

# GaAs, Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, STRUTTURA A BANDE

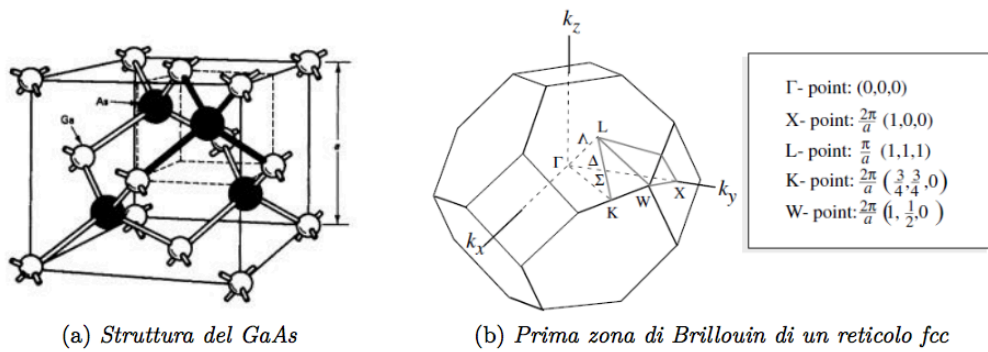


Fig.1 Il reticolo cristallino è quello cubico a facce centrate con costante reticolare 5.65 Å, la base è costituita da una coppia formata da un atomo di Ga e uno di As allineati lungo la diagonale del cubo.

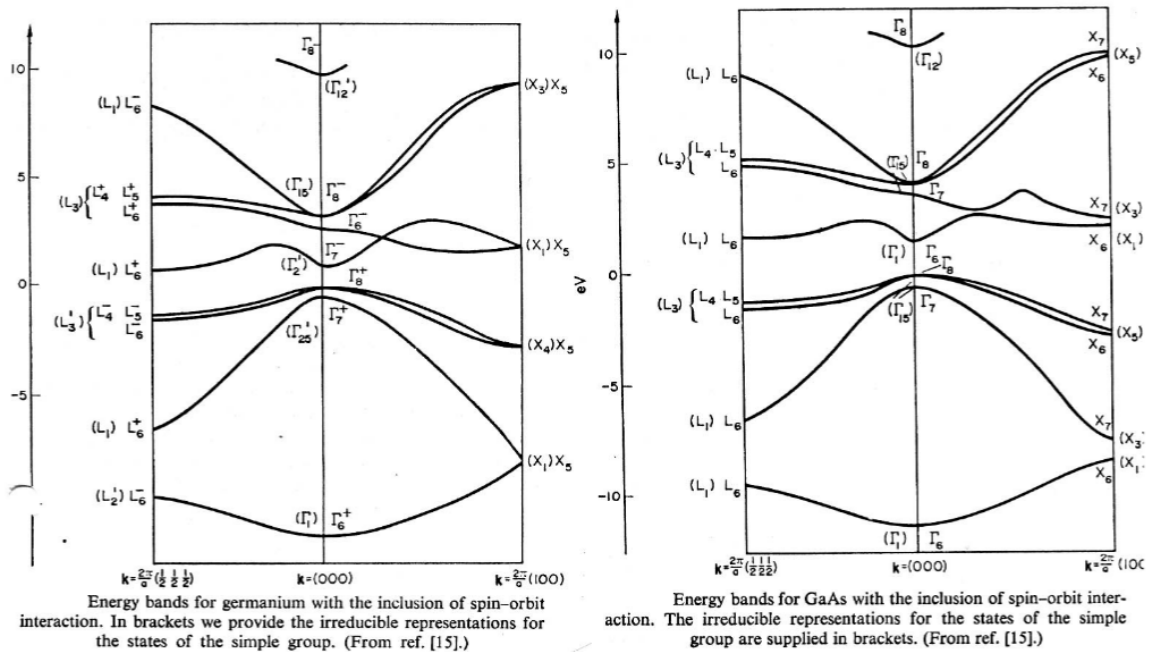


Fig.2 Struttura a bande del GaAs (a destra), lo zero dell'energia è riferito al potenziale chimico (è nella gap tra la banda di valenza e la banda di conduzione)

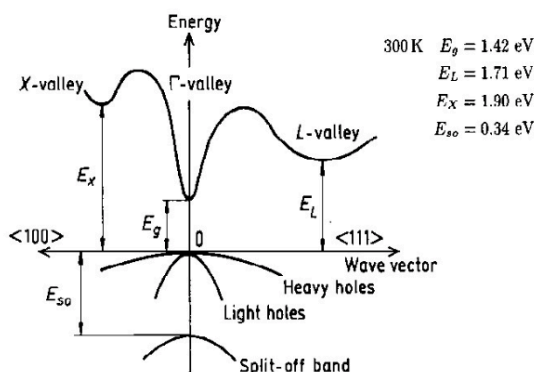
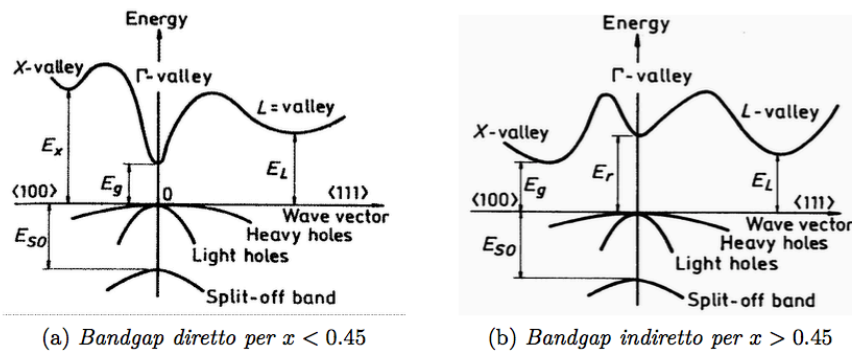


Figura 2.4: Struttura a bande del GaAs

Particolare della struttura a bande del GaAs vicino al centro della zona di Brillouin e nella regione della gap, sotto i massimi delle bande di valenza, sopra il minimo della banda di conduzione.

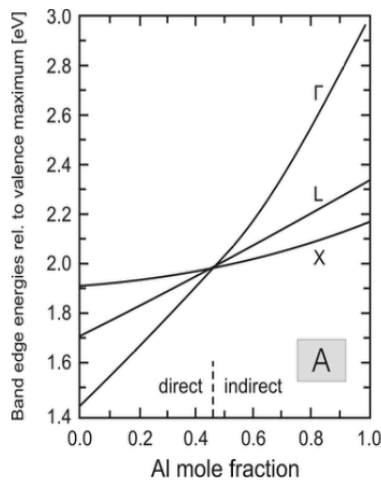
Fig 2 bis



(a) Bandgap diretto per  $x < 0.45$

(b) Bandgap indiretto per  $x > 0.45$

Figura 2.6: Struttura a bande di  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$



Dipendenza del gap energetico dell' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dalla frazione  $x$

La struttura dell' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (con  $x$  tra 0 e 1) si ottiene da quella del GaAs sostituendo a caso una frazione  $x$  di atomi di Ga con atomi di Al. Gli atomi di As rimangono al loro posto. La gap dell' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  dipende da  $x$  come mostrato in figura 3 a fianco (guardare la curva  $\Gamma$ ). Variando  $x$  posso quindi variare a piacimento la gap tra circa 1.4 e 2 eV.

Anche se l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  è una lega non ordinata, e quindi a rigore non periodica, se faccio l'approssimazione del cristallo virtuale (considero nei siti del Ga o Al un potenziale che è la media pesata dei potenziali dei due elementi, e quindi è periodico) posso in prima approssimazione usare gli strumenti dei cristalli Fig. 3

(struttura a bande.....). La differenza tra il potenziale vero non periodico e quello medio periodico produce scattering degli stati di Bloch, e quindi una vita media finita degli stati con  $k$  definito, che si traduce in un'indeterminazione della loro energia. Questa per i nostri fini è in prima approssimazione trascurabile.

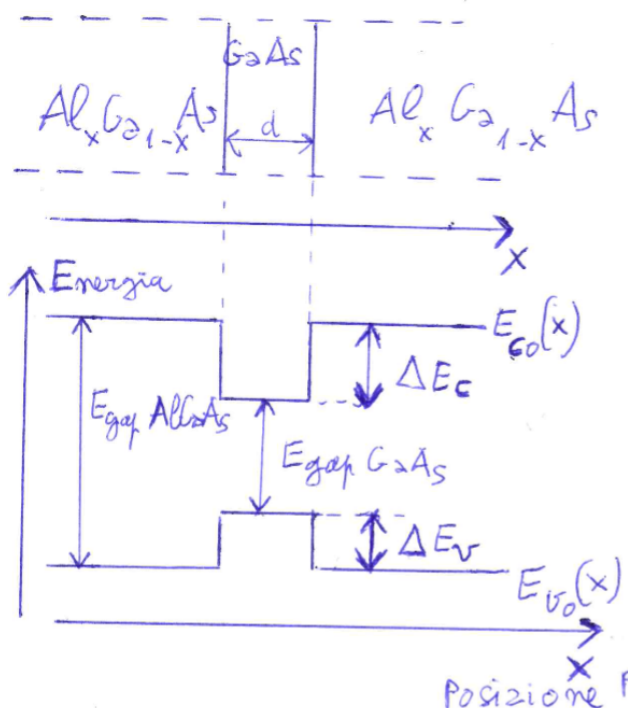


Fig. 3 bis. Andamento del minimo della banda di conduzione  $E_{c0}$  e del massimo della banda di valenza  $E_{v0}$  in funzione della posizione  $x$  in un quantum well di GaAs in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

$\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$  sono le discontinuità (salti in energia) del minimo della banda di conduzione e del massimo della banda di valenza all' interfaccia tra GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Molte informazioni sull'  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  le potete trovare sul sito <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/AlGaAs/index.html>

In particolare

### ***Band Discontinuities at $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ Heterointerface***

#### ***Valence band discontinuity:***

$$\Delta E_v = -0.46x \text{ (eV)}$$

#### ***Conduction band discontinuity:***

$$x < 0.41 \quad \Delta E_c = 0.79x \text{ (eV)}$$

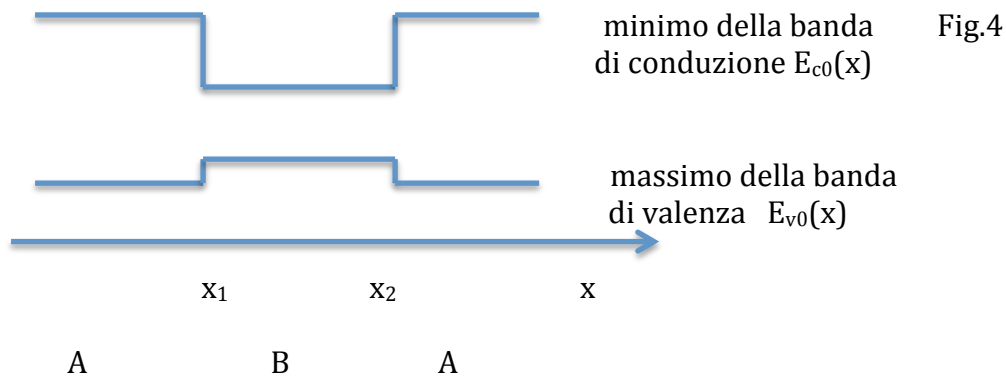
dove  $x$  è la concentrazione di Al e  $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$  sono le discontinuità (salti in energia) del minimo della banda di conduzione e del massimo della banda di valenza all' interfaccia tra GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Massa efficace per il minimo della banda di conduzione  $m_c^* \sim 0.063 m_e$   
(con errore di qualche unità sull'ultima cifra)

Masse efficaci per il massimo della banda di valenza  $m_{lh}^* \sim 0.082 m_e$ ,  $m_{hh}^* \sim 0.51 m_e$  (con errore di qualche unità sull' ultima cifra)

$$\text{con } 1/m^* = 1/\hbar^2 \frac{\delta^2 E(k)}{\delta k^2}$$

Consideriamo un pozzo quantico perpendicolare alla direzione  $x$ . Lungo la direzione  $x$  il cristallo cambia composizione mantenendo lo stesso reticolo cristallino, andando dal materiale A a quello B a  $x_1$  e tornando ad A in  $x_2$ , una fetta di materiale B spessa  $d$  tra due pezzi di materiale A che possiamo assumere semi-infiniti. Il sistema rimane periodico nelle direzioni  $y$  e  $z$ .



Il sistema non è un cristallo periodico, non c'è invarianza traslazionale nella direzione  $x$ , devo trovare approssimazioni che mi permettano di calcolare il comportamento di elettroni nel sistema quando c'è almeno un termine nel potenziale visto dagli elettroni nel solido che non è periodico.

#### **Approssimazioni della "envelope function" e della massa efficace.**

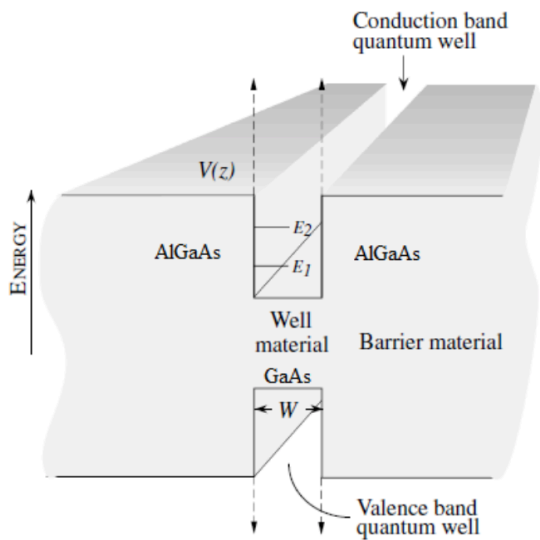
Se la banda di conduzione non è degenera ed è molto separata in energia da altre bande, elettroni che si trovano in stati che derivano da stati molto vicini al minimo della banda di conduzione si comportano come particelle con massa efficace  $m_c^*$  che vedono lungo la direzione  $x$  un potenziale dato dal profilo del minimo della banda di conduzione in funzione di  $x$   $E_{c0}(x)$ , in assenza di campi esterni applicati. (Approssimazione della massa efficace)

Elettroni possono trovarsi in banda di conduzione in un semiconduttore o perché eccitati dalla banda di valenza da qualche perturbazione (fotoni, ...) da banda di valenza o perché donati da qualche impurezza (donatore).

Se la banda di valenza non è degenera ed è molto separata in energia da altre bande, elettroni in banda di valenza che si trovano in stati che derivano da stati molto vicini al massimo della banda di valenza si comportano come particelle con massa efficace  $m_v^*$  che vedono lungo la direzione  $x$  un potenziale dato dal profilo del massimo della banda di valenza in funzione di  $x$   $E_{v0}(x)$ .

Lungo le direzioni  $y$  e  $z$  il cristallo è periodico, non c'è variazione dal potenziale periodico originale, e gli elettroni si comportano come in un cristallo infinito lungo queste direzioni. Il  $k$  tridimensionale di un cristallo ideale non è più un buon numero quantico perché nella direzione  $x$  il sistema non è periodico, ma il  $k$

bidimensionale nelle direzioni  $y$  e  $z$  è un buon numero quantico perché il sistema rimane periodico nelle direzioni parallele al piano del pozzo quantico.



Consideriamo elettroni vicino al minimo della banda di conduzione (non degeneri). Consideriamo il cristallo infinito perfetto A o B. Il reticolo cristallino e gli atomi della base determinano le bande e quindi  $E_{c0}$  e  $m_c^*$  per A e B. Le approssimazioni della "envelope function" e della massa efficace dicono che un elettrone vicino al minimo suddetto si comporta, se qualcosa distrugge la periodicità, come una particella di massa  $m_c^*$  soggetta a un potenziale  $V'(x) = V_{est}(x) + E_{c0}(x)$  dove  $V_{est}(x)$  è un eventuale potenziale esterno applicato (per esempio dovuto a un eventuale campo elettrico applicato dall'esterno del cristallo) e  $E_{c0}(x)$  indica come varia il fondo della banda di conduzione con  $x$ . Queste approssimazioni mi permettono di dividere il problema del comportamento di un elettrone in un solido con una perturbazione non periodica nello spazio in due. Nella prima parte considero solo il potenziale cristallino periodico, calcolo le bande, le energie degli estremi delle bande, le masse efficaci.

Nella seconda parte calcolo come si comporta una particella di massa  $m^*$  soggetta solo alla parte non periodica del potenziale, e per la quale lo zero dell'energia sia posto all'estremo della banda.

In un quantum well, senza un potenziale esterno  $V_{est}(x)$  applicato, il suddetto elettrone in banda di conduzione si comporta come una particella di massa  $m_c^*$  soggetta a un potenziale dato solo da  $E_{c0}(x)$ . (Vedi Fig. 3 bis o 4)

Devo quindi risolvere un'equazione di Shroedinger per una particella di massa  $m_c^*$  soggetta al potenziale  $E_{c0}(x)$  che dipende solo da  $x$ . L'Hamiltoniana è quindi separabile in una parte che dipende solo da  $x$  e una parte che dipende solo da  $y$  e  $z$ . La funzione involuppo totale  $f(x,y,z)$  sarà il prodotto di una funzione  $g(x)$  di solo  $x$  e una funzione  $h(y,z)$  di  $y$  e  $z$ .

La parte che dipende da  $x$  dà i livelli energetici in una buca di potenziale e funzioni  $g(x)$  localizzate nella buca. La parte che dipende da  $y$  e  $z$  dà gli stati di

una particella che si propaga liberamente nelle direzioni perpendicolari y e z (onde piane in y e z).

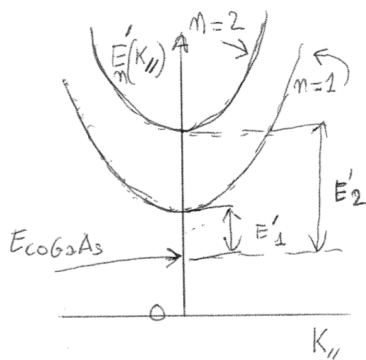
$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_c^*} + E_{c0}(x) \right) f(x,y,z) = E f(x,y,z)$$

$$\underbrace{\left( -\frac{\hbar^2 \partial^2}{2m_c^* \partial x^2} + E_{c0}(x) \right)}_{\text{dipende solo da } x} \underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right)}_{\text{dipende solo da } y \text{ e } z} g(x) h(y,z) = E g(x) h(y,z)$$

$$\Rightarrow E = E' + \frac{\hbar^2}{2m_c^*} (k_y^2 + k_z^2) \quad h(y,z) \propto e^{i(k_y y + k_z z)}$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_{c0}(x) \right) g(x) = E' g(x)$$

Poiché  $E_{c0}(x)$  ha la forma di una buca di potenziale con il "fondo" all'energia del minimo della banda di conduzione nel GaAs ( $E_{c0 \text{ GaAs}}$ ), le  $E'$  saranno le energie  $E'_n$  di una particella di massa  $m_c^*$  in una buca di potenziale unidimensionale di larghezza pari alla larghezza del pozzo di GaAs, di altezza pari alla differenza tra  $E_{c0}$  nell' AlGaAs e nel GaAs ( $\Delta E_c$  in fig. 3 bis). L'energia totale  $E'_n(k_{\text{parallelo}})$  sarà la somma di  $E'_n$ , dell'energia cinetica del moto libero in y e z e di  $E_{c0 \text{ GaAs}}$ .



$$E'_n(k_{||}) = E'_n + \frac{\hbar^2}{2m_c^*} k_{||}^2 +$$

$E_{c0 \text{ GaAs}}$

$$\vec{k}_{||} = (k_y, k_z)$$

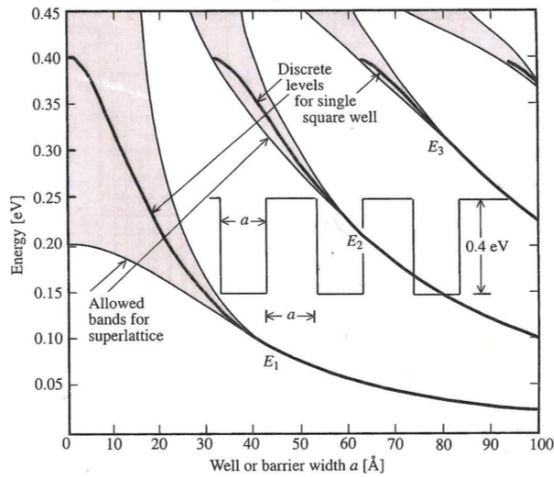


Fig. 9.9. Evolution of energy levels in a QW into minibands in a SL as a function of the barriers widths (assumed to be equal to the well width) calculated for a particle in a Kronig-Penney potential (shown in the inset). The height of the square potentials is 0.4 eV. Notice that there are gaps between these minibands even when they are above the potential barriers. From [9.25]

La figura di sopra riporta come linee continue nere le energie dei livelli per gli elettroni in un pozzo quantico unidimensionale di GaAs di larghezza  $a$  se la barriera di potenziale è alta 0.4 eV.

Per la banda di valenza le cose sono apparentemente più complicate perché la massa efficace  $m_v^*$  è negativa, quindi avrei nell'approssimazione della "envelope function" una equazione simile a quella di Schroedinger per la funzione involuppo con il primo termine con segno invertito:

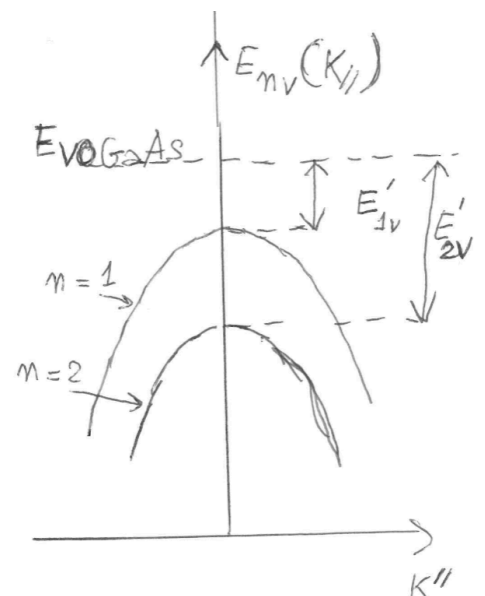
$$\left( \frac{+\hbar^2 \nabla^2}{2|m_v^*|} + E_{v0}(x) + V_{est}(r) \right) f(r) = E f(r)$$

se moltiplico tutto per -1 riottengo un' eq. simile a quella di Shroedinger con il primo termine col segno giusto, ma con  $E_{v0}(x)$ ,  $V_{est}(r)$  ed  $E$  cambiati di segno.

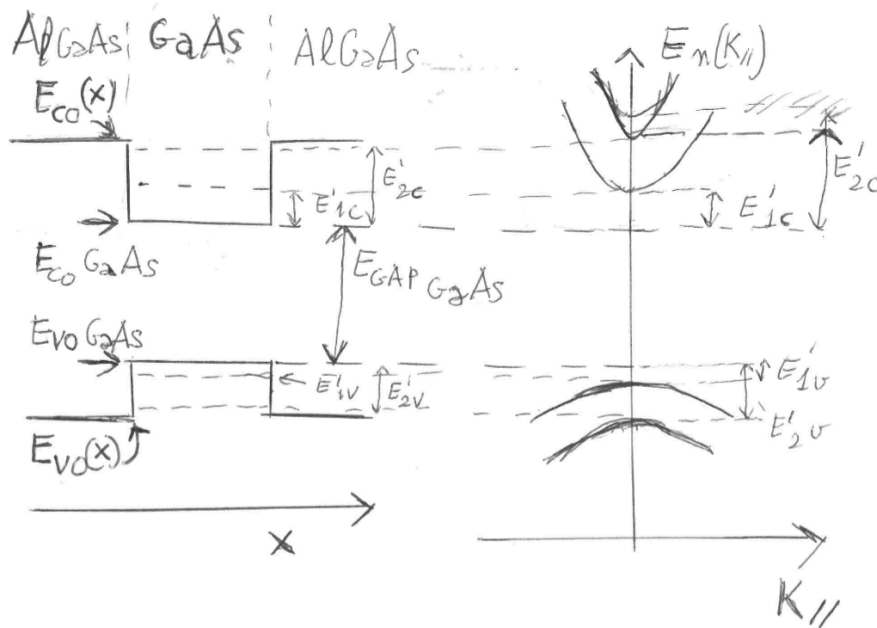
$$\left( \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2|m_v^*|} - E_{v0}(x) - V_{est}(r) \right) f(r) = -E f(r)$$

Quindi per elettroni vicino alla sommità della banda di valenza le cose vanno come se le energie e gli eventuali potenziali esterni avessero il segno invertito.

Quindi la barriera di potenziale che fa  $E_{v0}(x)$  nel GaAs per questi elettroni è invece una buca di potenziale. Posso quindi trattare il problema come ho fatto per gli elettroni in banda di conduzione, ma invertendo le energie. Le  $E'_{nv}$  sono in modulo le energie di una particella di massa  $|m_v^*|$  in una buca di potenziale unidimensionale di larghezza pari alla larghezza del pozzo quantico e di altezza



pari a pari alla differenza tra  $E_{v0}$  nell' AlGaAs e nel GaAs ( $\Delta E_v$  in fig. 3 bis). Quindi la struttura elettronica di un pozzo quantico di GaAs tra barriere di AlGaAs può essere in prima approssimazione schematizzata come nello schizzo qui sotto



Vi sono delle bande bidimensionali che disperdono parabolicamente con  $k$  parallelo che derivano da stati di banda di conduzione e banda di valenza. Il  $k$  parallelo al piano del pozzo quantico rimane un buon numero quantico perché parallelamente al piano la simmetria traslazionale è conservata. L'andamento parabolico dell'energia in funzione di  $k$  parallelo deriva dal moto libero in direzione  $y$  e  $z$ .

Per  $k$  parallelo  $=0$  l'energia è quella che avrebbe una particella di massa  $m_c^*$  o  $|m_v^*|$  in una buca di potenziale unidimensionale data dal profilo di  $E_{c0}(x)$  per stati derivanti dalla banda di conduzione o di  $-E_{v0}(x)$  per stati derivanti dalla banda di valenza.

Poiché la banda di valenza del GaAs è degenera a  $k=0$ , con bande con due diverse curvature che si toccano a  $k=0$ , in prima approssimazione ho due diversi tipi di elettroni nella sommità della banda di valenza, quelli nella banda con curvatura minore che una massa efficace maggiore in modulo  $m_{hh}^*$  (hh sta per heavy hole) dell'ordine di  $-0.5 m_e$ , (con  $m_e$  massa dell'elettrone) e quelli nella banda a curvatura maggiore con massa efficace minore in modulo  $m_{lh}^*$  (lh sta per light hole) dell'ordine di  $-0.08 m_e$ .

Ognuno di questi due tipi di elettroni, avendo massa efficace diversa, ha associati nel pozzo quantico valori  $E'_{nv}$  diversi e quindi bande bidimensionali diverse.



## Densità di stati

Densità di stati (3D)  $D(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k S(E - E(k))$  per unità di volume

$$= \frac{2}{(2\pi)^3} \int_C \frac{ds}{|\nabla_k(E - E(k))|} \quad \text{C superficie dove } E = E(k)$$

Se banda parabolica l'integrale è sulla sfera dove  $|k| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^*(E - E_{co})}$

$$E(k) = E_{co} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

quindi  $D(E) = \frac{m^*}{\hbar^3 \pi^2} \sqrt{2m^*(E - E_{co})} \quad E > E_{co}$

$$= 0 \quad \text{per } E < E_{co}$$

Caso 2D

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int_C \frac{dl}{|\nabla_k(E - E(k))|} =$$

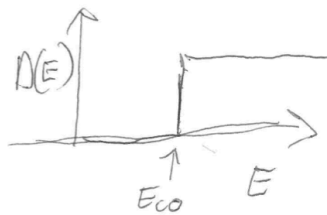
C curva sulla quale  $E(k) = E$

assestamento banda parabolica

$$E(k) = E_{co} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

$$= \frac{2}{\hbar^2 \pi^2} \frac{2\pi k}{\frac{\hbar^2 k}{m^*}} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad \text{per } E > E_{co}$$

$$= 0 \quad \text{per } E < E_{co}$$



Probabilità di assorbimento di un fotone da un semiconduttore tridimensionale per energie vicine all'energia della gap.

Probabilità di assorbimento di un fotone di energia  $\hbar\omega$

Se stati di valenza tutti pieni e stati di conduzione tutti vuoti in 3D

$$\propto 2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} |K \langle A \cdot \hat{p} | \phi \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_f - E_i))$$

Se prendo elementi di matrice medio

$$\simeq \frac{2 |K \langle A \cdot \hat{p} | \phi \rangle|^2}{(2\pi)^3} \int d^3k \delta(\hbar\omega - (E_c(k) - E_v(k)))$$

$$E_c(k) - E_v(k) = E_{Gap} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0^*}$$

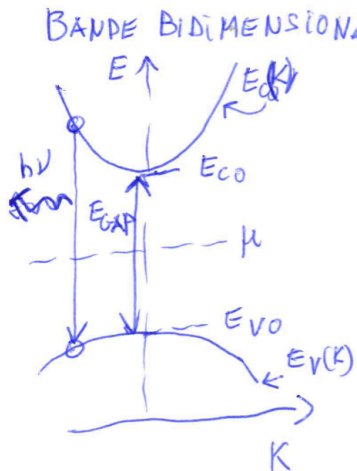
$$\frac{1}{m_0^*} = \frac{1}{m^*_c} + \frac{1}{m^*_v}$$

$$\propto \int_c dS \frac{1}{|V_k (\hbar\omega - (E_c(k) - E_v(k)))|}$$

$$\propto m_0^* \sqrt{2m^* (\hbar\omega - E_{gap})} \quad \text{per } \hbar\omega > E_{gap}$$

$$0 \quad \text{per } \hbar\omega < E_{gap}$$

Probabilità di emissione di un fotone da un semiconduttore bidimensionale per energie vicine a quelle di gap



Supponiamo che la probabilità a un certo  $k$  che uno stato in banda conduttrice sia occupato sia  $f(E_c(k))$  e che la probabilità che uno stato in banda di valenza sia vuoto sia  $1 - f(E_v(k))$ ,  $f$  distribuzione di Fermi con  $\mu$  nella gap. lontano dalle bande, e  $k_B T \ll E_{gap}$ .

La probabilità<sup>P</sup> che un fotone di energia  $h\nu$  sia emesso la otterremo sommando tutti i possibili processi per i vari  $k$

$$P \propto \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} |K| |A \cdot P| f(E_c(k)) (1 - f(E_v(k))) \delta(E_c(k) - E_v(k) - h\nu)$$

$$\sim \frac{|K| |A \cdot P|^2}{(2\pi)^2} \int d^2k e^{-\frac{E_c(k)}{k_B T}} e^{\frac{E_v(k)}{k_B T}} \delta(E_c(k) - E_v(k) - h\nu)^*$$

$$\propto e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \int_c dl \frac{1}{|V_k(E_c(k) - E_v(k) - h\nu)|} \quad c \text{ è la linea dove } E_c(k) - E_v(k) = h\nu$$

$$m E_c(k) = E_{oc} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*}$$

$$E_v(k) = E_{vo} - \frac{\hbar^2 k^2}{2|m_v^*|}$$

$$\frac{1}{m_0^*} = \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_v^*}$$

$$\propto \frac{m_0^*}{\pi \hbar^2} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \text{ per } h\nu > E_{gap} = E_{co} - E_{vo}$$

$$0 \text{ per } h\nu < E_{gap}$$

\*<sup>†</sup> qui ho approssimate  $f(E_c(k))$  con un termine proporzionale a  $e^{-\frac{E_c(k)}{k_B T}}$  perché sono sulla coda della distribuzione, analogamente per l'altro termine

