $z=0$ (asigurați-vă prin calcul direct că aproximația asimptotică este valabilă până aproape de interfață). Deoarece am considerat că bariera energetică la $z=0$ este infinit de înaltă, trebuie satisfăcută condiția la limită:

$$\Phi(z=0) = 0 \quad (IV.59)$$

Această condiție, împreună cu impunerea comportării asimptotice (IV.58), conduce la cuantificarea spectrului energetic. Energiile proprii au, după cum puteți verifica prin calcul direct, valorile:

$$E_i \cong \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{1/3} \left[\frac{3\pi e F}{2} \text{S}\left(i + \frac{3}{4}\right) \right]^{2/3} \quad (IV.60)$$

unde $i=0,1,2,\dots$,

În mod surprinzător, pentru primele trei niveluri, relația (IV.60) descrie cu o precizie mai bună de 6% rezultatele exacte, obținute pe cale numerică.

Așadar, în aproximația gropii triunghiulare, valorile energiilor E_i depind liniar de puterea $2/3$ a câmpului electric (deci de puterea $2/3$ a concentrației superficiale totale), adică am reconfirmat dependența (IV.42). Distanțele medii și distanțele pătratice medii, la care se situează (relativ la interfață) electronii cu energiile E_i , pot fi calculate utilizând proprietățile funcțiilor Airy și relația (IV.34) [72aSTE]:

$$z_{av,i} = \frac{2}{3} \frac{E_i}{eE_s} \quad (z^2)_{av,i} = \frac{6}{5} (z_{av,i})^2 \quad (IV.61)$$

unde E_s include atât contribuția densității superficiale a acceptorilor ionizați din GaAs ($n_{s,A}$) cât și contribuția gazului electronic bidimensional, adică $E_s = e(n_s + n_{s,A})/\epsilon_1$. Deoarece E_i depind liniar de puterea $2/3$ a concentrației superficiale totale {ec. (IV.60)} din (IV.61) rezultă imediat că distanțele medii depind liniar de puterea $-1/3$ a concentrației totale.

Energia stării fundamentale poate fi estimată și prin *metode variaționale*. Ea poate fi aplicată cu succes în cazul temperaturilor joase. Principala dificultate este aceea a găsirii unei forme funcționale suficient de flexibile pentru a cuprinde aspectele fizice relevante. Uneori acest deziderat este realizat prin introducerea unor adevărați "monștri" algebrici, care conțin un număr mare de parametri (ce urmează să fie "potriviiți" pentru a se obține rezultate deja cunoscute). Semnificația fizică a acestora rămâne în general obscură sau fără legătură directă cu problema fizică în discuție. O funcție de probă care satisface condiții de frumusețe matematică și fizică a fost propusă în 1966 de Fang și Howard [66FAN]:

$$\Phi(z) = \left(\frac{1}{2} b^3\right)^{1/2} z \exp\left(-\frac{1}{2} bz\right) \quad (IV.62)$$

Se observă că această dependență are o comportare asimptotică compatibilă cu cerința ca în zona clasic interzisă funcția de undă să se amortizeze $\Phi(z \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ și satisface condiția la limită $\Phi(z=0)=0$. Ea conține un singur parametru, b , a cărui semnificație fizică este imediată. Într-adevăr, calculând distanța medie z_{av} corespunzătoare stării (IV.62) obținem:

$$z_{av} = 3/b \quad (IV.63)$$

Impunând condiția ca funcția de undă (IV.62) să reprezinte o soluție a ecuației Schrödinger, obținem energia stării fundamentale:

$$E_o = \frac{\hbar^2 b^2}{8m^*} + \frac{3e^2}{\epsilon_1 b} \left(n_A z_D + \frac{11}{32} n_s - \frac{2}{b} n_A \right) \quad (IV.64)$$

Întrucât, prin (IV.63), E_o depinde de z_{av} iar b (și deci z_{av}) urmează să fie calculat astfel încât energia stării fundamentale să fie minimă, obținem o confirmare suplimentară a conținutului fizic al legăturii deduse de noi între z_{av} și n_s {relația (IV.50)}.

Dorim să vă prezentăm semnificația fizică pe care o au diferiții termeni din (IV.64). În felul acesta putem afla lucruri interesante despre efectele la care trebuie să ne așteptăm în situații similare. Dacă notăm $b=\pi/a$, observăm că primul termen reprezintă energia stării fundamentale, într-o groapă de potențial dreptunghiulară, cu pereți infiniți și lățimea $2a$. Așadar, *acest termen reprezintă energia datorată confinării. Al doilea termen din paranteză descrie energia de interacție asociată sistemului 2DEG+câmpul produs de distribuția spațială 2DEG.* Aceasta este prin urmare o energie de self-interacție. În mod analog, *suma primului și a celui de-al treilea termen descrie energia de interacție a electronilor 2DEG cu acceptorii ionizați.* Din condiția ca parametrul b să minimizeze energia se obține expresia:

$$b = \left[\frac{12m^*e^2 \left(n_A z_D + \frac{11}{32} n_s \right)}{\epsilon_1 \hbar^2} \right]^{1/3} - \frac{4}{3} \frac{n_A}{n_A z_D + \frac{11}{32} n_s} \quad (\text{IV.65})$$

IV.1.8 Câmpul și potențialul electric în $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Mai întâi vom prezenta câteva rezultate experimentale importante referitoare la dependența masei efective și a aliniamentului benzilor la interfață de indicele stoichiometric x [86RUD]:

Banda interzisă a aliajului $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (eV)

$$E_{\Gamma\Gamma}(x) = 1.424 + 1.247x \quad \text{pentru } x \leq 0.45$$

$$+ 1.247x + 1.147(x-0.45)^2 \quad \text{pentru } x > 0.45 \quad (\text{IV.66})$$

$$E_{\Gamma L}(x) = 1.708 + 0.642x \quad (\text{IV.67})$$

$$E_{\Gamma X}(x) = 1.9 + 0.125x + 0.143x^2 \quad (\text{IV.68})$$

Masele efective (în unități m_0)

$$\Gamma: \quad m^*(x) = 0.0665 + 0.083x \quad (\text{IV.69})$$

$$L: \quad m^*_l(x) = 1.9 \text{ (în lungul direcției 100)} \quad (\text{IV.70})$$

$$m^*_t(x) = 0.0754 + 0.021x \text{ (perpendicular pe direcția 100)} \quad (\text{IV.71})$$

$$X: \quad m^*_l(x) = 1.3 - 0.2x \quad (\text{IV.72})$$

$$m^*_t(x) = 0.23 - 0.04x \quad (\text{IV.73})$$

$$c(x) = 0.813 - 0.113x \quad (IV.78)$$

Discontinuitățile benzilor de conducție, în punctele Γ , X și L ale zonei Brillouin, sunt:

$$\Delta E_c^\Gamma = E_\Gamma^\Gamma(x) - E_\Gamma^\Gamma(0) - \Delta E_v \quad (IV.79)$$

$$\Delta E_c^L = E_\Gamma^L(x) - E_\Gamma^L(0) - \Delta E_v \quad (IV.80)$$

$$\Delta E_c^X = E_\Gamma^X(x) - E_\Gamma^X(0) - \Delta E_v \quad (IV.81)$$

unde, în eV:

$$\Delta E_v = 0.499x \quad (IV.82)$$

Aceste rezultate permit construirea diagramei benzilor energetice, pentru o fracție molară, x , cunoscută. Pentru calculul permitivității electrice, una dintre cele mai utilizate relații este următoarea [85OKU]:

$$\epsilon = (12.88 - 2.82x)\epsilon_0 \quad (IV.83)$$

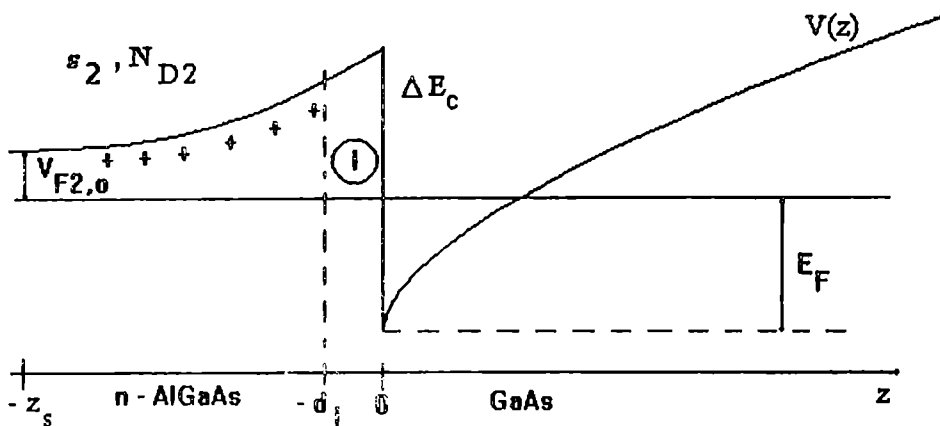


Fig.IV.23 Diagrama benzilor de energie la echilibru termodinamic. Regiunea $-d_i < z < 0$ este nedopată și realizează decuplarea electrostatică între 2DEG și donorii ionizați. Abscisa $-z_s$ delimitează regiunea stratului de baraj de regiunea neutră a stratului din $Al_xGa_{1-x}As$. Poziția nivelului Fermi, relativ la minimumul benzii de conducție din $Al_xGa_{1-x}As$, departe de interfață, este precizată prin energia potențială $V_{F2,0}$.

Pentru calculul potențialelor în AlGaAs vom folosi ca referință poziția nivelului Fermi. Presupunând că în regiunea stratului de baraj toți donorii sunt ionizați și rezolvând ecuația lui Poisson în regiunile $-z_s < z < -d_i$ ($\rho = -eN_D$) și $-d_i < z < 0$ ($\rho = 0$), cu condiții la limită conforme cu Fig.II.24 și de continuitate a potențialului la $z = -d_i$, se obțin pentru dependența de z a potențialului electric următoarele expresii:

pentru $-z_s < z < -d_i$:

$$\varphi(z) = -\frac{eN_D}{2\epsilon_2}(z + z_s)^2 - \frac{V_{F2,0}}{e} \quad (IV.84)$$

pentru $-d_i < z < 0^-$:

$$\varphi(z) = -\frac{eN_D}{\epsilon_2} (z_s - d_i) z - \frac{\Delta E_c - E_F}{e} \quad (IV.85)$$

unde:

$$z_s = \sqrt{\frac{2\epsilon_2}{eN_D} \left(\frac{\Delta E_c - E_F}{e} - \frac{V_{F2,0}}{e} \right)} + d_i^2 \quad (IV.86)$$

este lărgimea stratului de baraj (d_i inclusă). Inducția electrică trebuie să fie continuă la interfața structurii; câmpul electric la 0^- se poate calcula luând derivata cu semn schimbat a dependenței (IV.85) iar la 0^+ (în GaAs) are expresia $e(n_s + n_{s,A})/\epsilon_1$. La echilibru termodinamic are loc egalitatea:

$$\frac{n_s + n_{s,A}}{N_D} + d_i = \sqrt{\frac{2\epsilon_2}{eN_D} \left[\frac{\Delta E_c - E_F(n_s)}{e} - \frac{V_{F2,0}}{e} \right]} + d_i^2 \quad (IV.87)$$

Analizând ecuația (IV.87), înțelegem importanța problemei determinării spectrului energetic al electronilor 2DEG: *fără cunoașterea dependenței $E_F(n_s)$ a nivelului Fermi de concentrația superficială n_s , ecuația (IV.87) nu poate fi rezolvată relativ la n_s* . Aceasta înseamnă că nu putem preciza, pentru o configurație parametrică dată (N_D, N_A, d_i, x) a interfeței, numărul electronilor ce au traversat-o în timpul stabilirii echilibrului termodinamic. Dependența nivelului Fermi de concentrația superficială, $E_F(n_s) = K n_s^{1/3} - L$, găsită în paragraful anterior, rămâne practic neschimbată dacă bariera energetică la interfață are valori peste 0.2 eV (această concluzie este obținută prin calcul numeric selfconsistent și este satisfăcută în majoritatea cazurilor de interes practic). Introducând această dependență în membrul drept egalității (IV.87) se obține o ecuație explicită pentru necunoscuta n_s . Precizăm că valorile constantelor K și L sunt influențate de concentrația impurităților acceptoare de fond. O rezolvare corectă a ecuației (IV.87), pentru un nivel ridicat dopajului de fond, nu se poate obține decât prin calculul selfconsistent expus în paragraful anterior. Din fericire, datorită progresului realizat de tehnica epitaxiei cu fascicule moleculare MBE, în GaAs contribuția concentrației superficiale a impurităților de fond este neglijabilă în raport cu cea a gazului electronic bidimensional. Din acest motiv, $n_{s,A}$ poate fi neglijat și în rezolvarea ecuației (IV.87) se poate utiliza dependența analitică de n_s a nivelului Fermi.

Observatie:

Soluția ecuației (IV.87) depinde parametric de N_D, N_A, d_i și fracția molară x a aluminiului în aliajul digital $Al_xGa_{1-x}As$. ($V_{F2,0}$ se poate calcula cunoscând N_D). Din punct de vedere tehnologic, cunoașterea acestei dependențe are importanță deosebită pentru estimarea performanțelor și

proiectarea structurilor HEMT (calculul tensiunii de blocare, al tensiunii critice de control prin efect de câmp, al curentului maxim, etc.)

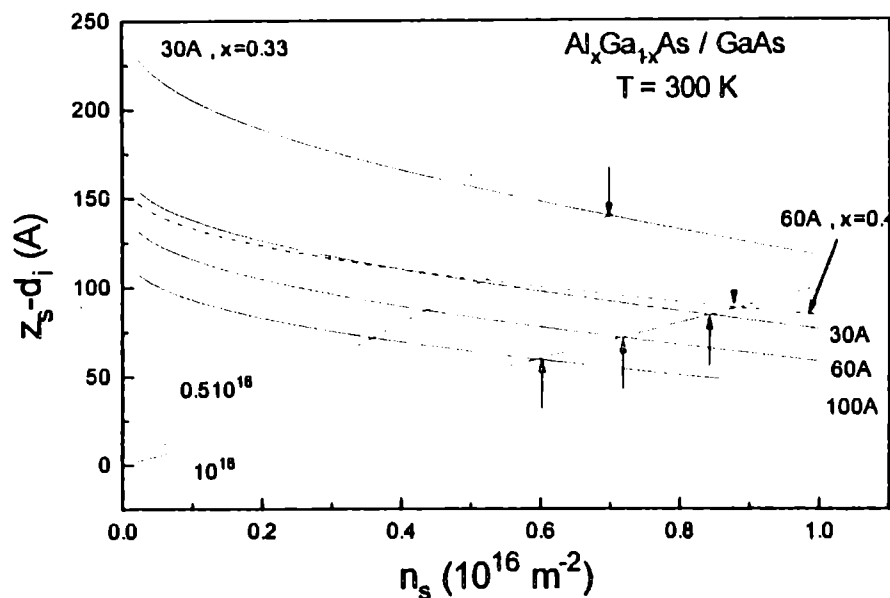


Fig.IV.24 Soluțiile n_s ale ecuației (IV.87) se obțin la intersecția dependențelor n_s/N_D și $z_s(n_s)-d_j$. Aceste intersecții sunt indicate cu săgeți pline pentru cazurile $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$, $x=0.33$, $d_j=30, 60, 100$ A și pentru $N_D=0.5 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$, $x=0.33$, $d_j=30$ A. Linia punctată și săgeata punctată corespund cazului $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$, $x=0.4$, $d_j=60$ A.

În Fig.IV.25 sunt reprezentate soluțiile ecuației (IV.87) în câteva cazuri de interes practic. Soluțiile n_s reprezintă abscisele punctelor de intersecție ale graficelor dependenței liniare n_s/N_D și dependenței $z_s(n_s)-d_j$. Aceasta din urmă reprezintă chiar lărgimea stratului de baraj care conține donorii ionizați. Se observă că pentru $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$, $x=0.33$, și $d_j=30, 60, 100$ A, concentrațiile superficiale 2DEG, la echilibru termodinamic, au valorile $n_{s,0}=0.84, 0.72$ și respectiv $0.6 \cdot 10^{16}/\text{m}^2$. Valorile corespunzătoare ale lărgimii stratului de baraj sunt 85, 72 și 60 A. Dacă fracția molară crește la valoarea $x=0.4$ și $d_j=60$ A se obține $n_{s,0}=0.88 \cdot 10^{16}/\text{m}^2$, această valoare depășind concentrația de echilibru pentru $x=0.33$ și $d_j=100$ A. Această observație arată că, prin creșterea fracției molare x a aluminiului, se poate obține o creștere a concentrației superficiale, simultan cu reducerea cuplajului coulombian.

Observații

- A) O primă sursă importantă de incertitudine asupra valorii concentrației superficiale de echilibru o reprezintă cunoașterea incompletă a structurii energetice a impurităților donoare (Si) în $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Potrivit investigațiilor efectuate de Chand și col. [84CHA], pentru fracții molare

AlAs mai mari de 0.22 pot exista cel puțin două niveluri donoare. Unul, puțin adânc, este situat în apropierea benzii Γ . Al doilea este un nivel mai adânc și se situează în vecinătatea văii X sau L. *Utilizarea în calcule a unui singur nivel donor poate conduce la concentrații sensibil diferite de cele măsurate experimental.*

- B) O a doua sursă de incertitudine a fost introdusă prin utilizarea ipotezei că toți donorii sunt ionizați. În regiunea de baraj a stratului din AlGaAs densitatea de sarcină depinde de z. Calculele efectuate arată că, în cazul temperaturilor scăzute, diferența între concentrațiile de echilibru - calculate ținând sau neținând seama de această variație - este substanțială. La 300K această diferență este de 2-3%.

- C) A treia sursă de incertitudine este legată de o cunoaștere lacunară a aliniamentului benzilor de energie la interfața AlGaAs/GaAs. În unele calcule, pentru estimarea valorii discontinuității ΔE_C este utilizată relația $\Delta E_C(x) = 0.65 E_g(x)$ [80KRO], [80WUC], [82LIU], [86HIC], bazată pe măsurători electrice, în timp ce în alte lucrări este preferată o dependență de forma $\Delta E_C(x) = 0.85 E_g(x)$ [74DIN], justificată prin experimente de absorbție optică. Rezultatele prezentate în Fig.IV.25 sunt calculate utilizând dependența $\Delta E_C(x) = 0.75x$ [78CAS].

Aceste observații arată că o comparație între diferitele rezultate publicate în literatura de specialitate necesită o investigație prealabilă atentă a aproximațiilor și modelelor folosite în algoritmul de calcul.

IV.2 Controlul densității superficiale 2DEG

IV.2.1 Structuri N-OFF și structuri N-ON

Pasul decisiv în descrierea unei structuri de tip tranzistor HEMT (MODFET) constă în precizarea modalității de control al densității superficiale n_s a electronilor 2DEG din canalul cu mobilitate ridicată, generat în stratul intrinsec din GaAs.

În Fig.IV.25 este prezentată diagrama schematică a benzilor de energie în prezența electrodului poartă, depus pe stratul din $Al_xGa_{1-x}As$. În felul acesta ia naștere o nouă interfață, de tip metal-semiconductor (diodă Schottky). Înălțimea V_s a barierei Schottky este măsurată între nivelul Fermi E_F și nivelul benzii de conducție E_C în $Al_xGa_{1-x}As$, la interfață. Datorită difuziei electronilor din semiconductor în electrodul cu caracter metalic (poartă), în semiconductor se dezvoltă un potențial de difuzie. Dacă dioda Schottky este polarizată, stratul de baraj va avea o lărgime mai mică sau mai mare, după cum dioda este polarizată direct sau invers. Corespunzător, punctul de abscisă $-d_s$ se deplasează către interfața metal-semiconductor sau către interfața AlGaAs/GaAs.

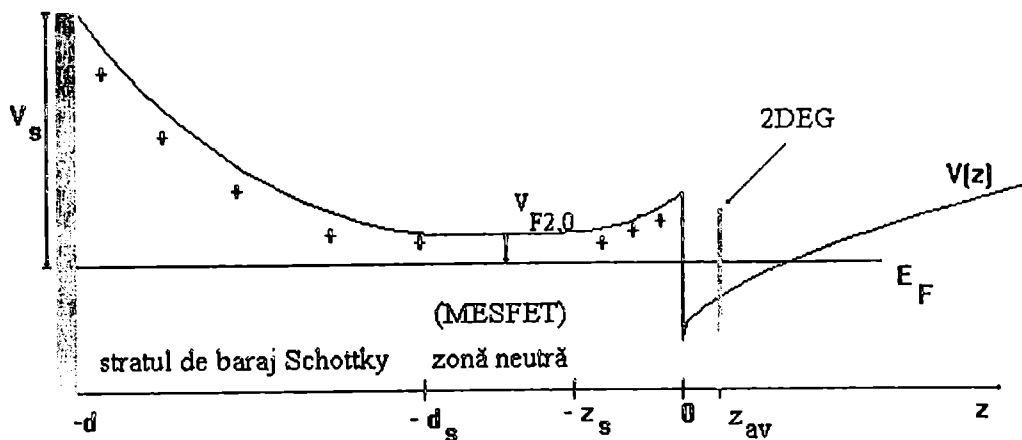


Fig.IV.25 Diagrama schematică a benzilor de energie pentru structura de tip tranzistor HEMT, la echilibru termodinamic. Situația prezentată corespunde cazului în care grosimea totală d a stratului de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ depășește suma grosimilor straturilor de baraj ale diodei Schottky ($d-d_s$) și interfeței $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (z_s), adică $z_s < d_s$. Între cele două straturi de baraj există o regiune neutră care conține electroni liberi ce se mișcă în regiunea impurităților ionizate. Acest canal de conducție are mobilitate redusă și este paralel cu canalul de conducție cu mobilitate ridicată 2DEG. El dă naștere unui curent de drenă suplimentar, specific tranzistorilor de tip MESFET. În prezența canalului MESFET capacitatea de poartă a structurii crește și apare fenomenul de compresie a tranconducției.

Atât timp cât straturile de baraj nu se suprapun, tensiunile aplicate pe poartă nu influențează practic echilibrul termodinamic al interfeței $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ și deci n_s rămâne practic constantă. Trebuie remarcat că această situație este posibilă numai dacă grosimea totală a stratului de AlGaAs este suficient de mare.

Structurile HEMT pentru care la tensiune de poartă nulă (tensiunea de poartă este dată de diferența potențialelor $\varphi_{\text{sursă}} - \varphi_{\text{poartă}} = 0$), straturile de baraj sunt separate, se numesc "structuri cu canal inițial" sau structuri de tip N-ON.

În cazul în care grosimea aliajului digital AlGaAs este atât de mică încât stratul de baraj al diodei Schottky are lărgimea aproximativă $d-d_j$, canalul 2DEG nu poate fi generat (aceasta rezultă în mod simplu prin aplicarea legii lui Gauss) și structurile se numesc "structuri fără canal inițial" sau, echivalent, *structuri de tip N-OFF*. Pe măsură ce tensiunea directă aplicată pe poarta Schottky este mărită, un număr din ce în ce mai mare de electroni traversează interfața $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ și sunt confinați în groapa de potențial. Abscisa punctului de câmp nul se deplasează din $z = -d_j$ către interfața metal-semiconductor. Atât timp cât $V_{F2} > V_{F2,0}$, variația potențialului porții este însoțită de o variație a concentrației 2DEG. Tensiunea la care se realizează condiția $V_{F2} = V_{F2,0}$ este cea mai mare tensiune poartă-sursă pentru care

(la limită) se poate menține controlul concentrației 2DEG prin efect de câmp. Ea este numită "*tensiune de prag*", sau "*tensiune critică*" $\varphi_{G,th}$. Vom menține notațiile utilizate în literatură: $G \equiv$ gate (poartă), $th \equiv$ threshold (prag). Dacă potențialul porții (măsurat în raport cu sursa, considerată la potențial nul) devine mai mare ca $\varphi_{G,th}$, straturile de baraj se decuplează și concentrația electronilor 2DEG rămâne egală cu cea de echilibru termodinamic.

Amorsarea canalului MESFET

Datorită decuplării straturilor de baraj, între $-d_s$ și $-z_s$ vor exista electroni liberi. În cazul aplicării unei diferențe de potențial între sursă și drenă, ei dau naștere unui curent de drenă, controlat de asemenea de potențialul porții. Acesta este de fapt curentul pe care se bazează funcționarea tranzistorilor MESFET. Electronii acestui canal (numit *canal MESFET*) se mișcă în regiunea donatorilor ionizați, au mobilitate mică și disipă energie termică în stratul de AlGaAs, provocând încălzirea structurii.

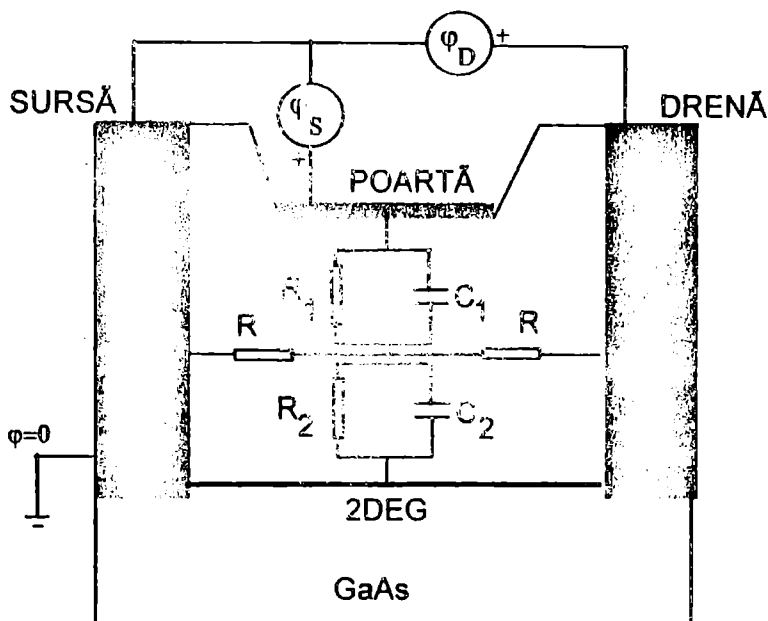


Fig.IV.26 Reprezentare schematică a unei structuri de tip HEMT. Este inclus un circuit electric echivalent, simplificat, al regiunii situate sub poartă. C_1 este capacitatea condensatorului format între poartă și donorii ionizați din stratul de baraj adiacent, C_2 cea datorată electronilor 2DEG și donatorilor ionizați între $-z_s$ și $-d_j$. Rezistențele R (de valoare extrem de ridicată) modelează conducția electrică între sursă și drenă prin regiunile de baraj și prin canalul MESFET. Rezistențele R_1 și R_2 modelează conducția electrică între poartă și canalul 2DEG (ele au valori enorme) Efectul mobilității înalte domină net atunci când canalul MESFET lipsește (stratul de AlGaAs lucrează în regim de sărăcire completă) pentru că singura cale de curent este canalul 2DEG.

În realitate, așa cum am mai precizat, sarcina stratului de baraj scade exponențial cu distanța în jurul punctelor $z = -z_s$ și $-d_s$. Prin urmare, regimul de conducție parazită MESFET se manifestă chiar înainte ca tensiunea de poartă să atingă valoarea de prag. Pentru evitarea acestui efect, stratul de AlGaAs trebuie

să lucreze în regim de sărăcire completă. În Fig. IV.26 este reprezentată schematic, în arhitectură verticală, o structură de tip HEMT în care am inclus schema echivalentă a diferitelor porțiuni. Se observă că în prezența canalului MESFET capacitatea de poartă crește drastic pentru că distanța între canalul MESFET și poartă ($d-d_s$) este mult mai mică decât distanța între poartă și canalul 2DEG ($d+z_{av}$). Dacă structura este de tip N-ON, concentrația maximă a electronilor 2DEG este atinsă în situația de echilibru termodinamic.

IV.2.2 Dependența densității de sarcină 2DEG de potențialul porții

Fig.IV.27 prezintă diagrama benzilor energetice pentru structura HEMT cu poartă polarizată. Dacă pentru măsurarea potențialelor în AlGaAs alegem ca referință poziția nivelului Fermi, la $z = -d$ și $z = 0^-$, potențialul electric satisface condițiile la limită:

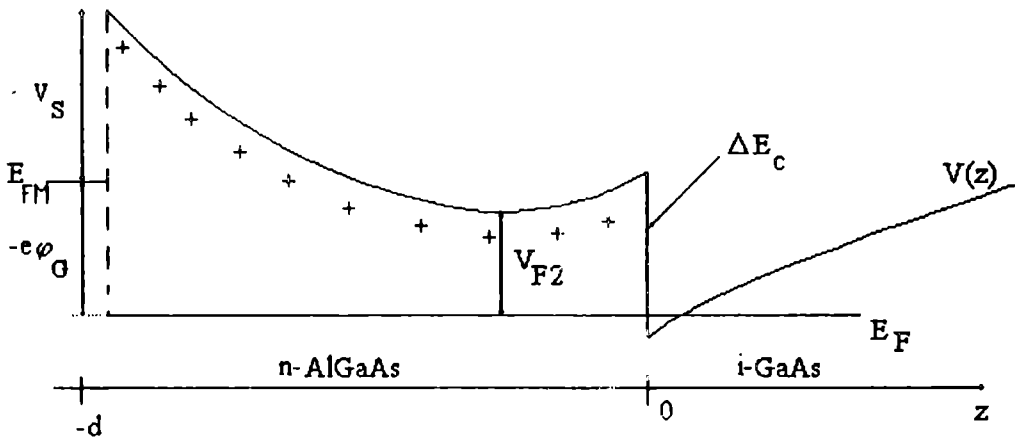


Fig.IV.27 Diagrama benzilor energetice pentru o structură de tip N-ON cu poarta polarizată. E_{FM} este poziția nivelului Fermi în metal. Deoarece stratul de AlGaAs complet sărăcit are o rezistență imensă, putem neglija componenta densității de curent în lungul direcției z . Pentru structurile de tip N-ON poarta Schottky este polarizată invers iar concentrația 2DEG variază între valoarea $n_{s,0}$ de echilibru termodinamic și 0. În cazul structurilor de tip N-OFF poarta trebuie polarizată direct pentru a injecta (prin intermediul sursei) electronii 2DEG în GaAs.

$$\phi(-d) = \phi_G - \frac{V_S}{e} \quad \phi(0^-) = \frac{E_F - \Delta E_c}{e} \quad (IV.88)$$

În aproximația donozilor complet ionizați, ecuația lui Poisson poate fi integrată ușor și prin utilizarea condițiilor la limită (IV.88) se obține expresia câmpului electric la 0^- :

$$E(0^-) = \frac{1}{d} \left[\phi_G - \frac{V_S}{e} + \frac{\Delta E_c - E_F}{e} + \frac{eN_D}{2\epsilon_2} (d - d_i)^2 \right] \quad (IV.89)$$

Folosind continuitatea inducției electrice la interfață, putem lega valoarea câmpului electric la 0^- de cea la 0^+ . Dacă se neglijează efectul dopajului de

fond - această aproximație nu introduce erori apreciabile datorită eficacității tehnicii MBE - câmpul electric la 0^+ are, așa cum am arătat, expresia simplă $E(0^+) = en_s/\epsilon_1$. În aceste condiții, introducând expresia analitică (IV.44) a dependenței nivelului Fermi de concentrație în (IV.89), obținem următoarea **ecuație de control** a densității superficiale 2DEG:

$$n_s + \frac{\epsilon_2 K}{e^2 d} n_s^{1/3} = \frac{\epsilon_2}{ed} \left[\phi_G - \frac{V_s}{e} + \frac{\Delta E_c + L}{e} + \frac{eN_D}{2\epsilon_2} (d - d_i)^2 \right] \quad (IV.90)$$

Aceasta este o ecuație fundamentală pentru studiul și proiectarea tranzistorilor HEMT (MODFET). Ecuația este neliniară, acest aspect dovedindu-se esențial în calculul corect al capacității și curentului de drenă, la tensiuni de poartă mici. În literatură sunt publicate forme mai mult sau mai puțin diferite ale ecuației (IV.90). Toate însă descriu efecte care au același ordin de mărime, diferența fiind datorată aproximațiilor analitice diferite. Comparând dependența prezisă de ecuația (IV.90) cu date experimentale (în care literatura abundă) se constată o concordanță excelentă pentru întreg domeniul pe care sunt distribuiți parametrii esențiali ai structurii (d , d_i , N_D , V_s , x). Ecuația (IV.90) capătă o formă simplă și intuitivă dacă introducem noțiunea de **tensiune de blocare** a tranzistorului, ϕ_{OFF} . *Tensiunea de blocare este tensiunea aplicată între poartă și sursă (la potențialul nul al sursei, aceasta coincide cu potențialul porții), pentru care concentrația 2DEG se anulează.*

Din (IV.90) deducem că tensiunea de blocare este dată de:

$$\phi_{OFF} = \frac{V_s}{e} - \frac{eN_D}{2\epsilon_2} (d - d_i)^2 - \left(\frac{\Delta E_c + L}{e} \right) \quad (IV.91)$$

Tensiunea de blocare este controlată parametric de interfața Schottky (prin V_s), concentrația donatorilor (prin N_D), grosimea stratului dopat {prin $(d - d_i)$ } și fracția molară x a aluminiului în aliajul $Al_xGa_{1-x}As$ (prin ϵ_2 și ΔE_c). Această dependență conferă avantajul ajustării - prin modificări ale configurației geometrice sau ale compoziției - tensiunii de blocare la valorile impuse de aplicațiile concrete. În același timp, este evident că, pentru o structură dată, gradul de împrăștiere al valorilor de interes este drastic influențat de reproductibilitatea parametrilor tehnologici. Din (IV.90) și (IV.91) deducem că:

$$n_s + \frac{\epsilon_2 K}{e^2 d} n_s^{1/3} = \frac{\epsilon_2}{ed} [\phi_G - \phi_{OFF}] \quad (IV.92)$$

Dacă avem în vedere egalitatea (IV.45) observăm că $n_s^{1/3} = \beta / (z_{av} + z_0)$ și prin urmare *al doilea termen din membrul stâng al ecuației (IV.92) reflectă dependența distanței medii z_{av} de concentrația 2DEG.*

• **Structuri de tip N-OFF**

În acest caz, pentru $\varphi_G = 0$ concentrația 2DEG trebuie să fie practic nulă, astfel încât $\varphi_{OFF}=0$. Grosimea stratului de $Al_xGa_{1-x}As$ trebuie să satisfacă ecuația:

$$d_{N-OFF} \cong \left[\frac{2\epsilon_2}{eN_D} \left(\frac{V_s}{e} - \frac{\Delta E_c + L}{e} \right) \right]^{1/2} + d_i \quad (IV.93)$$

• **Structuri de tip N-ON**

Când structura este de tip N-ON, la echilibru termodinamic ($\varphi_G=0$) concentrația 2DEG este maximă și egală cu n_{s0} , unde n_{s0} este soluția ecuației (IV.87). În acest caz, la $z = -z_s$ potențialul electric are valoarea $-V_{F2,0}/e$. Cu ajutorul ecuațiilor (IV.86), (IV.87) și al primei condiții la limită (IV.88) se obține pentru d_{N-ON} expresia:

$$d_{N-ON} = \left[\frac{2\epsilon_2}{N_D} \left(\frac{V_s - V_{F2,0}}{e^2} \right) \right]^{1/2} + \frac{n_{s,0}}{N_D} + d_i \quad (IV.94)$$

Comparând (IV.93) și (IV.94) se constată că $d_{N-ON} > d_{N-OFF}$. Pentru un același aliaj digital $Al_xGa_{1-x}As$, structura HEMT este de tip N-OFF sau N-ON, după cum procesul tehnologic de recesie aduce poarta Schottky la distanță mai mică sau mai mare de planul electronilor bidimensionali. Unul dintre parametrii care influențează grosimea stratului de $Al_xGa_{1-x}As$ este înălțimea barierei Schottky, V_s . Aceasta este, la rândul ei, influențată de tehnologia de obținere și de natura aliajului (uzual Ti/Pt/Au) care formează poarta.

În Fig.IV.28 vă prezentăm dependența grosimilor d_{N-OFF} și d_{N-ON} de înălțimea barierei Schottky, pentru diferite grosimi d_i ale stratului de decuplare coulombiană. Se observă că pentru structurile de tip N-ON poarta este la o distanță considerabil mai mare de planul electronilor 2DEG. În același timp, o supraestimare a înălțimii barierei Schottky conduce la creșterea nejustificată a grosimii structurii și la aprecierea incorectă a tensiunii de prag. În cazul structurilor de tip N-ON, pentru care grosimea d_{N-ON} este dată de relația (IV.94), polarizarea directă a porții Schottky va conduce imediat la formarea canalului de conducție MESFET. Din acest motiv, în multe aplicații practice, grosimea stratului de $Al_xGa_{1-x}As$ este ceva mai mică decât cea prezisă de (IV.94). Dacă această grosime depășește valoarea teoretică d_{N-ON} , canalul de conducție parazită tip MESFET va coexista cu canalul de mobilitate înaltă 2DEG, chiar în condiții de echilibru termodinamic. Influența canalului MESFET va fi cu atât mai importantă cu cât lățimea efectivă a canalului MESFET este mai mare (această lățime depinde de abaterea grosimii stratului din $Al_xGa_{1-x}As$ de la cea prezisă de (IV.94). În cazul structurilor de tip N-OFF prezența canalului MESFET este exclusă.

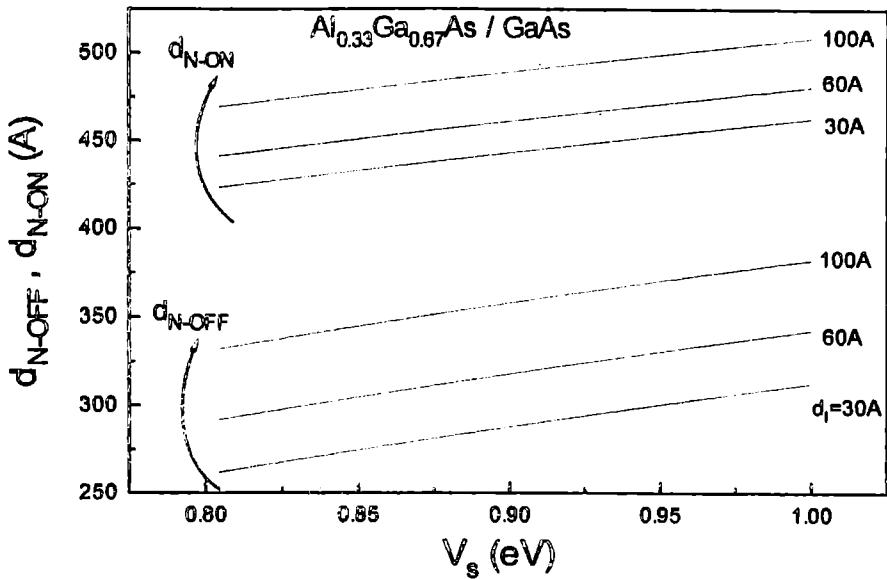


Fig.IV.28 Dependența grosimilor d_{N-OFF} și d_{N-ON} de înălțimea barierei Schottky, calculată cu ecuațiile (IV.93) și (IV.94). Ceilalți parametri au valorile: $x=0.33$, $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$, $V_{F2,0}=0.09$ eV, $T=300\text{K}$ iar valorile pentru $\epsilon_2(x=0.33)$ și $\Delta E_c(x=0.33)$ au fost calculate utilizând dependențele din [78CAS].

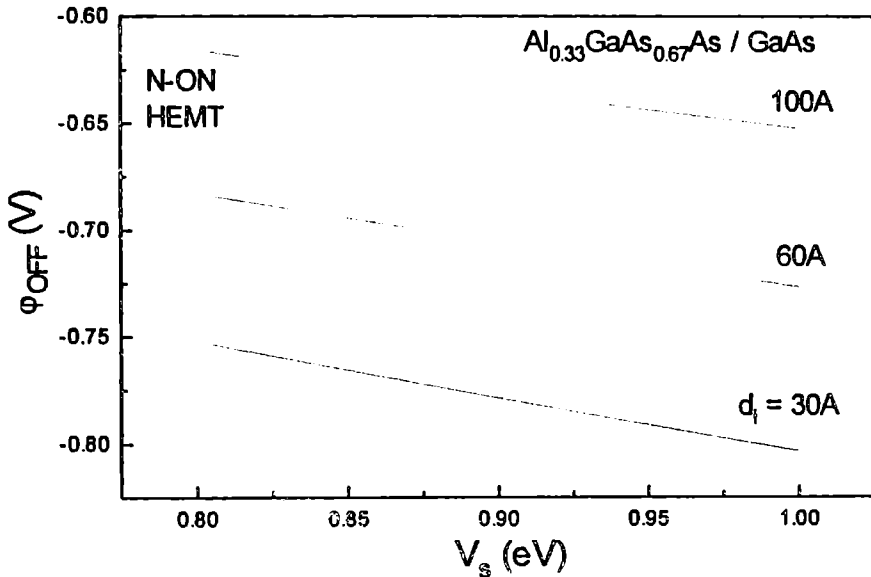


Fig.IV.29 Dependența tensiunii de blocare de înălțimea barierei Schottky, calculată cu ecuația (IV.91). Ceilalți parametri au valorile: $x=0.33$, $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$, $V_{F2,0}=0.09$ eV, $T=300\text{K}$ iar valorile pentru $\epsilon_2(x=0.33)$ și $\Delta E_c(x=0.33)$ au fost calculate utilizând dependențele din [78CAS].

Variația tensiunii de blocare φ_{OFF} cu înălțimea V_S a barierei Schottky este prezentată în Fig.IV.29. Tensiunea de blocare este negativă și crește (e mai puțin negativă) pe măsură ce grosimea d_j a stratului de decuplare coulombiană crește. Tensiunea de blocare scade cu creșterea înălțimii barierei Schottky. Se poate observa că variații de ordinul 0.2 eV ale înălțimii barierei Schottky induc variații ale tensiunii de blocare de ordinul a 50 mV. Efectul relativ este mai mare în cazul decuplării coulombiene puternice. Variația tensiunii de blocare, datorată variației înălțimii barierei Schottky, este un efect care poate fi utilizat în cazul în care se urmărește o scădere (negativare mai pronunțată) a tensiunii de blocare, fără a diminua decuplarea coulombiană. Trebuie remarcat în cazul structurilor N-ON că scăderea tensiunii de blocare mărește plaja tensiunilor de poartă pentru care densitatea superficială 2DEG este controlată prin efect de câmp (acest control este efectiv pentru tensiuni de poartă situate în intervalul ($\varphi_{OFF}, 0$)). Evident, pentru structurile de tip N-OFF, tensiunea de blocare este nulă.

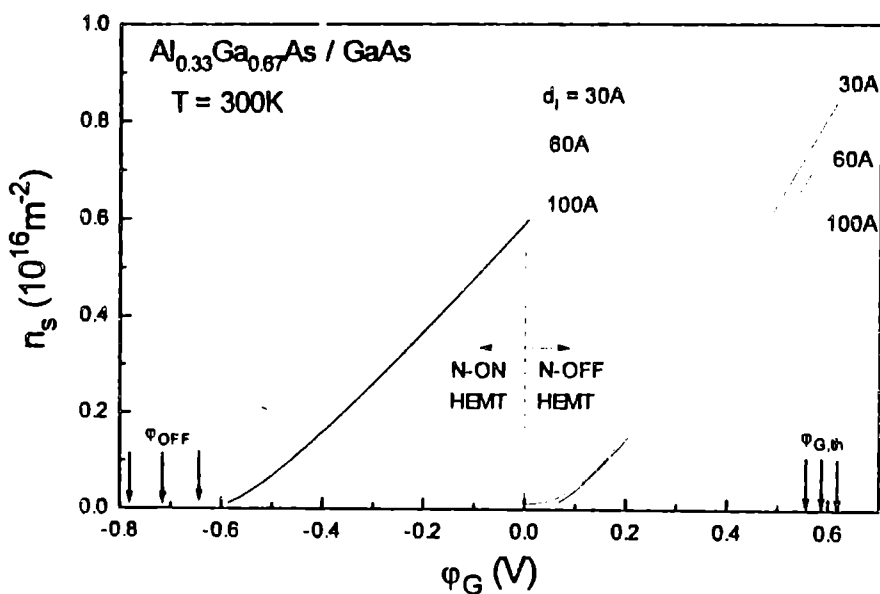


Fig.IV.30 Dependența concentrației superficiale 2DEG de potențialul porții. Este prezentată funcționarea în regim N-ON (stânga) și N-OFF (dreapta) pentru un tranzistor HEMT cu $V_S=1\text{eV}$, $V_{F2,0}=0.09\text{ eV}$, $x=0.33$, $N_D=10^{18}/\text{cm}^3$. Grosimile d_{N-ON} au valorile 464, 481, 510Å corespunzând unor grosimi $d_j=30, 60$ și respectiv 100Å. Tensiunile de blocare φ_{OFF} , indicate prin săgeți, care corespund acestor valori, sunt respectiv -0.8, -0.73 și -0.65V. În cazul funcționării în regim N-OFF, grosimile d_{N-OFF} sunt (pentru aceeași ordine d_j) 312, 342, 411Å iar tensiunile de prag $\varphi_{G,th}$ au valorile 0.61, 0.58 respectiv 0.55 V.

Fig. IV.30 prezintă dependența concentrației superficiale 2DEG de potențialul porții, pentru structuri HEMT de tip N-ON (acest tip de structură este cunoscut și sub numele **E-HEMT**, "Enhanced HEMT") și de tip N-OFF

(D-HEMT, "Depleted HEMT"). În cazul structurilor N-ON concentrația este maximă la echilibru termodinamic și scade pe măsură ce poarta este negativată. Când tensiunea de poartă este egală cu tensiunea de blocare, concentrația se anulează. Rezultatele prezentate în Fig.IV.30, corespund unor structuri N-ON pentru care grosimea stratului de $Al_xGa_{1-x}As$ este strict egală cu d_{N-ON} . Dacă grosimea este mai mare decât această valoare, în stratul de $Al_xGa_{1-x}As$ se formează canalul MESFET și concentrația 2DEG nu răspunde la negativarea porții decât după ce tensiunea scade peste o anumită valoare critică. În aceste condiții, caracteristicile $n_s = n_s(\phi_G)$ vor prezenta un palier. Pentru structurile de tip N-OFF comportarea este radical diferită. Concentrația, practic nulă la echilibru termodinamic, este mărită prin pozitivarea porții, până la valoarea maximă corespunzătoare decuplării straturilor de baraj. În acest moment tensiunea de poartă atinge valoarea de prag $\phi_{G,th}$.

IV.3 Capacitatea de poartă

IV.3.1 Introducere

Capacitatea de poartă reprezintă unul dintre cei mai importanți parametri ai structurilor HEMT. *Valoarea ei limitează frecvența maximă la care lucrează structura.* Există însă și aplicații în care frecvența maximă este mai puțin importantă. Uneori este necesar să dispunem de dispozitive a căror capacitate să depindă liniar de tensiunea de poartă, de exemplu.

Sarcina donozilor ionizați între $z = -d$ și $z = -z_s$ formează un condensator plan cu stratul superficial de sarcină negativă al porții. Pe de altă parte, electronii 2DEG și donozii ionizați între $z = -z_s$ și $z = -d_j$ formează un al doilea condensator cu plăci plan-paralele.

Retineți

Capacitatea ambelor condensatoare variază cu tensiunea de poartă datorită dependenței de concentrația superficială a distanței medii z_{av} .

IV.3.2 Dependența capacității de potențialul porții

În cele ce urmează vom analiza efectul redistribuției electronilor 2DEG asupra capacității. Dacă se presupune că purtătorii de sarcină mobili sunt exclusiv electronii 2DEG, capacitatea specifică de poartă poate fi calculată cu relația:

$$C_G = e \frac{\dot{n}_s}{d\phi_G} \quad (IV.95)$$

Prin derivarea relației (IV 22) în raport cu n_s obținem:

$$\frac{dE_F}{dn_s} = \frac{\frac{1}{D} + \sum_i f(E_i) \frac{dE_i}{dn_s}}{\sum_i f(E_i)} \quad (IV.96)$$

Dacă în ecuația (IV.92) exprimăm termenul în $n_s^{1/3}$ prin E_F și derivăm în raport cu tensiunea de poartă, obținem următoarea expresie pentru capacitatea specifică de poartă:

$$C_G = \frac{1}{\frac{d}{\epsilon_2} + \frac{1}{e^2} \frac{dE_F}{dn_s}} \quad (IV.97)$$

Expresiile (IV.96) și (IV.97) evidențiază faptul interesant că există trei contribuții la capacitatea structurii:

$$C_1 = \frac{\epsilon_2}{d} \quad (IV.98a)$$

$$C_2 = e^2 D \sum_i f(E_i) \quad (IV.98b)$$

$$C_3 = e^2 \frac{\sum_i f(E_i)}{\sum_i f(E_i) \frac{dE_i}{dn_s}} \quad (IV.98c)$$

Aceste trei capacități sunt legate în serie și au semnificații fizice imediate. C_1 reprezintă contribuția stratului de donori ionizați. Atât timp cât stratul din $Al_xGa_{1-x}As$ lucrează în regim de sărăcire completă (mecanismul MESFET nu este activat), C_1 este practic independentă de tensiunea de poartă. Capacitatea C_2 este datorată redistribuției purtătorilor pe nivelurile energetice, redistribuție produsă de variația poziției nivelului Fermi în raport cu pozițiile energetice E_i ale sub-benzilor. Al treilea termen C_3 este generat de dependența energiei sub-benzilor de concentrația 2DEG.

Derivând ambii membri ai ecuației (IV.92) în raport cu tensiunea de poartă se poate obține o expresie echivalentă pentru capacitatea de poartă, în care dependența de n_s este explicitată:

$$C_G = \frac{n_s^{2/3}}{\frac{d}{\epsilon_2} n_s^{2/3} + \frac{K}{3e^2}} \quad (IV.99)$$

Când tensiunea de poartă are valori mari (în cazul structurilor N-OFF se apropie de zero) capacitatea se apropie de valoarea C_1 . Menționăm că activarea mecanismului MESFET în apropierea tensiunii de prag conduce la o tendință de creștere care abate capacitatea de la dependența simplă, prezisă de (IV.99). La concentrații 2DEG apropiate de zero, capacitatea tinde la zero (Fig.IV.31).

Dacă potențialul porții este lent variabil, sarcina negativă superficială din stratul metalic al diodei Schottky este, de asemenea, lent variabilă. În circuitul de poartă apare un curent care injectează sau extrage electronii în sau din canalul 2DEG. În regim dinamic potențialul porții se schimbă cu frecvență foarte mare în jurul unei valori prestabilite static. Datorită frecvenței mari, impedanța porțiunii sărăcite dintre poartă și interfață este în primul rând hotărâtă de capacitatea de poartă a structurii.

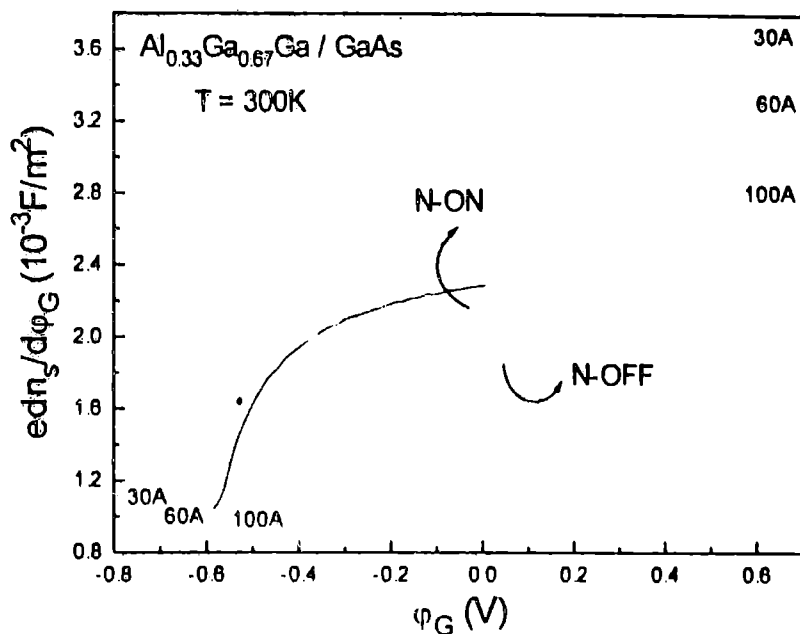


Fig.IV.31 Dependența capacității (specifice) de potențialul porții pentru structurile HEMT analizate în Fig.IV.30. Variația capacității cu tensiunea de poartă este datorată dependenței distanței z_{AV} de concentrația superficială a electronilor 2DEG.

Când capacitatea este mare, impedanța va fi mică și curentul din circuitul porții poate deveni comparabil cu cel dintre sursă și drenă.

Figura IV.31 confirmă previziunea conform căreia, la concentrații superficiale ridicate, capacitatea de poartă a structurilor N-OFF este mai mare decât cea a structurilor N-ON. Dacă analizăm figura IV.26 observăm că în prezența mecanismului de conducție MESFET rezistențele R devin foarte mici (acest lucru este datorat prezenței electronilor de conducție în porțiunea neutră). Din acest motiv, *la frecvențe ridicate și în prezența mecanismului MESFET, capacitatea structurii crește rapid și impedanța de intrare se micșorează drastic.*

V. TRANZISTORI HEMT CU DOUĂ INTERFEȚE (Double Heterojunction - HEMT)

V.1 Introducere

Ultimul deceniu al dezvoltării microelectronicii a evidențiat importanța crescândă a structurilor nanometrice pe care se bazează funcționarea tranzistorilor cu purtători de sarcină cu înaltă mobilitate (HEMT sau MODFET) [86DRU], [89SPA, 89aSPA] sau cea a dipozitivelor rezonante {diode bazate pe fenomenul de tunelare rezonantă RTD}, tranzistori care utilizează fenomene de interferență cuantică "Quantum Modulated Transistor" QMT [89SOL] sau tunelarea unielectronică "Single Electron Tunneling Transistor" SET [92KAS, 93KAS]}. Câmpul larg al aplicațiilor cuprinde tehnicile ultra-rapide de procesare și memorare digitală [88SÖD], extinzându-se până în domeniul tranzistorilor pentru microunde și al detectorilor pentru radiația situată în infraroșul foarte îndepărtat. Metodele de abordare teoretică și tehnologia specifice acestor structuri au fost continuu și substanțial îmbunătățite.

O prezentare detaliată a principiilor pe care este bazată funcționarea tranzistorilor HEMT, a tehnicilor de fabricare și a aplicațiilor o puteți găsi în lucrarea [86DRU].

O cerință: putere mai mare...

În cazul structurilor cu o singură interfață, așa cum au fost cele analizate în capitolul anterior, densitatea superficială a electronilor 2DEG este situată în domeniul $5\text{-}7\cdot 10^{15}/\text{m}^2$. Măsurătorile bazate pe efect Hall au indicat că la 300K mobilitățile sunt de ordinul $0.6\text{m}^2(\text{Vs})^{-1}$. Pentru aplicațiile de putere, densitățile superficiale de sarcină precizate anterior sunt prea mici.

...și o idee simplă: mai multe interfețe

Dacă sunt însumate contribuțiile mai multor canale 2DEG, concentrația electronilor atinge cu ușurință valori de ordinul $1.5\text{-}2\cdot 10^{16}/\text{m}^2$, fără utilizarea unor concentrații excesive a impurităților donoare [85GUP], [86HIK], [86SAU], [88WAN], [88CAZ]. În capitolul anterior am arătat că dependența poziției nivelului Fermi de concentrația superficială 2DEG poate fi determinată corect numai prin calcul self-consistent. Pentru structurile cu interfață simplă pot fi de asemenea utilizate relații analitice care reproduc corect rezultatele numerice. Acestea pot fi cele prezentate de noi în capitolul anterior sau pot avea forme mai mult sau mai puțin diferite, de exemplu [85MOL], [88SHE]. În structurile cu interfață dublă, $\text{Al}_{x_1}\text{Ga}_{1-x_1}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{x_2}\text{Ga}_{1-x_2}\text{As}$, gazele bidimensionale, generate de cele două interfețe, interacționează. În anumite

cazuri această interacție aduce o contribuție semnificativă la energia totală a interfeței. Pentru gropi cuantice (GaAs) a căror lărgime depășește 250Å, termenul de cuplaj are o contribuție mică și în general poate fi tratat ca o perturbație. Efectul său poate fi măsurat de integrala de suprapunere, calculată cu funcțiile de undă asociate canalului superior și inferior, în absența cuplajului. Canalul superior este canalul din apropierea porții Schottky; acest canal este numit canal TOP, spre deosebire de canalul inferior care este numit canal BOTTOM, Fig.V.1. În cazul sistemelor care formează între interfețe o groapă îngustă de potențial, această abordare teoretică nu este apriori justificată și pentru predicția corectă a dependenței densității superficiale 2DEG, de potențialul porții Schottky, trebuie utilizate metode numerice selfconsistente [85INO], [87JAF], [97CRI]. Pentru a reduce efectul unor dificultăți prezente în modelări analitice des utilizate în literatură [88CAZ] (supraestimarea concentrației 2DEG, predicția incorectă a distanței medii, discontinuități în dependența capacității de poartă de potențialul porții), vom descrie un model cuantic al sistemelor cu interfață dublă [92CRI, 95bCRI, 97CRI, 97cCRI]. Acesta este un model analitic (mai precis el este un model de tip CAM "Computer Aided Model") care ține cont de variația distanței medii între poartă și planul 2DEG. Spre deosebire de alte modele analitice, odată cu determinarea concentrațiilor superficiale în **canalul TOP** (TC) și **canalul BOTTOM** (BC) este determinat și spectrul energetic al electronilor 2DEG. Modelul reproduce corect dependența concentrației superficiale 2DEG de tensiunea porții pe un domeniu larg al parametrilor geometrici și fizici ($x_{1,2}=0.25-0.36$, $d_1=100-450\text{\AA}$, $d_{j1,j2}=10-100\text{\AA}$, $d_{\text{v}}=250-350\text{\AA}$, $\phi_G = -3.5-1\text{V}$). Validitatea modelului este verificată prin calculele numerice selfconsistente și prin comparație cu datele teoretice și experimentale publicate în literatura de specialitate. De asemenea, modelul permite o analiză detaliată a mecanismelor fizice implicate în generarea capacității de poartă.

V.2 Principii fizice de funcționare

În Fig.V.1 (a) este prezentată o secțiune schematică prin structura DH-HEMT. Fig.V.1 (b) prezintă variația benzii de conducție în lungul direcției z, pentru zona situată sub poarta Schottky (zona de control activ). Potențialul ϕ_G al porții este măsurat în raport cu potențialul sursei (considerat nul). Ambele straturi din AlGaAs sunt doate cu impurități donoare, stratul din GaAs este intrinsec (sau este prezent un fond acceptor cu concentrație scăzută). Groapa cuantică de potențial (GaAs) este separată coulombian de regiunile dopate din $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ prin regiuni subțiri, nedopate.

În funcție de potențialul porții, trebuie să facem distincție între următoarele două situații interesante:

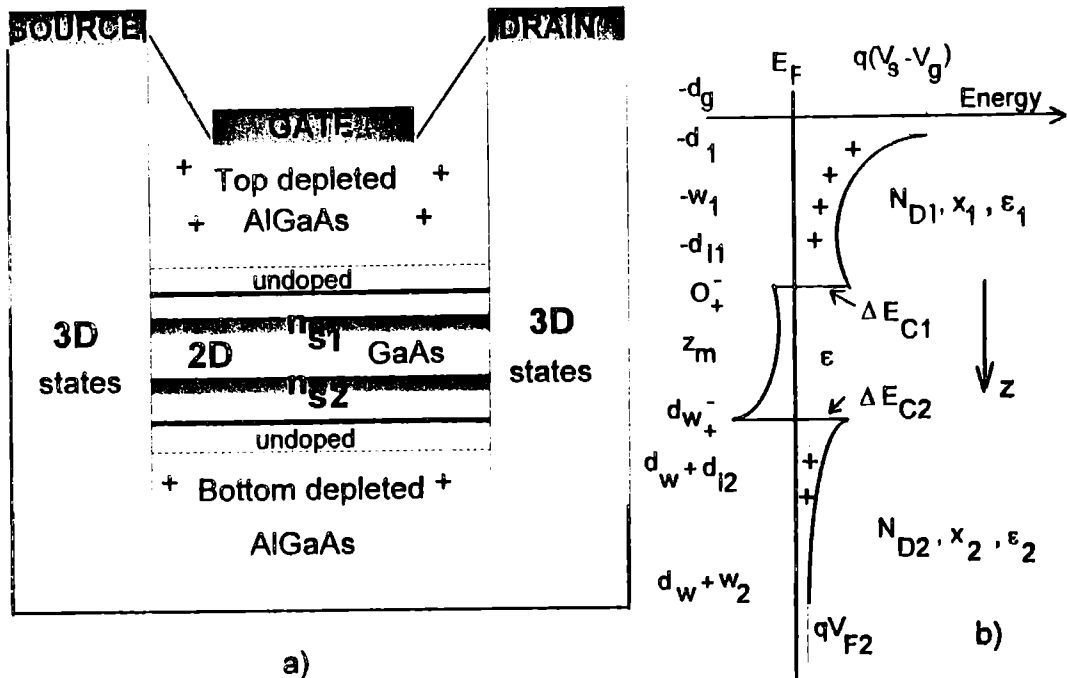


Fig.V.1 Reprezentare simplificată a unei secțiuni printr-o structură DH-HEMT (a) și diagrama asociată a benzii de conducție (b)

• A) În regiunea gropii de potențial, în lungul direcției z , dependența de z a benzii de conducție $E_C(z) = E_C - q\phi(z)$ prezintă un "extrem" în z_m , expresiile intensității câmpului electric $E(0^+)$ la *interfața top* (TI) și $E(d_w^-)$ la *interfața bottom* (BI) fiind:

$$E(0^+) = \frac{q}{\epsilon} (n_{s1} + \theta_1 z_m N_A) \quad (V.1a)$$

$$E(d_w^-) = -\frac{q}{\epsilon} [n_{s2} + \theta_2 (d_w - z_m) N_A] \quad (V.1b)$$

unde, prin definiție, n_{s1} și n_{s2} sunt concentrațiile superficiale în TC și BC iar parametrii $\theta_{1,2}$ (0-1) descriu gradul de ionizare al impurităților acceptoare. Parametrii $\theta_{1,2}$ și z_m pot fi determinați rezolvând selfconsistent sistemul format de ecuațiile lui Poisson și Laplace. Trebuie să subliniem că relațiile (V.1a) și (V.1b) sunt valabile doar cu aproximație, deoarece dependența adevărată a potențialului electrostatic nu poate prezenta puncte de extrem. Aceste ecuații au fost obținute prin aplicarea legii lui Gauss, neglijând fluxul datorat componentelor $E_{x,y}$ ale câmpului electric. Ele reprezintă aproximații foarte bune în absența tensiunii de drenă, pentru acele regiuni care sunt suficient de departe de regiunile de contact sursă-2DEG și drenă-2DEG. Acestea reprezintă regiuni de tranziție în care se desfășoară un schimb complex de purtători între stările cu caracter tridimensional (sursă și drenă) și cele cu caracter bidimensional (2DEG). Teoria acestui fenomen este departe de a fi

pusă la punct. O mare parte din rezistența electrică a contactului sursă-2DEG și drenă-2DEG este datorată redistribuției stărilor energetice în timpul schimbării dimensionalității. În cele ce urmează vom presupune că (V.1a) și (V.1b) sunt valabile. Modificând potențialul porții, echilibrul electrostatic în lungul structurii se schimbă iar densitatea superficială totală $n_{s1}+n_{s2}$ va crește sau va scădea. Pentru ca echilibrul electrostatic să fie restabilit, lungimea w_1 - d_{i1} a stratului sărăcit din AlGaAs crește sau scade (Fig.V.1). Dacă se consideră că toți donorii sunt ionizați și se neglijează dopajul de fond din groapa de potențial situată în GaAs, variația densității superficiale n_{s1} în TC este:

$$\Delta n_{s1} \cong N_{D1} \Delta w_1 \quad (V.2)$$

Deoarece, potrivit legii lui Gauss, zona situată între $z = -d_G$ și $z = -w_1$ nu conține sarcină liberă, în limita aproximațiilor de mai sus, obținem:

$$\Delta n_s = \Delta(n_{s1} + n_{s2}) \cong \Delta n_{s1} \quad (V.3)$$

În consecință, atunci când $n_{s1} \neq 0$, densitatea superficială n_{s2} , în BC, va fi practic independentă de tensiunea de poartă. Dacă tensiunea de poartă este apropiată de valoarea $\varphi_{G,th1}$, adică de valoarea de prag pentru TC, densitatea superficială n_{s1} este neglijabilă și intensitatea câmpului electric $E(0^+)$, la interfața top, se anulează. Aceste observații sunt în concordanță cu evoluția prezisă prin calcul selfconsistent a dependenței benzii de conducție [85INO].

• B) Când $\varphi_G \leq \varphi_{G,th1}$ și se apropie de $\varphi_{G,th}$, tensiunea absolută de prag, la interfața inferioară nivelul Fermi E_F se deplasează către limita benzii de conducție în GaAs. Densitatea superficială n_{s2} descrește treptat, gradul de confinare al sistemului 2DEG crește, determinând o creștere a energiei E_i a subbenzilor. Densitatea superficială a electronilor și intensitatea câmpului electric la interfața inferioară sunt date de relațiile:

$$n_i = D k_B T \ln \left[\exp \left(\frac{E_{F2} - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (V.4a)$$

$$n_s = \sum_i n_i \quad (V.4b)$$

$$E(d_w^-) = -\frac{eN_{D2}}{\epsilon} \left[\sqrt{\frac{2\epsilon_2}{eN_{D2}} \left(\frac{\Delta E_{C2} - E_{F2}}{e} - \varphi_{F2} \right) + d_{i2}^2} - d_{i2} \right] \quad (V.5)$$

unde $D = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$ este densitatea bidimensională a stărilor pentru sisteme bidimensionale, incluzând degenerarea de spin, iar $V_{F2} = (E_C - E_F) + V_{FD}$. În această expresie, al doilea termen din membrul drept reprezintă o corecție a aproximației Boltzmann iar $E_C - E_F$ precizează poziția nivelului Fermi departe de zona interfeței [83LEE]. Dacă $E_{F2} \cong 0$, aproximația TWA (a gropii triunghiulare de potențial) conduce la obținerea unei dependențe corecte a

poziției nivelului Fermi de concentrația superficială (această afirmație este susținută de rezultatele numerice selfconsistente). În consecință, aproximația funcției anvelopă permite aducerea ecuației lui Schrodinger la forma ecuației satisfăcute de funcțiile Airy, energiile proprii fiind:

$$E_i = \gamma_i E^{2/3} (d_w^-) \quad (V.6)$$

unde, pentru GaAs, valorile coeficienților γ_i , măsurate în $(\text{eV})(\text{m/V})^{2/3}$, sunt:

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 1.968 \times 10^{-6} \\ \gamma_1 &= 3.442 \times 10^{-6} \\ \gamma_2 &= 4.648 \times 10^{-6} \end{aligned} \quad (V.7)$$

Energiile (V.7) sunt măsurate față de limita inferioară a benzii de conducție în GaAs, la interfața inferioară (BI).

V.3 Nivelul Fermi la interfețele TOP și BOTTOM

Dacă se neglijează densitatea de curent în lungul axei z , poziția energetică a nivelului Fermi nu variază cu z . Pentru a obține ecuația de control a concentrației superficiale, trebuie să găsim legătura existentă între pozițiile E_{F1} și E_{F2} ale nivelului Fermi, relativ la minimumul benzii de conducție în GaAs, la cele două interfețe. Ecuația lui Poisson, pentru regiunea gropii de potențial, este:

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = \frac{en_s}{\epsilon} \sum_i \eta_i \psi_i^2(z) + \frac{eN_A(z)}{\epsilon} \quad (V.8)$$

unde ψ_i este funcția de undă asociată sub-benzii energetice "i" iar η_i reprezintă gradul de ocupare. Fiecare ψ_i trebuie să satisfacă ecuația lui Schrödinger în aproximația masei efective:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi_i}{dz^2} + [E_i - V(z)]\psi_i = 0 \quad (V.9)$$

Multiplicând ambii membri ai ecuației (V.8) cu z , apoi integrând între 0^+ și d_w^- , obținem:

$$E_{F1} - E_{F2} = eE(d_w^-)d_w + \frac{e^2 n_s}{\epsilon} Z_{av} + \frac{e^2 \theta N_A}{2\epsilon} d_w^2 \quad (V.10)$$

unde:

$$Z_{av} = \sum_i f_i \int_0^{d_w} z \psi_i^2 dz \quad (V.11)$$

este distanța medie la care se situează electronii 2DEG de interfața superioară iar θ are valori în intervalul $(0,1)$ și reprezintă gradul mediu de ionizare al fondului de impurități acceptoare. Distanța medie z_{av} este dependentă de densitatea superficială a electronilor 2DEG. Determinarea corectă a acestei

dependențe implică folosirea unor proceduri numerice selfconsistente. Ecuația (V.10) are o semnificație fizică intuitivă. Ea arată că, la cele două interfețe, diferența energetică între energia benzii de conducție în GaAs este o sumă de contribuții. Ele sunt datorate câmpului $E(d_w^-)$ la BI, câmpului generat de electronii 2DEG {al doilea termen în membrul drept din (V.10)} și câmpului impurităților de fond, ionizate. În aproape toate situațiile de interes practic, ultima contribuție poate fi neglijată fără a introduce erori semnificative.

Concentrația totală a electronilor 2DEG din groapa de potențial este dată de:

$$n_s = \frac{\epsilon}{e} [E(0^+) - E(d_w^-)] - \theta d_w N_A \quad (V.12)$$

Ecuația (V.10) capătă forma:

$$E_{F1} = E_{F2} + eE(0^+)d_w - \frac{e^2 n_s}{\epsilon} (d_w - Z_{av}) - \frac{e^2 \theta N_A}{2\epsilon} d_w^2 \quad (V.13)$$

V.4 Controlul concentrației superficiale

Integrând ecuația lui Poisson asociată straturilor din AlGaAs, după câteva calcule algebrice lungi, care nu prezintă dificultăți, se obține (demonstrați relația) următoarea ecuație de control al concentrației 2DEG:

$$n_s = \frac{\epsilon_1}{e(d_1 + \Delta d)} \left(\varphi_G - \frac{V_S}{e} + \frac{\Delta E_{C1} - E_{F2}}{e} + \frac{eN_{D2}d_{\text{eff}}^2}{\epsilon_1} \right) \quad (V.14)$$

unde:

$$d_{\text{eff}}^2 = (w_2 - d_{i2}) \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon} d_w + d_1 \right) + \frac{N_{D1}}{2N_{D2}} (d_1 - d_{i1})^2 - \left(\frac{\epsilon_1}{2\epsilon} d_w + d_1 \right) \frac{\theta N_A}{N_{D2}} d_w \quad (V.15)$$

iar:

$$\Delta d = \frac{\epsilon_1}{\epsilon} Z_{av} \quad (V.16)$$

Primul termen din membrul drept al egalității (V.15) depinde de E_{F2} prin w_2 , grosimea regiunii sărăcite a stratului inferior din AlGaAs (d_{i2} este inclus). Expresia grosimii w_2 este:

$$w_2(E_{F2}) = \left[\frac{2\epsilon_2}{eN_{D2}} \left(\frac{\Delta E_{C2} - E_{F2}}{e} - \varphi_{F2} \right) + d_{i2}^2 \right]^{1/2} \quad (V.17)$$

Termenul al doilea și al treilea în (V.15) au valori influențate doar de geometria structurii și dopaj.

V.5 Capacitatea de poartă a structurilor DH-HEMT

Dacă se consideră că electronii 2DEG stoccheză întreaga sarcină mobilă $Q_{2\text{DEG}}$, capacitatea diferențială specifică C_G , asociată porții Schottky, este dată de relația:

$$C_G = \frac{d}{d\phi_G} (-Q_{2\text{DEG}}) = e \frac{dn_s}{d\phi_G} \quad (\text{V.18})$$

Utilizând relațiile (V.14), (V.15) și definiția (V.18) se obține:

$$C_G = (C_1^{-1} + C_2^{-1})^{-1} \quad (\text{V.19})$$

unde:

$$C_1^{-1} = \frac{d_1}{\epsilon_1} \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon} \frac{z_{av}}{d_1} \right) \quad (\text{V.19a})$$

$$C_2^{-1} = \frac{n_s}{\epsilon} \frac{dz_{av}}{dn_s} + \frac{1}{e^2} \left[1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \frac{(\epsilon_1/\epsilon)d_w + d_1}{w_2} \right] \frac{dE_{F2}}{dn_s} \quad (\text{V.19b})$$

Capacitatea C_1 , dată de (V.19a), descrie efectul donozilor ionizați, situați în stratul din AlGaAs, adiacent porții Schottky. Acest termen include contribuția distanței medii z_{av} și o corecție datorată permitivităților diferite ale gropii de potențial și stratului din AlGaAs. Prin urmare, C_1 este capacitatea echivalentă a interfeței TOP. Primul termen din membrul drept al egalității (V.19b) este negativ (!) și are ca sursă dependența distanței medii de concentrația 2DEG. Creșterea tensiunii de poartă conduce la scăderea distanței medii z_{av} și deci la creșterea capacității structurii. În sfârșit, al doilea termen este dependent de variația poziției nivelului Fermi cu n_s și include efectul donozilor ionizați situați în stratul inferior din AlGaAs. Atunci când tensiunea de poartă are valori apropiate de tensiunea de prag absolut $\phi_{G,th}$, densitatea superficială este neglijabilă și aproximația TWA conduce la rezultate excelente. Distanța medie $z_{i,av}$, a electronilor aflați în sub-banda energetică "i", măsurată față de interfața superioară, este:

$$z_{i,av} = d_w + (2/3)\gamma_i E^{-1/3} (d_w^-) \quad (\text{V.20})$$

unde, pentru GaAs, coeficienții γ_i sunt cei dați de relațiile (V.7). La interfață, câmpul electric ia valori apreciabile (de ordinul -2×10^7 V/m) iar al doilea termen din membrul drept al ecuației (V.20) aduce o contribuție de numai 30-40Å la $z_{i,av}$. Această contribuție este, într-o primă aproximație, neglijabilă față de lărgimea d_w a gropii de potențial (în mod obișnuit mai mare de 200Å). Pentru tensiuni de poartă care stabilesc acest regim de funcționare, capacitatea are valori mici și poate fi calculată aproape exact folosind aproximația gropii triunghiulare. Pentru structuri cu interfață simplă această aproximație a fost folosită de Sadwick și Wang [86SAD].

V.6 Descrierea modelului analitic

Pentru a calcula densitatea superficială n_s , corespunzătoare unei anumite tensiuni de poartă, trebuie determinate dependența de n_s a distanței medii z_{av} și cea a poziției nivelului Fermi E_{F2} (sau E_{F1}). Riguros, aceste dependențe pot fi precizate numai după rezolvarea numerică selfconsistentă a sistemului format de ecuațiile Poisson și Schrödinger, incluzând energia potențială datorată prezenței interfețelor și efectele de schimb și de corelație. Algoritmul numeric nu diferă în mod esențial de cel prezentat în capitolul anterior, dar este laborios, anumite circumstanțe parametrice putând conduce la o creștere semnificativă a numărului de iterații (și deci a timpului de calcul). Rezultatele numerice și comparațiile acestora cu rezultatele teoretice și experimentale disponibile în literatură [88CAZ], [85INO], [87JAF] au indicat că se pot evita procedurile numerice complicate, folosind următoarea metodă analitică:

- i) Stabilim pentru E_{F2} o valoare inițială (-0.04 eV, în cele ce urmează) și o modificăm treptat, calculând la fiecare pas câmpul electric $E(d_w^-)$ cu relația (V.5), energiile proprii E_i cu ecuațiile (V.6), (V.7) și concentrația superficială n_s cu (V.4a,b). În exemplele care urmează, au fost incluse primele trei subbenzi energetice.

- ii) Neglijând concentrația impurităților acceptoare de fond N_A , în acord cu (V.1a) și (V.12), concentrația n_{s1} în TC este dată de relația:

$$n_{s1} = \left[n_s + \frac{\epsilon}{e} E(d_w^-) \right] \cdot \Theta \left[n_s + \frac{\epsilon}{e} E(d_w^-) \right] \quad (V.21)$$

Θ fiind funcția treaptă unitate. Dacă argumentul funcției este mai mare decât zero, sunt populate cu electroni ambele canale 2DEG. În caz contrar, $n_{s1}=0$, în timp ce $n_s = n_{s2}$. Densitatea superficială în BC se calculează simplu cu relația $n_{s2}=n_s-n_{s1}$.

Observații:

1) Din punct de vedere teoretic, utilizarea aproximației TWA pentru interfața inferioară nu este justificată dacă populația electronică în BC are valori semnificative. Calculele selfconsistente arată că TC începe să fie populat cu electroni când n_{s2} are valori de ordinul $6 \cdot 10^{15}/m^2$. În aceste circumstanțe, singurul argument pentru valabilitatea procedurii analitice de mai sus îl reprezintă concordanța excelentă cu valorile concentrațiilor calculate prin metoda numerică.

2) Așa cum am arătat în paragraful V.2A, când $n_{s1} \neq 0$ concentrația n_{s2} a canalului inferior este practic constantă. Aceasta înseamnă că la interfața inferioară intensitatea câmpului $E(d_w^-)$ este de asemenea constantă și ca urmare poziția E_{F2} a nivelului Fermi este slab dependentă de n_{s1} . Cu toate acestea, se constată că procedeul analitic pentru calculul concentrațiilor n_s , n_{s1} , n_{s2} poate fi

continuat chiar în domeniul $n_{s1} \neq 0$. Prin utilizarea acestei metode se produce o ușoară depopulare a canalului inferior. Concentrația totală se află într-o concordanță foarte bună ce cea obținută pe cale numerică. Remarcabil, această concordanță se menține chiar dacă parametrii structurii iau valori într-un domeniu larg ($x_{1,2}=0.25-0.36$, $d_1=100-450\text{\AA}$, $d_{j1,j2}=10-100\text{\AA}$, $d_w=250-350\text{\AA}$, $\phi_G=-3.5-1\text{V}$). În plus, metoda analitică menține continuitatea primei derivate $dn_s/d\phi_G$, corespunzătoare tensiunii de poartă la care începe popularea canalului superior. Acest aspect are importanță deosebită pentru modelarea capacității diferențiale asociate porții Schottky.

• iii) Pentru a calcula dependența distanței medii de concentrația superficială 2DEG utilizăm dependența:

$$Z_{av} = (1 - an_s) \sum_i \eta_i \left[d_w + \frac{2}{3} \gamma_i E^{-1/3} (d_w^-) \right] \quad (\text{V.22})$$

cu $a = (1/3.15) \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$. Exceptând factorul de corecție $(1 - an_s)$, această expresie poate fi obținută prin metoda TWA și reprezintă distanța medie la care se situează electronii 2DEG de interfața superioară. Subliniem că factorul de corecție este important la concentrații ridicate. Când parametrul a crește, densitatea superficială maximă crește în timp ce distanța medie se micșorează (Fig.V.2).

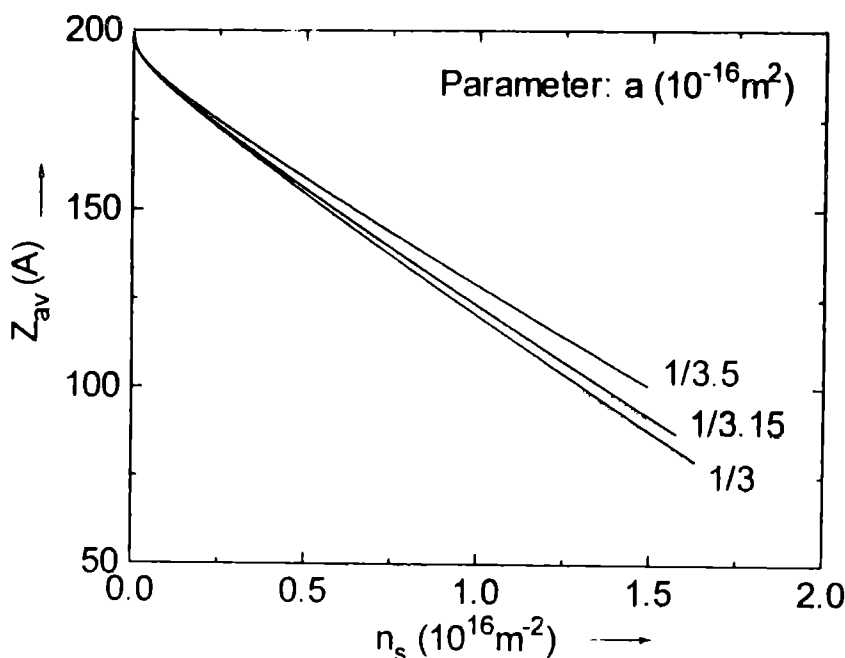


Fig.V.2 Dependența teoretică a distanței medii z_{av} de concentrația 2DEG {ec.(V.22)}. Parametrii structurii sunt aceiași ca în [88CAZ]: $N_{D1}=2 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$, $N_{D2}=1 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$, $d_{j1}=40\text{\AA}$, $d_{j2}=70\text{\AA}$, $x_{1,2}=0.3$, $d_1=440\text{\AA}$, $d_2=270\text{\AA}$, $d_w=250\text{\AA}$, $V_s=1\text{eV}$, $V_{F1,F2}=50 \text{ meV}$.

Printr-o alegere potrivită a valorii parametrului a (valoarea folosită în cele ce urmează este $a=1/3.15$ (10^{-16} m²)) se evită supra sau subestimarea concentrației corespunzătoare diferitelor tensiuni de poartă.

• iv) Introducând n_s și z_{av} în ecuația de control (V.14) se obține dependența concentrației superficiale de tensiunea de poartă. Pentru o anumită valoare a potențialului porții, numită *tensiune critică de poartă* $\varphi_{G,cr}$, definită ca cea mai mare tensiune pentru care tranzistorul mai este controlat prin efect de câmp, concentrația 2DEG atinge valoarea maximă. Deoarece orice creștere ulterioară a tensiunii de poartă modifică doar numărul donoilor necompensați din stratul superior de AlGaAs, potențialul porții nu mai controlează concentrația superficială, aceasta păstrând o valoare aproape constantă. În acest regim de funcționare, stratul superior din AlGaAs nu este complet sărăcit și se formează un canal de conducție parazit (*efect MESFET*) [84LEE]. Prezența canalului MESFET micșorează transconductanța și frecvența de tăiere [88CAZ]. Folosind condiția de neutralitate și ecuația (V.12), constatăm că în momentul atingerii concentrației critice $n_{s,cr}$, este satisfăcută următoarea ecuație:

$$n_{s,cr} = N_{D1}(w_1 - d_{11}) + N_{D2}(w_2 - d_{12}) \quad (V.23)$$

Lărgimea w_1 a stratului de baraj are aceeași expresie ca w_2 , exceptând faptul că indicele 1 trebuie înlocuit cu 2. În consecință, când concentrația atinge valoarea critică, lungimea n_{s1}/N_{D1} are aceeași valoare cu lărgimea regiunii sărăcite $w_1 - d_{11}$ (Fig.V.3).

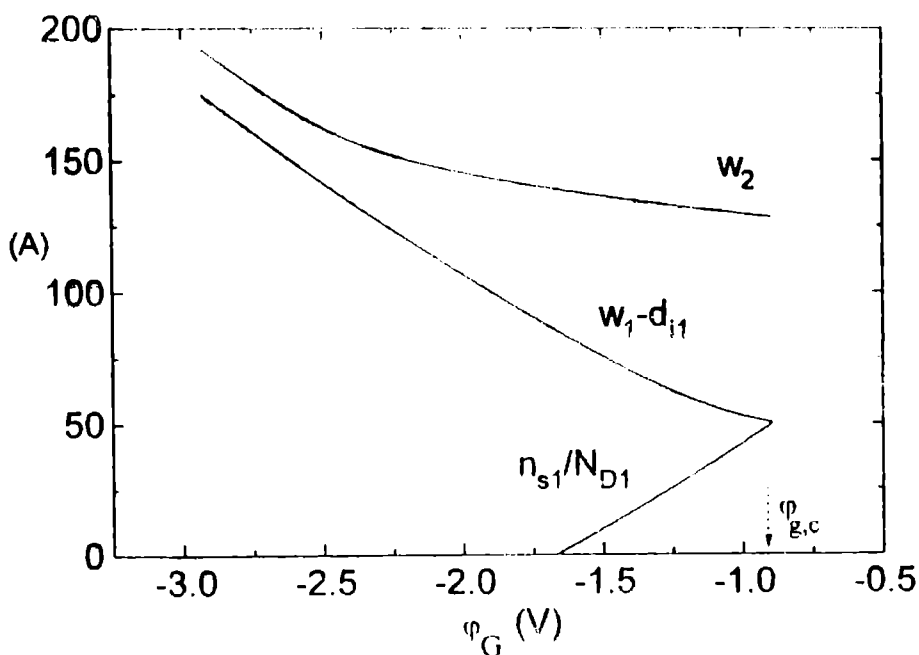


Fig.V.3 Dependența lărgimii straturilor de baraj de potențialul porții. Este ilustrat principiul determinării concentrației critice la care este activat mecanismul MESFET.

Analizând Fig.V.3, constatăm că pentru valabilitatea condițiilor la limită impuse soluției ecuației lui Poisson pentru stratul inferior din AlGaAs, este necesar ca, departe de interfața inferioară, acesta să se afle în echilibru termodinamic. Prin urmare trebuie ca stratul inferior să aibă o grosime suficient de mare (pentru exemplul din Fig.V.3 aceasta trebuie să depășească 200Å). Dacă stratul este prea subțire, condițiile la limită se complică în mod considerabil și valabilitatea aproximațiilor utilizate de model devine discutabilă.

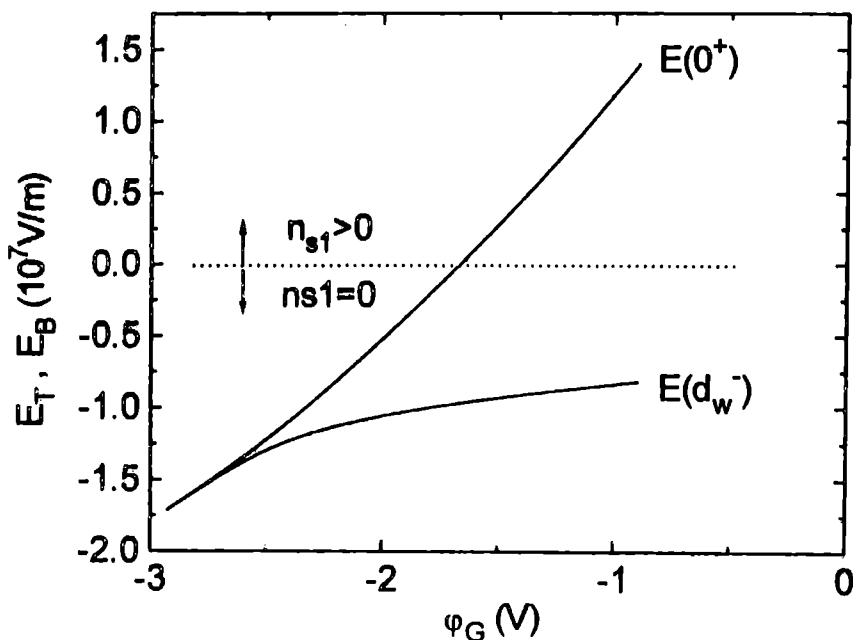


Fig.V.4 Dependența intensității câmpului electric la interfața TOP (T) și BOTTOM (B) de potențialul porții. În vecinătatea tensiunii de prag, concentrația 2DEG este neglijabilă și la cele două interfețe câmpul are aceeași intensitate. Pe măsură ce tensiunea de poartă crește, valorile intensității diferă din ce în ce mai mult și concentrația superficială crește proporțional cu diferența între valorile intensității la cele două interfețe {ec.(V.12)}. Canalul TOP începe să fie populat când valorile E_T devin pozitive.

În Fig.V.4 este prezentată dependența intensității câmpului electric la interfețele TOP și BOTTOM, de potențialul porții Schottky. După începerea populării TC cu electroni 2DEG, intensitatea câmpului la interfața inferioară crește lent, astfel încât creșterea concentrației totale este datorată, aproape în întregime, creșterii concentrației n_{s1} .

O dependență tipică a spectrului energetic 2DEG, de potențialul porții, calculată aplicând algoritmul analitic i-iv, este prezentată în Fig.V.5. Se observă că după activarea populării în TC ($\phi_G = -1.66$ V), poziția E_{F2} a nivelului Fermi este slab dependentă de tensiunea de poartă. Datorită acestui fapt, concentrația n_{s2} este practic constantă. Eficiența porții este reflectată în plaja extinsă a valorilor câmpului la interfața TOP. (aceasta cuprinde atât

valorile negative corespunzătoare absenței canalului TOP cât și valorile pozitive specifice regimului de concentrație ridicată, când sunt prezente ambele canale 2DEG)

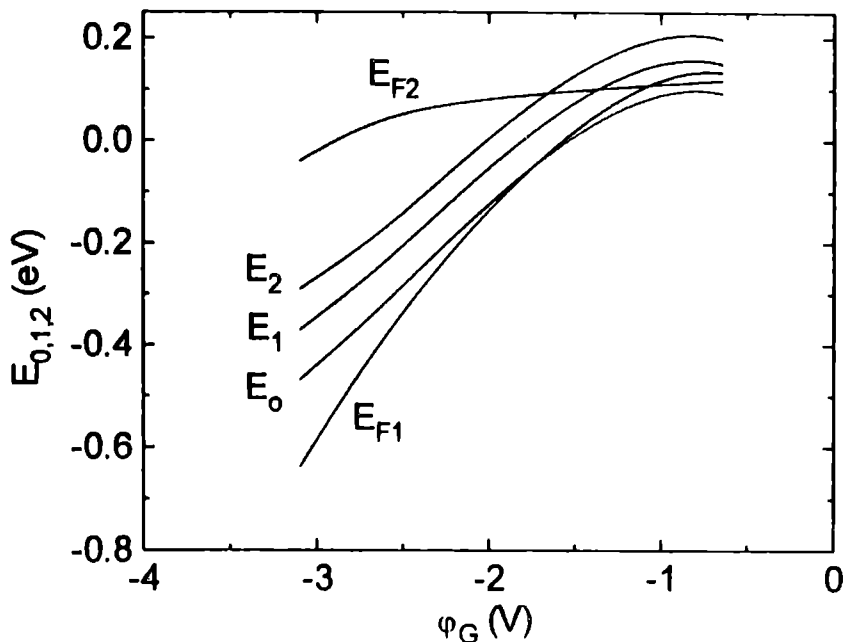


Fig.V.5 Dependența spectrului energetic 2DEG ($k_x=k_y=0$) de potențialul porții, pentru o structură cu interfață dublă $Al_{x1}Ga_{1-x1} / GaAs / Al_{x2}Ga_{1-x2}As$. Calculul a fost efectuat urmând modelul analitic pe care l-am discutat. Referința este energia benzii de conducție în GaAs, la interfața TOP. Pentru E_{F2} referința este energia benzii de conducție în GaAs, la interfața inferioară. Parametrii structurii sunt aceiași ca în textul ce însoțește Fig.V.2.

Este interesant să observăm că energiile de excitare interbandă ΔE_{10} și ΔE_{21} sunt controlate de tensiunea de poartă (Fig.V.6) Acest efect deschide perspectiva unor aplicații importante în tehnica spectroscopiei în infraroșul îndepărtat.

Trebuie de asemenea să observăm că, în regiunea concentrațiilor ridicate, energiile de excitare au valori apropiate de energia fononilor optici (60 meV). În urma interacției cu fononii, purtătorii efectuează tranziții interbandă și mobilitatea este afectată. Interacția cu fononii atenuează eficacitatea porții (electronii din sub-benzile cu energie ridicată se află, în medie, la o distanță mai mare de interfață).

Eficacitatea fotodetectorilor este drastic alterată de procesele de interacție cu fononii. La temperatura camerei, observarea dezexcitărilor radiative este extrem de dificilă pentru că timpul de relaxare asociat interacțiilor fononice este cel care hotărăște timpul de viață al stării excitate.

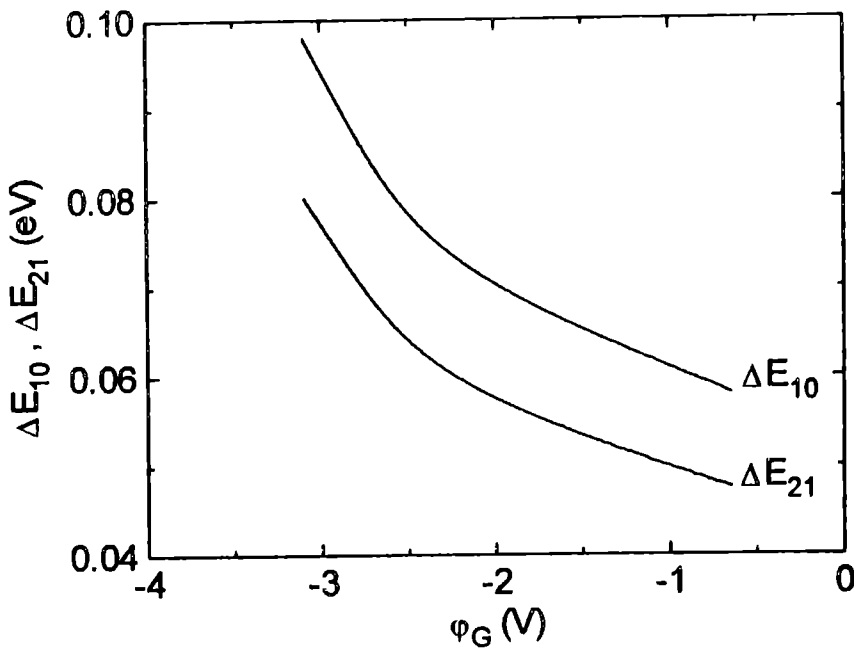


Fig.V.6 Dependența energiilor de excitație ΔE_{10} și ΔE_{21} de potențialul porții. Parametrii sunt aceiași ca în Fig.V.2.

V.7 Concordanța rezultatelor cu datele experimentale și teoretice

În continuare dorim să analizăm în ce măsură predicțiile modelului analitic sunt conforme cu cele ale calculului numeric selfconsistente. Pentru comparație am ales, dată fiind acuratețea lor, două modele selfconsistente: primul dintre ele a fost prezentat de Inoue și col. [85INO] iar al doilea, care include cinci sub-benzi energetice, de Jaffe și col. [87JAF].

Pentru calculul discontinuității benzilor energetice $\Delta E_{c(1,2)}$ și al permitivităților dielectrice $\epsilon_{1,2}$, dependente de fracția molară x a aluminiului în aliajele AlGaAs vom utiliza dependența [85OKU]:

$$\Delta E_{c(1,2)} = 0.67\Delta E_g = 0.835x_{1,2} \quad (\text{V.24a})$$

$$\epsilon_{1,2} = (12.88 - 2.82x_{1,2})\epsilon_0 \quad (\text{V.24b})$$

Fig.V.7 prezintă o comparație între dependența concentrațiilor n_s , n_{s1} , n_{s2} , de tensiunea de poartă, conformă modelului prezentat și cea prezisă de modelele numerice selfconsistente. Parametrii structurii au fost aleși identici cu cei din [85INO]. Așa cum am precizat, modelul analitic prezice o ușoară depopulare a canalului inferior, simultană cu activarea populării în TC. Cu toate acestea, valorile concentrației totale se află într-o concordanță excelentă cu cele calculate numeric, chiar pentru tensiuni de poartă apropiate de cele de prag, unde concentrația superficială este scăzută.

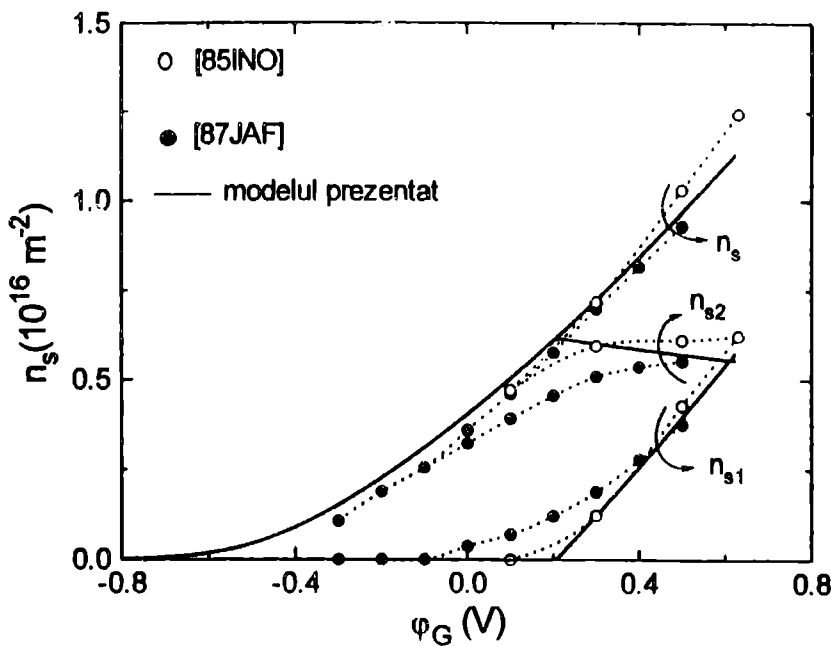


Fig.V.7 Dependența densităților superficiale n_{s1} , n_{s2} , n_s , de tensiunea de poartă. {modelul analitic - linie continuă, [85INO] - cercuri goale, [87JAF] - cercuri pline}. Parametrii structurii sunt: $N_{D1}=N_{D2}=10^{18}/\text{cm}^3$, $d_{j1,j2}=100\text{\AA}$, $N_A=0$, $x_{1,2}=0.36$, $d_1=350\text{\AA}$, $d_2=150\text{\AA}$, $d_w=300\text{\AA}$, $V_s=1\text{eV}$, $V_{F1,F2}=96\text{ meV}$.

Fig. V.8 vă prezintă o comparație între rezultatele modelului propus și cele ale unui model analitic care presupune că cele două canale 2DEG sunt independente [88CAZ]. Se constată că între rezultatele celor două modele există o concordanță bună. Cu toate acestea, în apropierea tensiunii de prag, diferențele sunt apreciabile. *Modelul analitic pe care vi l-am prezentat arată că densitatea electronilor scade mai lent decât cea prezisă de Cazaux și col. De asemenea, în domeniul tensiunilor de poartă mari, concentrația prezisă de modelul nostru este mai mică decât cea estimată în [88CAZ].* Valorile măsurate de ei pentru curentul de drenă și determinările bazate pe efect Hall ale concentrației totale n_s , par să confirme predicțiile modelului analizat de noi.

V.8 Influența parametrilor geometrici

În continuare, vom utiliza modelul analitic pentru a analiza influența parametrilor geometrici asupra performanțelor structurii. Figurile V.9, V.10 și V.11 arată că *valoarea maximă a concentrației superficiale stocate în groapa de potențial depinde esențial neliniar de grosimea d_{j1} .* Creșterea gradului de decuplare coulombiană între electronii 2DEG și donorii ionizați conduce la descreșterea concentrației maxime și la creșterea tensiunilor de prag și critică (aceasta înseamnă că ele sunt mai puțin negative).

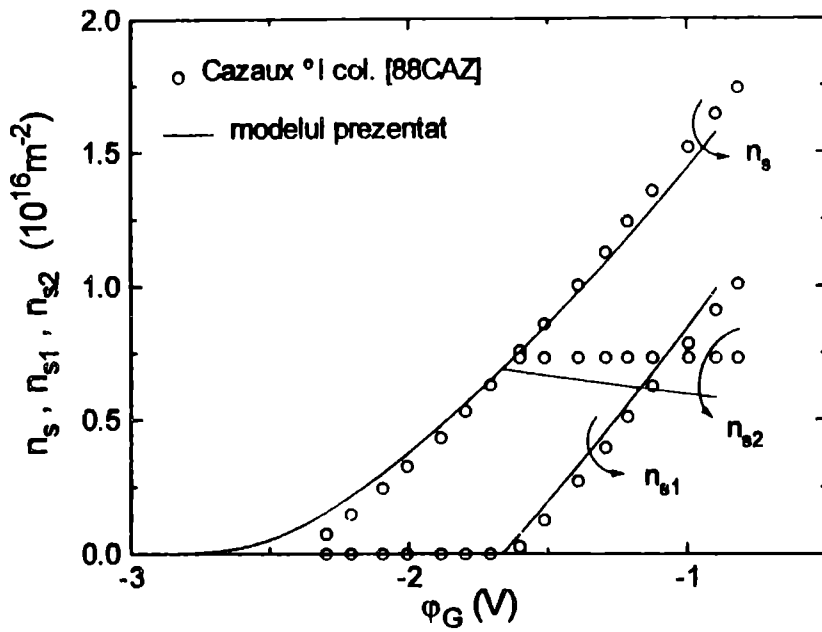


Fig.V.8 Comparație între rezultatele modelului analizat de noi (linie plină) și cele ale modelului prezentat de Cazaux și col. [88CAZ] (cercuri).

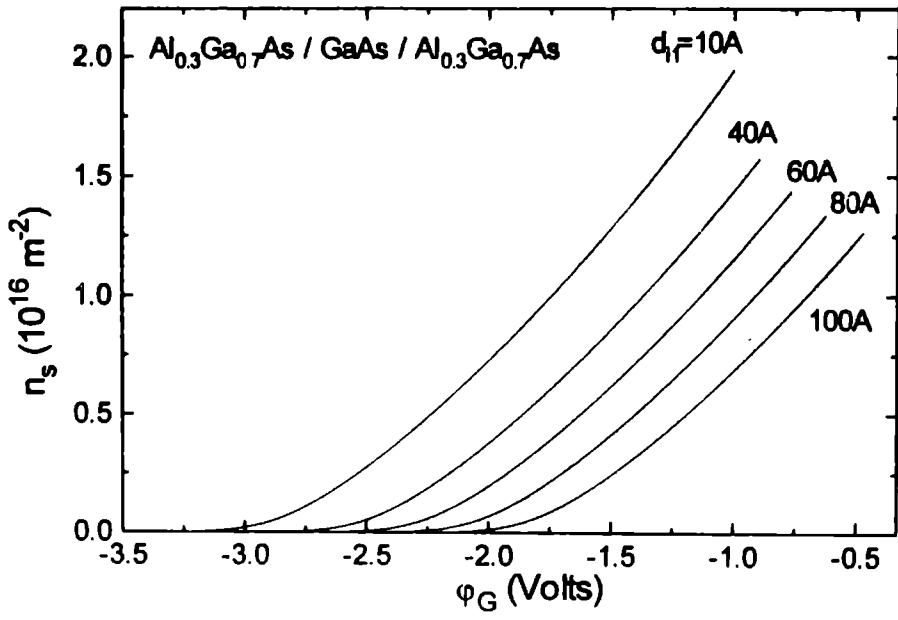


Fig.V.9 Influența grosimii stratului de decuplare coulombiană d_{i1} asupra caracteristicii $n_s = n_s(\phi_G)$. Ceilalți parametri au aceleași valori ca cele din textul figurii V.2. Se observă că tensiunea de prag și cea critică sunt influențate apreciabil de grosimea d_{i1} , acest efect având aplicații în proiectarea structurilor DCFL (Direct Coupled FET Logic)

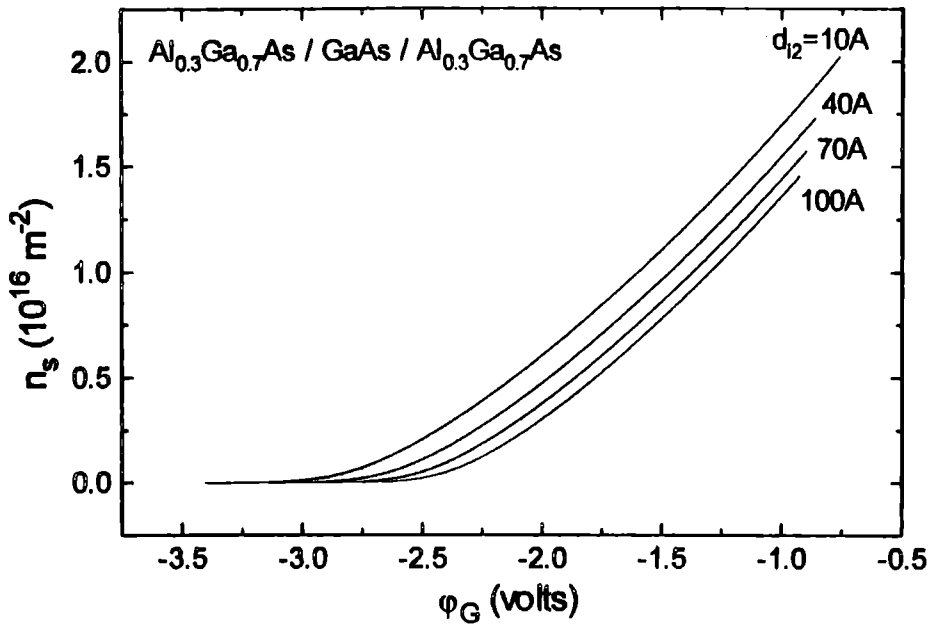


Fig.V.10 Influența grosimii de decuplare coulombiană d_{12} asupra caracteristicii $n_s = n_s(\varphi_G)$. Ceilalți parametri au aceleași valori cu cele prezentate în textul figurii V.2. Dacă aceste rezultate sunt comparate cu cele prezentate în Fig.V.10, constatăm că influența decuplării coulombiene la interfața inferioară este considerabil mai mică.

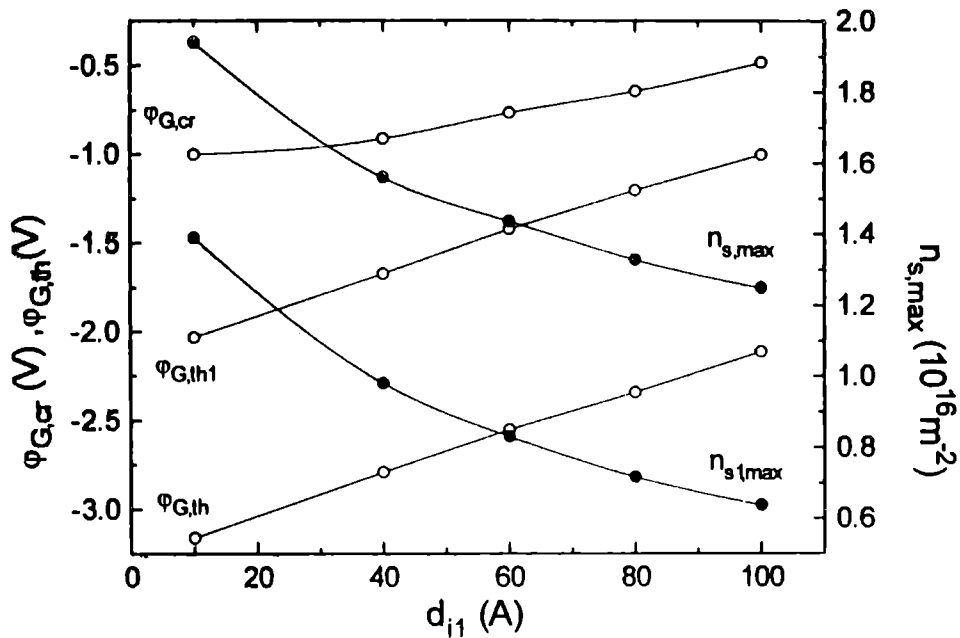


Fig.V.11 Dependența tensiunii critice și de prag de gradul decuplării coulombiene la interfața TOP (cercuri goale). Cu cercuri pline este prezentată dependența de d_{11} a concentrațiilor maxime în grupa de potențial. Ceilalți parametri au aceleași valori ca în Fig.V.2.

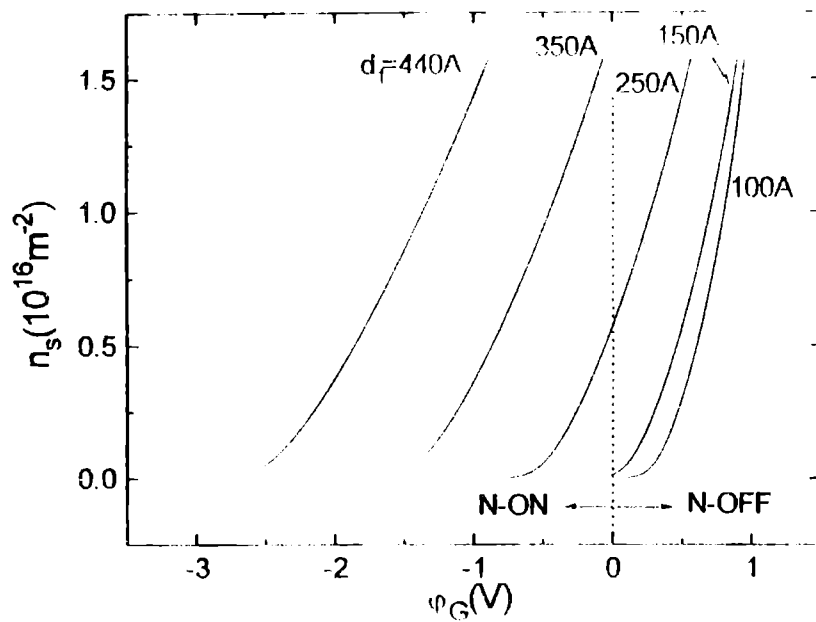


Fig.V.12 Influența grosimii stratului superior (TOP) din AlGaAs asupra caracteristicilor $n_s = n_s(\varphi_G)$. Linia punctată separă regimul de lucru N-ON de regimul de lucru N-OFF. Se observă clar că tensiunea de blocare se apropie de zero, pe măsură ce scade grosimea d_1 a stratului din AlGaAs. Ceilalți parametri au aceleași valori ca în Fig.V.2

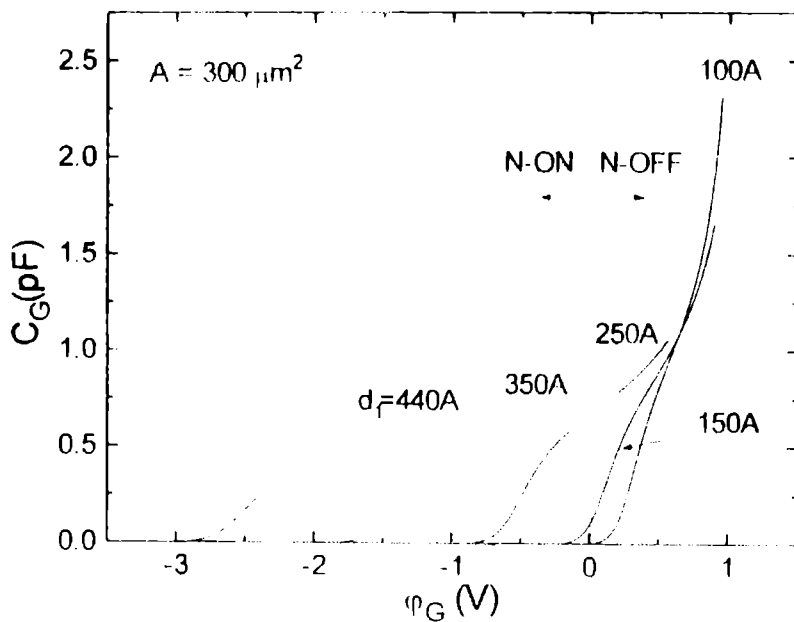


Fig.V.13 Influența grosimii d_1 asupra capacității de poartă a structurilor DH-HEMT. Aria efectivă a fost stabilită la 300 micrometri pătrați (o valoare de ordinul celor uzuale). Observați că spre deosebire de regimul N-ON, pentru concentrații ridicate, în regimul de operare N-OFF capacitatea crește rapid.

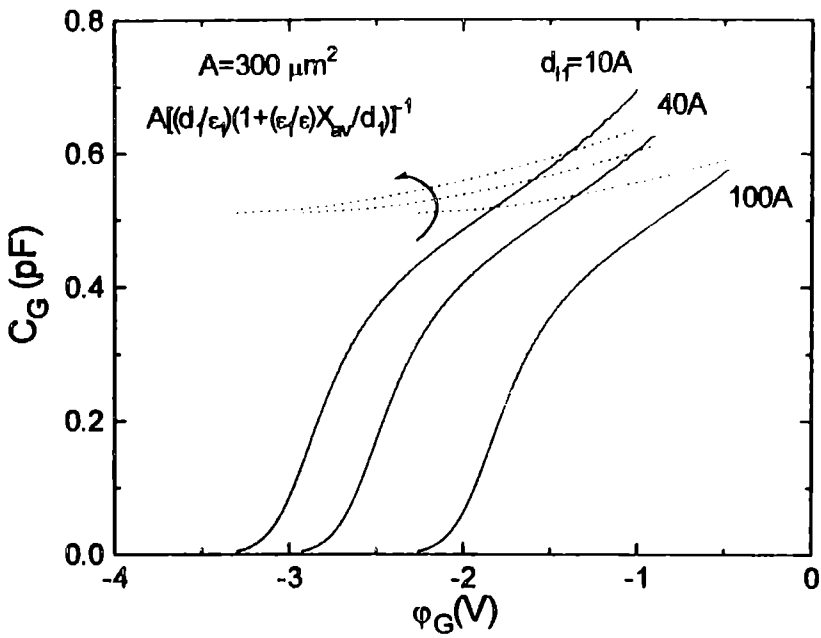


Fig.V.14 Influența gradului de decuplare coulombiană (la interfața TOP) asupra dependenței de potențialul porții a capacității DH-HEMT . Ceilalți parametri au aceleași valori ca în Fig.V.2.

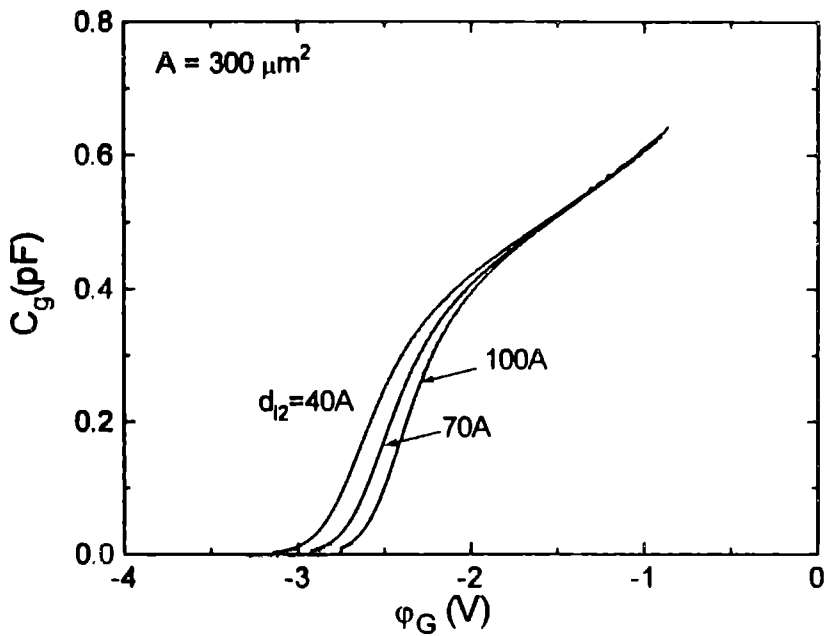


Fig.V.15 Influența gradului de decuplare coulombiană (la interfața BOTTOM) asupra dependenței capacității structurii de potențialul porții. Ceilalți parametri au aceleași valori ca în Fig.V.2. Comparând aceste rezultate cu cele din Fig.V.14 se constată că, la tensiuni mari de poartă (mai apropiate de zero), gradul de decuplare coulombiană la interfața inferioară practic nu influențează valorile capacității.

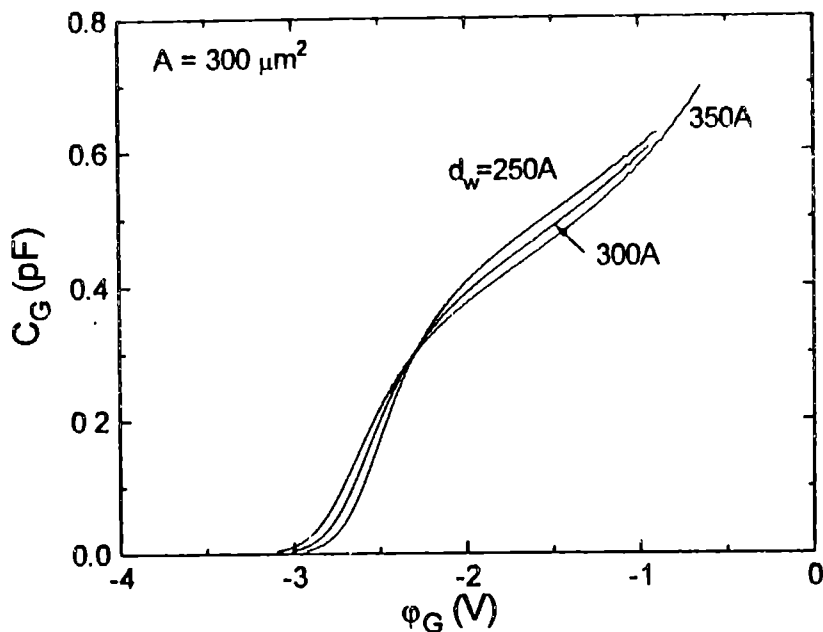


Fig.V.16 Influența lărgimii gropii de potențial (GaAs) asupra dependenței de tensiunea de poartă a capacității HD-HEMT. Exceptând lărgimea gropii de potențial, ceilalți parametri au aceleași valori ca în Fig.V.2. În mod remarcabil, la concentrații ridicate, lărgimea gropii de potențial nu influențează considerabil valoarea capacității de poartă.

Remarcăm că *dependența $\phi_{G,th}(d_{1l})$ este aproape linară*, acest efect având aplicații deosebite în proiectarea circuitelor DCFL (Direct Coupled FET Logic).

Fig.V.13 prezintă influența grosimii d_1 asupra dependenței capacității de tensiunea de poartă. Dependențele din Fig.V.13 evidențiază că densitatea electronilor 2DEG are o dependență esențial neliniară de tensiunea de poartă. *Pe măsură ce d_1 scade, această comportare se accentuează și structura este adusă în regim de operare N-OFF*. Așa cum era de așteptat, tensiunea de prag depinde de grosimea d_1 a stratului superior din AlGaAs. Structura lucrează în regim N-OFF pentru $d_1 \cong 100 \text{Å}$. Dacă $d_1 > 300 \text{Å}$, regimul de funcționare este de tip N-ON.

O observație interesantă: lărgimea gropii de potențial nu reprezintă un parametru critic pentru designul structurii. Rezultatele prezentate în Fig.V.16 arată că, în domeniul concentrațiilor ridicate, o creștere cu 100 Å a lărgimii gropii de potențial (de la 250 Å la 350 Å, ceea ce reprezintă o variație relativă de aproximativ 70%), nu influențează valorile capacității în mod semnificativ.

V.9 Dependența curentului de drenă de potențialul drenei și al porții

Cunoașterea dependenței de potențialul porții și al drenei a curentului datorat electronilor 2DEG, care circulă între sursă și drenă, se dovedește esențială în toate aplicațiile structurilor de tip FET. Dintr-un anumit punct de vedere, putem afirma că scopul final al studiului teoretic îl reprezintă tocmai determinarea acestei dependențe.

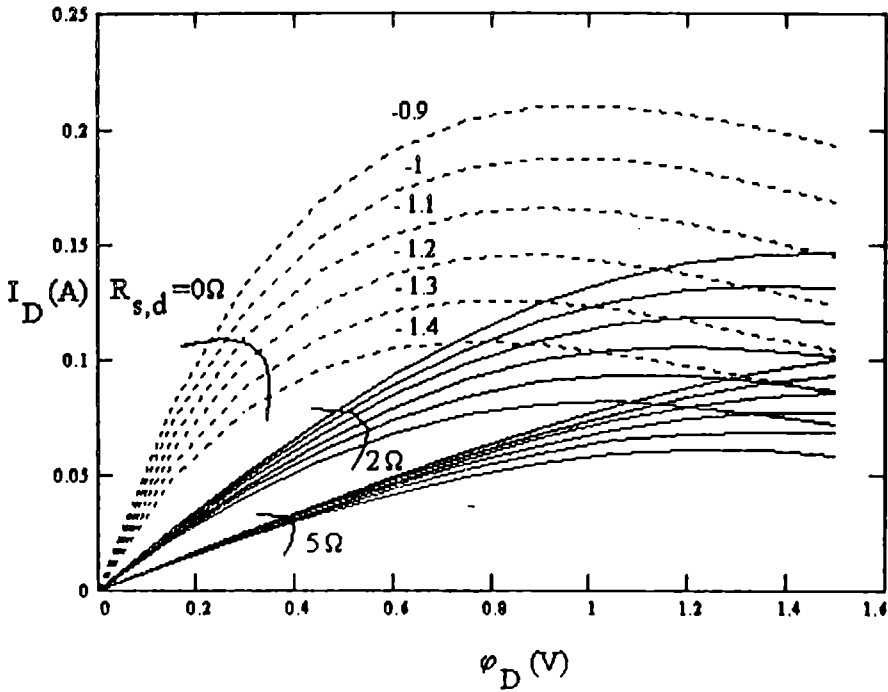


Fig.V.17 Dependența curentului de drenă de potențialul drenei, pentru diferite valori ale potențialului de poartă (caracteristica statică) Cifrele din dreptul curbelor familiei asociate tranzistorului ideal indică potențialul porții Schottky, măsurat în raport cu sursa considerată la potențial nul. Aceste curbe sunt reprezentate punctat și corespund cazului în care rezistențele contactelor de sursă și de drenă sunt nule, $R_S=R_D=0$. Cu linie plină sunt reprezentate, la aceleași tensiuni de poartă, dependențele corespunzătoare cazurilor $R_S=R_D=2\Omega$ și $R_S=R_D=5\Omega$. Structura este aceeași cu cea analizată în Fig.V.2 Ceilalți parametri sunt: lungimea porții $L=1.5$ micrometri, lărgimea porții 300 micrometri, mobilitatea la câmpuri mici $\mu=0.85\text{m}^2/\text{Vs}$, viteza de saturație $v_s=2\cdot 10^5\text{m/s}$, câmpul electric critic $E_c=3\cdot 10^5\text{V/m}$. Se observă că micșorarea vitezei în lungul canalului 2DEG, micșorare datorată regiunilor de câmp înalt, produce o ușoară scădere a curentului în regiunea de saturație. Acest efect este mai pronunțat în cazul rezistențelor mici ale contactelor de sursă și de drenă. Tensiunea de saturație crește odată cu rezistența contactelor de sursă și de drenă.

Din punct de vedere al modelării teoretice, această etapă este, având în vedere conceptele implicate, distinctă de cele prezentate de noi în capitolul al patrulea. Ea este în același timp dificilă pentru că implică o cunoaștere destul

energetic și a interacției cu fononii superficiali și de volum. *Chiar dacă adoptăm modele simplificate, în cazul includerii influenței rezistențelor contactelor de sursă și de drenă, sunt necesare calcule destul de complicate.*

Rezultatele pe care vi le prezentăm în Fig.V.17 au fost obținute utilizând pentru dependența de câmp a vitezei electronilor 2DEG o relație de tip Trofimenkoff $v(E_y)=[\mu E_y/(1+E_y/E_{yC})]$, unde E_y este valoarea câmpului în lungul canalului (dependentă de poziția y în canal) iar E_{yC} este valoarea câmpului electric critic. În aceste condiții, tranzistorul intern se poate modela destul de comod, însă pentru includerea efectelor rezistenței de sursă și de drenă (foarte importante) trebuie rezolvată numeric o ecuație integrală.

Dorim să observați prin analiza datelor numerice prezentate în Fig. V.17 că *valorile rezistențelor R_S și R_D influențează drastic atât transconductanța $g_m=dI_D/d\varphi_G$ cât și conductanța $dI_D/d\varphi_G$ tranzistorului extern (tranzistorul intern nu este influențat de R_S și R_D)*

V.10 Estimarea frecvenței de tăiere

Odată determinate caracteristicile statice, putem estima **frecvența de tăiere a câștigului în curent**. Pentru aceasta, vom utiliza o relația [66FIS]:

$$v_T \cong g_m / 2\pi C_G \quad (V.25)$$

În cazul structurii analizate în Fig.V.17, la $\varphi_D = 0.7$ V și $R_S=R_D=2$ Ω , veți găsi cu ajutorul relației (V.25) că ea se situează în jurul valorii de 25GHz. ***Această frecvență de tăiere este de aproape treizeci de ori mai mare decât a celor mai performante structuri FET bazate pe conceptele tradiționale.*** În mod clar, regimul de funcționare trebuie să realizeze un compromis între creșterea capacității odată cu creșterea concentrației 2DEG (determinată de tensiunea de poartă) și creșterea transconductanței (determinată de creșterea tensiunii de drenă). *Activarea canalului parazit MESFET conduce la fenomenul de compresie a transconductanței și la creșterea rapidă a capacității, adică la scăderea frecvenței de tăiere.*

BIBLIOGRAFIE

- [39STR]. I. N. Stranski and L. Krastanow, Akad. Wiss. Lit. Mainz Math. Natur K1 lb 146, 797 (1939).
- [52CHA]. R. G. Chambers, Proc. Phys. Soc. (London) A65, 458 (1952).
- [56LUT] J. M. Luttinger, Phys. Rev., 102, 1030 (1956).
- [57KOH]. W. Kohn in *Solid State Physics*, Editors F. Seitz and D. Turnbull, Academic, New York, Vol.5, 257 (1957).
- [59ROT] L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, Phys. Rev. 114, 90 (1959).
- [61FEY]. R. P. Feynman, *The Theory of Fundamental Processes*, W. A. Benjamin, Inc. New York (1961).
- [61BAR] J. Bardeen, Phys. Rev. Lett., 6, 57 (1961).
- [61HAR] W. A. Harrison, Phys. Rev, 123, 85 (1961).
- [63AND]. P. W. Anderson, *Concepts in Solids*, W.A. Benjamin, Inc (1963).
- [64ABR]. *Handbook of Mathematical Functions*, Edited by M. Abramowitz and I.A. Stegun, U.S. GPO, Washington D.C. (capitolul 10) (1964).
- [65FEY]. R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, Inc. (1965).
- [65LAN]. L. D. Landau, E. M. Lifșitș, *Mecanica cuantică, teoria nerelativistă*, Editura Tehnică, București (1965).
- [66GOB]. G. W. Gobeli and F. G. Allen, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press, New York), Vol. 2, 263 (1966).
- [66FAN]. F. F. Fang, and W. E. Howard, Phys. Rev. Lett. 16, 797 (1966).
- [66BEN] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966).
- [69ESA]. L. Esaki and R. Tsu. IBM Research Note RC-2418 (1969).

[66KAN] E. O. Kane, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic Press, New York), Vol 1, 75 (1966).

[70ESA]. L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* 14, 61 (1970).

[70aESA]. L. Esaki, L.L. Chang and R. Tsu, in *Proceedings 12th International Conference on Low Temperature Physics, Kyoto, Japan, September 1970*, p.551 (Keigaku Publishing Co., Tokio, Japan).

[70MER]. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc. (1970).

[70BLA]. A. E. Blakeslee and C. F. Aliotta, *IBM J. Res. Develop.* 14, 686 (1970).

[71CHO]. A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.* 19, 467 (1971).

[71APP]. J. Appelbaum and G. A. Baraff, *Phys. Rev. B*, Vol.4, No.4, 1235 (1971).

[71HED]. L. Hedin and B. I. Lundqvist, *J. Phys. C* 4, 2064 (1971).

[72WOO]. J. M. Woodall, *J. Cryst. Growth* 12, 32 (1972).

[72ESA]. L. Esaki, L. L. Chang, W. E. Howard, and V. L. Rideout, *Proceedings of the 11th International Conference on the Physics of Semiconductors, Warsaw, Poland, 1972*, edited by the Polish Academy of Sciences (PWN Polish Scientific Publishers, Warsaw, Poland, 1972), p.431.

[72DÖH]. G. H. Döhler, *Phys. Status Solidi (b)* 52, 79 și 533 (1972).

[72STE]. F. Stern, *J. Vac. Sci. Technol.* 9, 752 (1972).

[72aSTE]. F. Stern, *Phys. Rev. B* 5, 4891 (1972).

[72CAR]. M. Cardona, *Atomic Structure and Properties of Solids*, editor E. Burstein, Academic, New York, 514 (1972).

[73TSU]. R. Tsu, L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* 22, 562 (1973).

- [74GNU]. U. Gnutzmann and K. Clauseker, *Appl. Phys.* 3, 9 (1974).
- [74CHA]. L. L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* 24, 593 (1974).
- [74DIN]. R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* 33, 827 (1974).
- [74AND]. T. Ando and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* 36, 959 (1974).
- [75KAS]. E. Kasper, H. J. Herzog and H. Kibbel, *Appl. Phys.* 8, 199 (1975).
- [75DIN]. R. Dingle, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.* 34, 1327 (1975).
- [75ZIE]. J. P. van der Ziel, R. Dingle, R. C. Miller, W. Wiegmann, and W. A. Nordland Jr., *Appl. Phys. Lett.* 26, 463 (1975).
- [75TSU]. R. Tsu, L. L. Chang, G. A. Sai-Halasz and L. Esaki, *Phys. Rev. Lett.* 34, 1509 (1975).
- [76GRE]. J. E. Greene, C. E. Wickersham, and J. L. Zilko, *J. Appl. Phys.* 47, 2289 (1976).
- [76GOS]. A. C. Gossard, P. M. Petroff, W. Weigmann, R. Dingle, and A. Savage, *Appl. Phys. Lett.* 29, 323 (1976).
- [77COH]. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Vol. I, Herman, Paris (1977).
- [77REZ]. E. A. Rezek, N. Holonyak, Jr., B.A. Vojak, G. E. Stillman, J. A. Rossi, D. L. Keune, and J. D. Fairing, *Appl. Phys. Lett.* 31, 288 (1977).
- [77ELT]. A. H. Eltoukhy, J. L. Ziiko, C. E. Wickersham, and J. E. Greene, *Appl. Phys. Lett.* 31, 156 (1977).
- [77CHA]. L. L. Chang, H. Sakaki, C. A. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. Lett.* 38, 1489 (1977).
- [77SAK]. H. Sakaki, L. L. Chang, R. Ludeke, C.-A. Chang, G. A. Sai-Halasz and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* 31, 211 (1977).

- [77HAL]. G. A. Sai-Halasz, R. Tsu and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* 30, 651 (1977).
- [78DUP]. R. D. Dupuis and P. D. Dapkus, *Appl. Phys. Lett.* 32, 295 (1978).
- [78HOL]. N. Holonyak, Jr., R. M. Kolbas, E. A. Rezek, and R. Chin, *J. Appl. Phys.* 49, 5392 (1978).
- [78DIN]. R. Dingle, H. L. Stormer, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 33, 665 (1978).
- [78SAL]. G. A. Sai-Halasz, L. Esaki and W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* 18, 2812 (1978).
- [78FER]. D. K. Ferry, *Surf. Sci.* 75, 86 (1978).
- [78CAS]. H. C. Casey and M. B. Panish, *Heterostructure Lasers*, Academic, New York (1978).
- [79SCH]. J. N. Schulman and T. C. McGill, *Appl. Phys. Lett.* 34, 883 (1979).
- [79PET]. P. M. Petroff, A. C. Gossard, A. Savage, and W. Wiegmann, *J. Cryst. Growth* 46, 172 (1979).
- [79BUR]. E. Burstein, A. Pinczuk and S. Buchner, *Physics of Semiconductors 1968*, Institute of Physics Conference Series 43, London, 1979, p.1231.
- [79FLO]. V. Florescu, *Mecanica cuantică*, partea I, Tipografia Univ. București, București (1979).
- [79ABS]. G. Abstreiter and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* 42, 1308 (1979).
- [79PIN]. A. Pinczuk, H. L. Stormer, R. Dingle, J. M. Worlock, W. Wiegmann, and A. C. Gossard, *Solid State Commun.* 32, 1001 (1979).
- [79RAY]. A. Raymond, J. L. Robert, and C. Bernard, *J. Phys. C* 12, 2289 (1979).
- [79HES]. K. Hess, *Appl. Phys. Lett.* 35, 484 (1979).

- [80KIN]. H. Kinoshita and H. Fujiyasu, *J. Appl. Phys.* 51, 5845 (1980).
- [80COL]. C. Colvard, R. Merlin, M. V. Klein, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 38, 1489 (1977).
- [80TSU]. D. C. Tsui and Th. Englert, *Phys. Rev. Lett.* 44, 341 (1980).
- [80DEL]. D. Delagebeaudeuf, P. Delescluse, P. Etienne, M. Laviron, J. Chaplart, and N. T. Linh, *Electron. Lett.* 16, 667 (1980).
- [80MIM]. T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fujii and K. Nanbu, *Jpn. J. Appl. Phys.* 19, L225 (1980).
- [80KLI]. K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).
- [80CHI] R. Chin, N. Holonyak, Jun. G. E. Stillman, *Electronics Letters*, 16, 467 (1980).
- [80SAK]. H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* 19, L735 (1980).
- [80KRO]. H. Kroemer, W. T. Chien, J. S. Harris, Jr., and D. Edwall, *Appl. Phys. Lett* 36, 295 (1980).
- [80WUM]. C. M. Wu and E. S. Yang, *J. Appl. Phys.* 51, 2261 (1980).
- [81KIN]. H. Kinoshita, S. Takaoka, K. Murase, and H. Fujiyasu, *Proc. of 2nd International Symposium on Molecular Beam Epitaxy and Related Clean Surface Techniques*, Tokio, Japan, p.61.
- [81FLO]. V. Florescu, *Mecanica cuantică, partea a II-a*, Tipografia Univ. București, București (1981).
- [81NAG]. M. Naganuma, Y. Suzuki, and H. Okamoto, in *Proc. Int. Symp. GaAs and Related Compounds*, ed. by T. Sugano (Institute of Physics, University of Reading, Berkshire, 1981) p. 125.
- [81VOI]. P. Voisin, G. Bastard, C. E. T. Goncalves da Silva, M. Voos, L. L. Chang, and L. Esaki, *Solid State Commun.* 39, 79 (1981)

- [81CHIA]. L. L. Chang, N. J. Kawai, E. E. Mendez, , C.-A. Chang and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* 38, 30 (1981).
- [81MAD]. A. Madhukar and J. Delgado, *Solid State Commun.* 37, 199 (1981).
- [81DÖH]. G. H. Döhler, H. Künzle, D. Olego, K. Ploog, P. Ruden, H. J. Stolz and G. Abstreiter, *Phys. Rev. Lett.* 47, 864 (1981).
- [81ESA]. L. Esaki, L. L. Chang and E. E. Mendez, *Jpn. J. Appl. Phys.* 20, L529 (1981).
- [81TSA]. W. T. Tsang, *Appl. Phys. Lett.* 39, 786 (1981).
- [81TSU]. D. C. Tsui and A. C. Gossard, *Appl. Phys. Lett.* 38, 550 (1981).
- [81DRU]. T. J. Drummond, H. Morkoç, K. Hess, and A. Y. Cho, *J. Appl. Phys.* 52, 5231 (1981).
- [81BAS]. G. Bastard, *Phys. Rev.* B24, 5693 (1981).
- [82TSU]. D. C. Tsui, A. C. Gossard, B. F. Field, M. E. Cage and R. F. Dziuba, *Phys. Rev. Lett.* 48, 3 (1982).
- [82aTSU]. D. C. Tsui, H. L. Störmer, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* 48, 1559 (1982).
- [82ESA]. L. Esaki, in *Recent Topics in Semiconductor Physics*, Editors H. Kamimura and Y. Toyozawa, World Scientific, p.1 (1982).
- [82MEN]. E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang, L. Esaki, H. Morkoç and R. Fisher, *Phys. Rev.* B26, 7101 (1982).
- [82OSB]. G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.* 53, 1586 (1982).
- [82GOU]. P. L. Gourley and R. M. Biefeld, *J. Vac. Sci. Technol.* 21, 473 (1982).
- [82KIM]. J. Y. Kim and A. Madhukar, *J. Vac. Sci. Technol.* 21, 526 (1982).

- [82MAN]. H. M. Manasevit, I. S. Gergis, and A. B. Jones, *Appl. Phys. Lett.* 41, 464 (1982).
- [82FAU]. J. P. Faurie, A. Million, and J. Piagnet, *Appl. Phys. Lett.* 41, 713 (1982).
- [82PAR]. D. L. Partin, *J. Vac. Sci. Technol.* 21, 1 (1982).
- [82BAS]. G. Bastard, *Phys. Rev. B*, 24, 4714 (1981).
- [82aBAS]. G. Bastard, *Surf. Sci.* 113, 165 (1982).
- [82bBAS]. G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. B* 26, 1974 (1982).
- [82cBAS]. G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, *J. Vac. Sci. Technol.* 21, 531 (1982).
- [82GIB]. H. M. Gibbs, S. S. Tarng, J. L. Jewell, D. A. Weinberger, K. Tai, A. C. Gossard, S. L. McCall, a. Passner, and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 41, 221 (1982).
- [82CAP]. F. Capasso, W. T. Tsang, A. L. Hutchinson, and G. F. Williams, *Appl. Phys. Lett.* 40, 38 (1982).
- [82DEL]. D. Delagebeaudcuf and N. T. Linh, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-29, 955 (1982).
- [82LIU]. Y. Z. Liu, R. J. Anderson, R. A. Milano, and M. J. Cohen, *Appl. Phys. Lett.* 40, 967 (1982).
- [82PLO]. K. Ploog, *Ann. Rev. Mat. Science* 12, 123 (1982).
- [83GRE]. R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.* 45, 831 (1983).
- [83aGRE]. R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.* 45, 825 (1983).
- [83BRU]. M. A. Brummell, R. J. Nicholas, J. C. Portal, M. Razeghi, and M. A. Poisson, *Physica* 117B și 118B, 753 (1983).

- [83LUD]. M. J. Ludowise, W. T. Dietze, C. R. Lewis, N. Holonyak, Jr., K. Hess, M. D. Camras, and M. A. Nixon, *Appl. Phys. Lett.* 42, 257 (1983).
- [83CAM]. M. D. Camras, N. Holonyak, Jr., K. Hess, M. J. Ludowise, W. T. Dietze, and C. R. Lewis, *Appl. Phys. Lett.* 42, 185 (1983).
- [83FRI]. I. J. Fritz, L. R. Dawson, and T. E. Zipperian, *J. Vac. Sci. Technol.* B1, 387 (1987).
- [83MEN]. E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang, L. Esaki, H. Morkoç and R. Fischer, *Physica 117B&118B*, 711(1983).
- [83LAU]. R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1395 (1983).
- [83CAP]. F. Capasso, *J. Vac. Sci. Technol. B* 1, 457 (1983).
- [83TAK]. H. Takaoka, C-A Chang, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Physica 117B&118B*, 741 (1983).
- [83ALT]. M. Altarelli, *Applications of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, editor G. Landwehr, Springer, Berlin, 174 (1983).
- [84ȚIȚ]. S. ȚiȚeica, *Mecanica cuantică*, Editura Academiei, București (1984).
- [84BER]. M. V. Berry, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* 392, 45 (1984).
- [84CHA]. N. Chand, T. Henderson, J. Klem, W. T. Masselink, R. Fischer, Y. C. Chang, and H. Morkoç, *Phys. Rev. B* 30, 4481 (1984).
- [84SAR]. S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* 52, 859 (1984).
- [84KLE]. M. V. Klein, *IEEE J. Quantum Electron.* QE-22, 1760 (1986).
- [84STE]. F. Stern, S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* 30, 840 (1984).
- [84MIL]. R. C. Miller, D. A. Kleinman and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* 29, 7085 (1984).

- [84WAN]. W. I. Wang, E. E. Mendez and F. Stern, *Appl. Phys. Lett.* 45, 639 (1984).
- [85SCH]. J. R. Schrieffer, in *Symposium on Anomalies, Geometry, Topology*, edited by W. A. Bardeen and A.R. White, World Scientific, pp 100-110 (1985).
- [85SUN]. T. Suntola, *Extended Abstract of 16th Conf. Solid. State Devices & Materials (Kobe, Japan)* p.647 (1985).
- [85NIS]. J. Nishizawa, H. Abe and T. Kurabayashi, *J. Electrochem. Soc.* 132, 1197(1985).
- [85KOB]. N. Kobayashi, T. Makimoto and Y. Horikoshi, *Jpn. J. Appl. Phys.* 24, L962, (1985).
- [85LUR]. S. Luryi and F. Capasso, *Appl. Phys. Lett.* 47, 1347 (1985).
- [85GOL]. L. Goldstein *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 47, 1099 (1985).
- [85MOL]. M. Moloney, F. Ponse, and H. Morkoç, *IEEE Trans. Electron Devices*, 32, 1675 (1985).
- [85OKU]. H. Okumura, S. Misawa, S. Yoshida, and S. Gonda, *Appl. Phys. Lett.* 46, 377 (1985).
- [85GUP]. A. Gupta, R. Chen, E. Sovero, and J. Higgins, *IEEE Monolithic Circuits Symp. St. Louis, MO* (1985).
- [85INO]. K. Inoue, H. Sakaki, J. Yoshino, and T. Hotta, *J. Appl. Phys.* 58, 4277 (1985).
- [85TER] J. Tersoff and D. R. Hamann, *Phys. Rev. B* 31, 2 (1985).
- [86HOR]. Y. Horikoshi, N. Kobayashi, and H. Sugiura, in *Two-Dimensional Systems: Physics and New Devices*, Proceedings of the International Winter School Mauterndorf, Austria, February 24-28, 1986, Editors G. Bauer, F. Kuchar, and H. Heinrich, Springer-Verlag, p.2
- [86DRU]. T. J. Drummond, W. T. Masselink, and H. Morkoç, *Proc. IEEE*, june, 773 (1986).

- [86HIC]. T. W. Hickmott, P. M. Solomon, R. Fischer, and H. Morkoç, *J. Appl. Phys.* (1986).
- [86HIK]. K. Hikosaka and Y. Hirachi, *IEEE Trans. Electron Devices* 33, 583(1986).
- [86SAU]. P. Saunier, *IEEE Electron Device Lett.* 33, 503 (1986).
- [86LAN] N. D. Lang, *Phys. Rev. Lett.* 56, 1164 (1986).
- [86BIN] G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber, *Phys. Rev. Lett* 56, 93 (1986).
- [87CAP]. F. Capasso, *Science* 235, Jan. 9, 172 (1987).
- [87RUD]. P. P. Ruden, D. C. Engelhardt, and J. K. Abrokwah, *J. Appl. Phys* 61(1), 294 (1987).
- [87JAF]. M. Jaffe, Y. Sekiguchi, J. Singh, D. Pavlidis, and M. Quillec, *Proc. IEEE/Cornell Conf. Advanced Concepts High Speed Semiconductor Devices Circuits*, 70 (1987).
- [87HAN] P. K. Hansma, J. Tersoff, *J. Appl. Phys.* 61(2), (1987).
- [87MAR] Y. Martin, C. C. Williams, H. K. Wickrama-Singhe, *J. Appl. Phys.* 61, 4723 (1987).
- [88LAN]. L. D. Landau, E. M. Lifșiț, *Fizica statistică*, Editura Tehnică, București (1988).
- [88CHA]. T. Chakraborty, P. Pietiläinen, *The Fractional Quantum Hall Effect*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 85 edited by Klaus von Klitzing (1988).
- [88DRU]. T. J. Drummond, P. L. Gourley, T. E. Zipperian, *Spectrum IEEE*, June, 33 (1988).
- [88SHE]. An-Jui-Shey and W.H. Ku, *IEEE Electron Device Lett.* EDL9, 624(1988).

[88WAN]. G. W. Wang, Y. K. Chen, D. C. Radulescu, and L. F. Eastman, *IEEE Electron Device Lett.* 9, 4 (1988).

[88CAZ]. J. L. Cazaux, G. I. Ng, D. Pavlidis, and H. F. Chau, *IEEE Trans. Electron Devices* 35, 1223 (1988).

[88SÖD]. J. Söderström and T. G. Andersson, *IEEE Electron Device Lett.*, EDL 9(5), 200, (1988).

[89MOR]. N. Mori and T. Ando, *Phys. Rev. B* 40, 6175, (1989).

[89SOL]. F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli, and K. Hess, *J. Appl. Phys.* 66(8), 3892 (1989).

[89CRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, I. Secăreanu, I. Dima, N. Bălțățeanu, în *Proc. of the International Conf. on Solar and Wind Electricity, 2-4 Oct, Bucharest, (1989).*

[89SPA]. I. Spânulescu, P. Cristea, *Studii și Cercetări de Fizică, Tom 41, Nr.5, 537 (1989).*

[89aSPA]. I. Spânulescu, P. Cristea, *Studii și Cercetări de Fizică, Tom 41, Nr.5, 549 (1989).*

[90SPA]. I. Spânulescu, P. Cristea, *Proc. CAS, 81 (1990).*

[91HAA]. M. A. Haase *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 59, 1273 (1991).

[91ALT]. M. Altarelli, *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices* (reprint primit de autor).

[92CRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, I. Secăreanu, N. Bălțățeanu, and S. Spânulescu, *National Physics Conference, September 21-24, Iași, România (1992).*

[92KAS]. M. A. Kastner, *Rev. Mod. Phys.* 64, 849 (1992).

[93RES]. R. Resta, M. Posternak, A. Baldereschi, *Phys. Rev. Lett.* 70, 1010 (1993).

- [93AHA] Y. Aharonov, J. Anandan, L. Vaidman, *Phys. Rev. A* 47/6, 4616 (1993).
- [93KAS]. M. A. Kastner, *Physics Today*, January, 24 (1993).
- [93CRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, I. Secăreanu, V. Ruxandra, S. Spânulescu, N. Bălțățeanu, *J. Mat. Sci. Lett.* 12, 1467 (1993).
- [94DRE]. H. Drexler *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 73, 2252 (1994).
- [94DIT]. W. Dittrich, M. Reuter, *Classical and Quantum Dynamics*, Springer-Verlag (1994).
- [94MAR]. J.-Y. Marzin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 73, 716 (1994).
- [94RES]. R. Resta, *Rev. Mod. Phys.* 66, 809 (1994).
- [94FAI]. J. Faist *et al.* *Science* 264, 553 (1994).
- [94EOI]. E. O'Reilly, *Physics world*, Vol.7, No.7, 24 (1994).
- [95CRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, I. Secăreanu, N. Bălțățeanu, in **Proc. of the Thirteenth European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition**, 23-27 Oct, Nice (1995).
- [95aCRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, I. Secăreanu, **Extended Abstract to IEEE International Electron Devices Meeting**, December 10-13, Washington, USA (1995).
- [95bCRI]. P. Cristea, I. Moise, **Sesiunea Științifică anuală a Facultății de Fizică București, Secțiunea Fizica Solidului**, 9 iunie, 1995.
- [95BRA]. B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Introducere în mecanica cuantică*, Editura Tehnică, București (1995).
- [96NÖT]. R. Nötzel, J. Temmyo, T. Tamamura, T. Fukui, H. Hasegawa, *Europhysics News* 27/4, 148 (1996).
- [96COL]. J.P. Colinge, X. Baie, V. Bayot and E. Grivei, *Solid-St. Electron.* 39, 49 (1996).

[97RES]. R. Resta, Europhysics News 28/1, 18 (1997).

[97CRI]. P. Cristea, S. Spânulescu, I. Spânulescu, and I. Secăreanu, va apărea în Solid State Electronics.

[98aCRI]. P. Cristea, I. Spânulescu, S. Spânulescu, and I. Secăreanu, Balkan Phys. Lett. 6 (1998).

[98BRA]. D. E. N. Brâncuș and G. Stan, Phys. Rev. B, Vol. 57, No. 6, 57 (1998).

VERIFICAT
2007



VERIFICAT
2017

Tiparul s-a executat sub c-da nr. 586/1999,
la Tipografia Editurii Universității din București

ISBN: 973-575-374-X

Lei 17000