

AIAs

AlAs ha la stessa struttura cristallina del GaAs (al trivalente Ga sostituisco il trivalente Al)
 La sua struttura a bande somiglia a quella del GaAs, la principale differenza è la gap piu' larga e il minimo delle banda di condizione non a Γ ($k=0$)

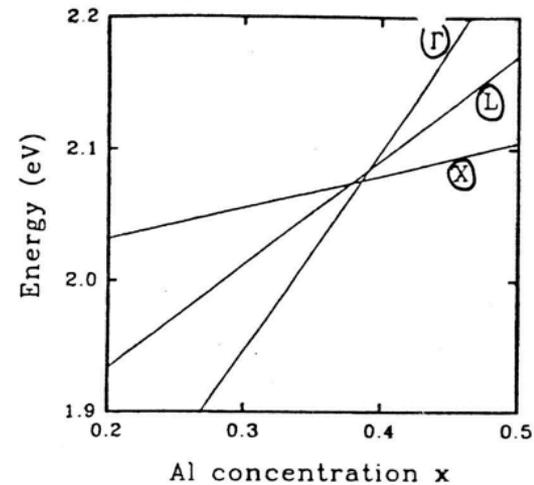
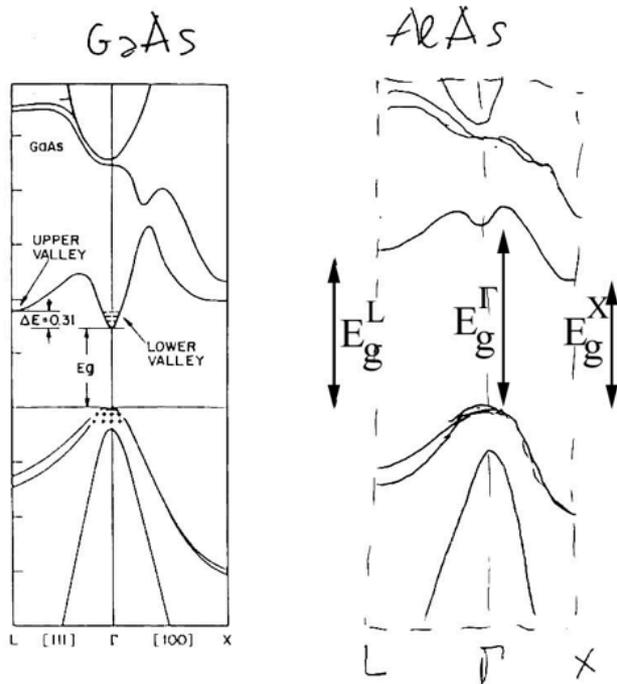


FIG. 5. The energy of the Γ , X, and L energy gaps vs Al concentration x at low temperature as given by the equations reported in Table III.



Il composto ternario ha la stessa struttura del GaAs, ma su ogni sito del Ga c'è probabilità x di trovarci Al e $1-x$ di trovarci Ga. La sua struttura a bande e' intermedia tra quella del GaAs e quella dell' AlAs

CRISTALLO VIRTUALE

Problema:

in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ la sostituzione di Ga con Al è in siti a caso, quindi il sistema non è periodico

Non periodico \rightarrow non k , no Bloch, no bande

Possibile soluzione:

- 1) Approssimazione 0: prendere un potenziale che sul sito del Ga (o Al) è la media pesata dei potenziali di Ga e Al

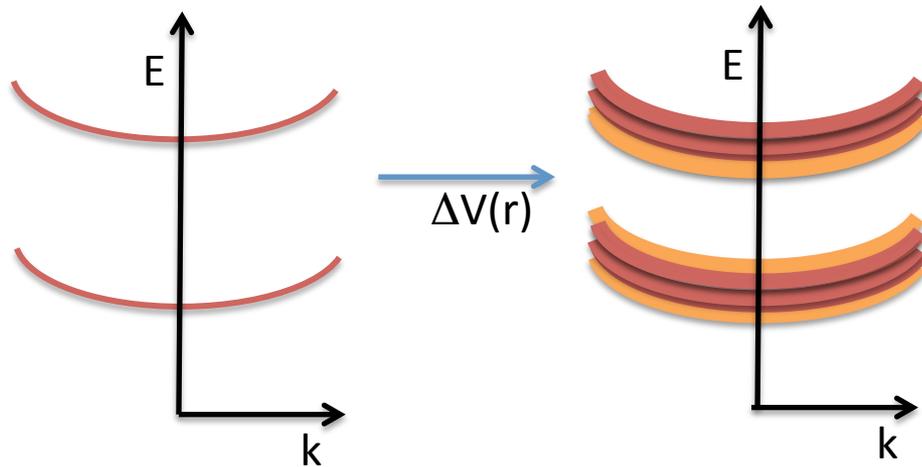
$$V_v(r) = (1-x)V_{\text{Ga}}(r) + xV_{\text{Al}}(r)$$

- 2) Calcolare la struttura a bande in questo nuovo potenziale virtuale periodico (approssimazione del cristallo virtuale)
- 3) Approssimazione 1: usare la differenza tra il potenziale vero non periodico e quello virtuale periodico $\Delta V(r) = V(r) - V_v(r)$ come Hamiltoniana di perturbazione e calcolarne l'effetto al primo ordine, partendo dagli autostati calcolati in approssimazione 0.

Conseguenze principali:

$\Delta V(r)$ non periodico causa lo scattering di uno stato di Bloch con k in uno stato con k' , quindi una vita media finita degli stati di Bloch. Per Heisenberg vita media finita \rightarrow indeterminazione in energia

$\Delta V(r)$ piccolo \rightarrow indeterminazione in energia ΔE piccola, minore di distanza tra bande



ha senso ancora parlare di bande
(in prima approssimazione)

$\Delta V(r)$ grande \rightarrow indeterminazione in energia ΔE grande, maggiore di distanza tra bande

\rightarrow non ha senso parlare di bande

In $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ siamo nel primo caso.

Nota: esistono molte altre cause di “allargamento” delle bande, come l’interazione elettrone-fonone (rottura di Born-Oppenheimer), effetti a molti corpi (rottura di approx. potenziale medio), Per ora li trascuriamo, poi ne dovremo tener conto.

Vantaggi dell' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:

Variando x da 0 a 1 vario struttura a bande da quella del GaAs a quella dell'AlAs,
per esempio posso cambiare la gap da 1.5 a 2.3 eV con continuità.

parametro reticolare di GaAs e AlAs (e quindi di $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) differiscono di 1% o meno -> posso costruire un unico cristallo in cui x varia da 0 a 1 spazialmente senza introdurre (o introducendo pochi) difetti del reticolo.

I difetti, anche pochi, come vedremo sono killer per molte proprietà utili dei semiconduttori. Limitarne la densità è essenziale.

MBE

Con metodi come l'epitassia con fasci molecolari (MBE) posso crescere un cristallo macroscopico strato atomico dopo strato atomico, controllando bene la composizione di ogni strato, quindi posso cambiare la composizione del cristallo da GaAs a AlAs nel giro di uno strato atomico.

Note e testi su come trattare gli stati elettronici in un pozzo quantico (approx massa efficace e approx funzione involucri) sono su moodle

“Envelope function and effective.....”

“Dati su GaAs,.....”

PROBLEMA: cosa succede se applico a un cristallo una perturbazione non periodica?

Prendiamo l'Hamiltoniana di un elettrone in un cristallo perfetto (potenziale periodico V_c)

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi + V_c \phi = E \phi$$

$V_c(\vec{r})$ is the potential of the perfect crystal

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \phi + V_c \phi}_{H_{\text{cryst}} \phi}$$

$$H_{\text{cryst}} \phi$$

$\phi_{\vec{k},n} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k},n}(\vec{r})$ are Bloch wavefunct.

k è un buon numero quantico, le autofunzioni sono funzioni di Bloch.

Aggiungiamo ora un potenziale non periodico $U(r)$, per esempio dovuto a un campo elettrico, un'impurezza, un'interfaccia,..... Abbiamo

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi + V_c \psi + U \psi = E \psi$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi + V_c \psi + U \psi}_{H_{\text{cryst}} \psi}$$

$$H_{\text{cryst}} \psi$$

dove ψ è la nuova funzione d'onda, che non è più uno stato di Bloch, k non è più un buon numero quantico. Poiché le ϕ sono un set ortonormale completo possiamo scrivere

$$\psi = \sum_n \int d^3\vec{k} c_{\vec{k},n} \phi_{\vec{k},n}$$

Come calcolare $c_{k,n}$?

Se $U(r)$ e' piccolo uso teoria delle perturbazioni al primo ordine

Perturbation theory :

$$H_0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$$

$$\Rightarrow (H_0 + \lambda V) |N\rangle = E_N |N\rangle$$

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle k^0 | V | n^0 \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^0\rangle$$

$$H = H_0 + \lambda V \Rightarrow$$

$$E_N = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$
$$|N\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + \dots$$

Quindi sono apprezzabilmente diversi da zero solo i coefficienti $c_{n,k}$ relativi a stati con energia vicina a quello che sto considerando e con elemento di matrice dell'Hamiltoniana di perturbazione non trascurabile.

Esempio:

In cosa si trasforma uno stato corrispondente al fondo della banda di conduzione (per esempio a $k=0$) se il potenziale perturbante è piccolo e varia lentamente nello spazio?

Se $U(r)$ varia lentamente nello spazio reale, la sua trasformata di Fourier sarà apprezzabilmente diversa da zero solo per piccoli k , se lo stato è a fondo banda di conduzione è lontano in energia da quelli della banda di valenza e altre bande, quindi gli unici $c_{k,n}$ apprezzabilmente diversi da 0 sono quelli per k vicino a zero e della banda di conduzione.

Quindi posso scrivere

$$\psi(r) \approx \int e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{r})_{\vec{k},v} c_{\vec{k},v} d^3k \sim u(\vec{r})_{\vec{0},v} \int e^{i\vec{k}\vec{r}} c_{\vec{k},v} d^3k \sim u(\vec{r})_{\vec{0},v} \tilde{c}(\vec{r})$$

Quindi approssimativamente il nuovo stato che deriva da quello del fondo della banda di conduzione è dato dalla u (parte periodica dello stato di Bloch) per $k=0$ moltiplicata per una funzione di r , non più per $e^{i\vec{k}\vec{r}}$

Come trovo $\tilde{c}(\vec{r})$? Metto $u(\vec{r})_{\vec{0},v} \tilde{c}(\vec{r})$ nell'equazione di Schroedinger con il potenziale vero (parte periodica + parte non periodica) e risolvo.

Trovo che $\tilde{c}(\vec{r})$ deve soddisfare

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + U(r) \right) \tilde{c}(\vec{r}) = (E - E_0) \tilde{c}(\vec{r})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + U(r') \right) \tilde{c}(r') = (E - E_0) \tilde{c}(r')$$

è una pseudo equazione di Schroedinger dove al posto della massa dell'elettrone c'è la massa efficace, al posto di tutto il potenziale c'è solo quello non periodico, e al posto dell'energia E c'è $E - E_0$, con E_0 l'energia del minimo della banda di conduzione.

QUINDI:

Il problema di un potenziale non periodico in un cristallo si divide in due problemi:

- 1) Considerare solo la parte periodica e trovare le $E(k)$ e le autofunzioni del cristallo perfetto, dedurre da ciò le masse efficaci, gli estremi delle bande, ...
- 2) Conosciuto m^* ed E_0 , costruire un'equazione di Schroedinger dove la massa elettronica è rinormalizzata a m^* , le energie sono traslate di E_0 , e l'unico potenziale è quello non periodico

Tutte le proprietà del cristallo ideale sono racchiuse in m^* ed E_0 , e il potenziale non periodico agisce su una particella fittizia caratterizzata da m^* ed E_0 .

Esempio:

Supponiamo di applicare al cristallo un campo elettrico uniforme e omogeneo, per esempio nella direzione x . Il potenziale aggiuntivo sarà una funzione lineare di x , non è quindi periodico. Per sapere cosa faranno gli elettroni del fondo della banda di conduzione nel mio cristallo dovrò risolvere una pseudo equazione di Schroedinger in cui l'unico potenziale è quello esterno (schermato dalla costante dielettrica del cristallo). Quindi gli elettroni del fondo della banda di conduzione si comporteranno come elettroni liberi sottoposti a un normale campo elettrico, ma con la massa rinormalizzata m^* del fondo della banda di conduzione. Quindi la relazione tra campo E e accelerazione è data da m^* , non da m_e .

Esempio:

Supponiamo di sostituire in un cristallo di Si un atomo di Si con un atomo di P. Abbiamo quindi un'impurezza che rompe le simmetrie.

P ha un protone in più (una carica positiva in più) e un elettrone in più rispetto al Si. L'elettrone in più dovrà andare in stati che derivano dalla banda di conduzione, perché quella di valenza del Si è completamente occupata. Come mi calcolo questi stati? Prendo un'equazione di Schroedinger con la massa m^* della banda di conduzione e potenziale solo la differenza tra quello del cristallo col P e quello perfetto.

Tale differenza è in prima approssimazione $-e^2/\epsilon_0 r$, con r distanza tra elettrone e P.

Però sono dentro un cristallo, e quindi i campi elettrici sono schermati. In prima approssimazione provo ad approssimare questo schermo tramite la costante dielettrica relativa (approssimazione che funziona per distanze grandi rispetto a quelle interatomiche, vedro' poi se ho fatto bene).

Allora il potenziale da considerare è

$$V(r) = -e^2/\epsilon_r \epsilon_0 r$$

Quindi ho l'equazione di un atomo di idrogeno, con m^* al posto di m e $\epsilon_r \epsilon_0$ al posto di ϵ_0 e le energie misurate dal fondo della banda di conduzione.

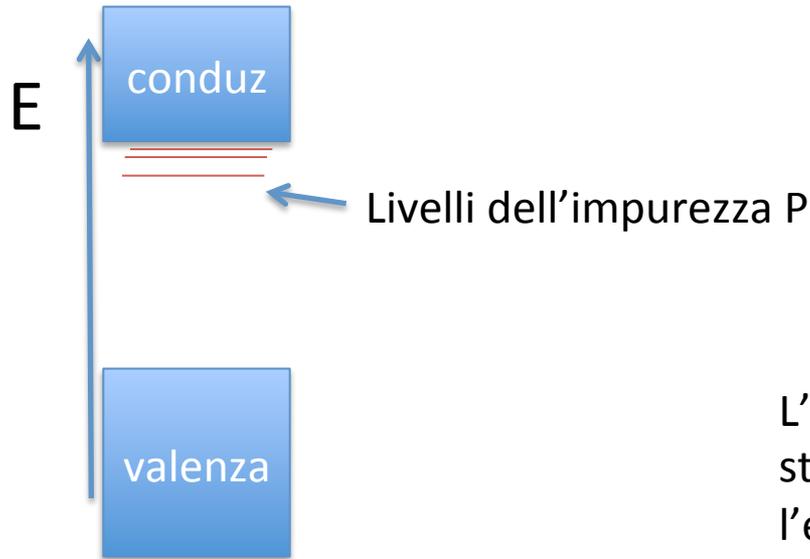
Quindi so subito le energie e le autofunzioni:

$$E_n = E_{0c} - m^* n^2 e^4 / (8(\epsilon_r \epsilon_0)^2 h^3 c)$$

$$(Ry^* = m^* e^4 / (8(\epsilon_r \epsilon_0)^2 h^3 c))$$

$$r_B^* = \epsilon_r \epsilon_0 h^2 / (m^* \pi e^2)$$

Quindi se m^* e' circa $0.3 m_e$ e $\epsilon_r = 12$ verranno dei livelli alcune decine di meV sotto il fondo della banda di conduzione con un'estensione spaziale di decine di Å.



L'elevata estensione delle funzioni d'onda giustifica l'approssimazione dello schermo con ϵ_r .

L'elettrone in più introdotto dal P a $T=0$ andrà nello stato $1s$. A $T=300\text{ K}$ $k_B T$ è paragonabile a Ry^* e quindi l'elettrone si troverà prevalentemente in banda di conduzione e delocalizzato. Contribuirà quindi alla conduzione elettrica. A bassa temperatura non lo può fare perché è invece in uno stato legato. P si comporta come un donatore di elettroni (o donore).

Altro materiale e' su moodle col titolo effective mass approx. , light-matter interaction etc.