

Materiały i przyrządy półprzewodnikowe



Wykład 11: Nanostruktury półprzewodnikowe

Paweł Wójcik



Plan wykładu:

1. Kropki kwantowe
2. Druty kwantowe

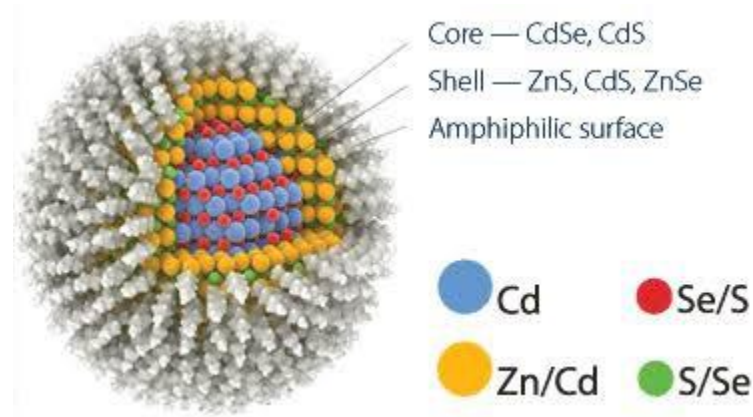
Kropki kwantowe

Kropka kwantowa jest wytworzoną sztucznie strukturą, której wszystkie trzy rozmiary przestrzenne nie przekraczają $1\mu\text{m}$. Zwykle rozmiary kropki kwantowej przyjmują wartości od 10 do 100 nm. Taka nanostruktura zawiera od $\sim 10^5$ do $\sim 10^8$ atomów, a zatem wytwarza się w niej dobrze określona elektronowa struktura pasmowa. Kropki kwantowe i ich układy nazywane są inaczej: sztucznymi atomami, sztucznymi molekułami, sztucznymi kryształami.

W porównaniu z kryształami litymi kropki kwantowe wykazują nowe ciekawe własności fizyczne, które zależą silnie od ich rozmiarów – zjawisko kwantyzacji.

Ponadto własności elektronowe kropek kwantowych mogą być – w znacznym zakresie – modyfikowane przez zmianę:

- składu chemicznego,
- struktury geometrycznej,
- zewnętrznego pola elektrycznego,
- zewnętrznego pola magnetycznego,
- naprężeń.



Kropki kwantowe wytwarza się z różnych materiałów: metali, półprzewodników, materiałów organicznych.

Kropki kwantowe

Rodzaje kropek kwantowych:

- nanokryształy w matrycy izolującej,
- nanoczątki w materiałach porowatych,
- [samorganizowane kropki kwantowe](#),
- [kropki kwantowe w heterostrukturach półprzewodnikowych](#),
- [elektrostatyczne kropki kwantowe](#)

Samorganizowane kropki kwantowe:

Wzrost wyspowy zgodny z **mechanizmem Stranckiego-Krastanova**:

- na podłożu krystalicznym B powstaje warstwa zwilżająca nanoszonoego materiału A,
- w stanie krystalicznym materiały A i B posiadają różne stałe sieciowe (tzw. niedopasowanie stałych sieciowych jest rzędu kilku/kilkunastu procent),
- naprężenia wynikające z niedopasowania stałych sieciowych prowadzą do desegregacji kolejnych nanoszonych warstw,
- w efekcie końcowym tworzą się wyspy złożone z materiału A na warstwie zwilżającej zbudowanej również z materiału A osadzonej na podłożu z materiału B.

Nanocząstka zbudowana z warstw półprzewodników



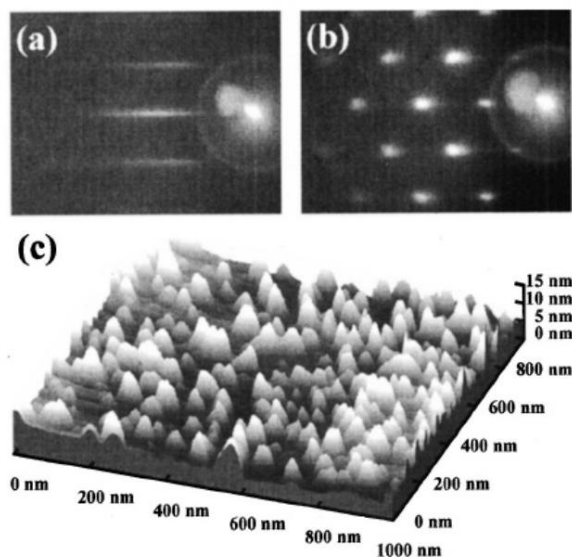
Kropki kwantowe

Samorganizowane kropki kwantowe:

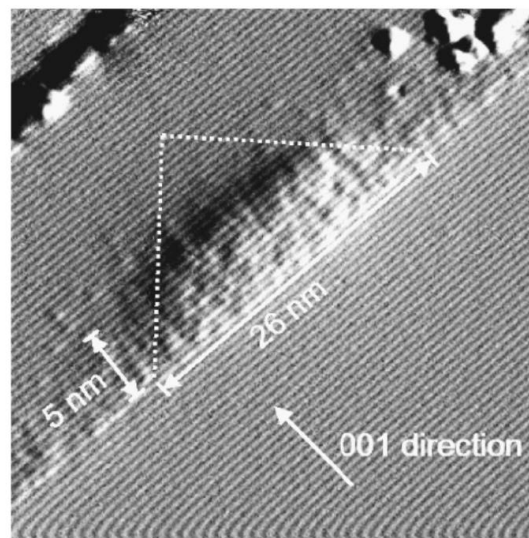
Układ kropek kwantowych, powstały w wyniku wzrostu metodą Straskiego-Krastanova, wykazuje **samoorganizację**, tzn. kropki kwantowe posiadają zbliżone kształty i rozmiary, odległości pomiędzy kropkami są prawie jednakowe, a ponadto tworzą dość dobrze uporządkowaną strukturę (matrycę) na powierzchni warstwy zwilżającej.

Typowe kształty samorganizowanych kropek kwantowych: stóg, stożek, soczewka, piramida, "katedra", słupek.

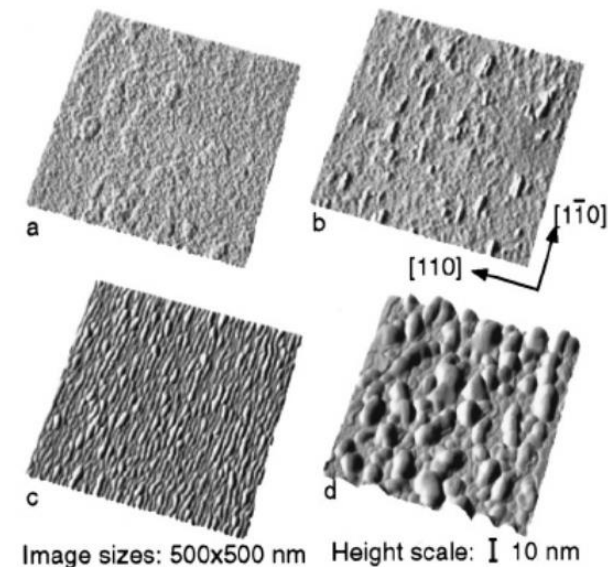
Typowe rozmiary: wysokość to ok. 10 nm, szerokość podstawy to ok. 100 nm



Samorganizowane kropki kwantowe CdTe na podłożu ZnTe



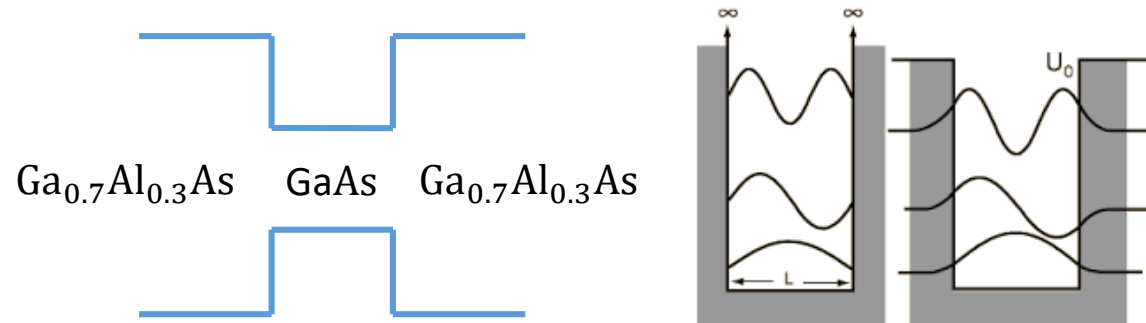
Kropka kwantowa InAs na warstwie zwilżającej



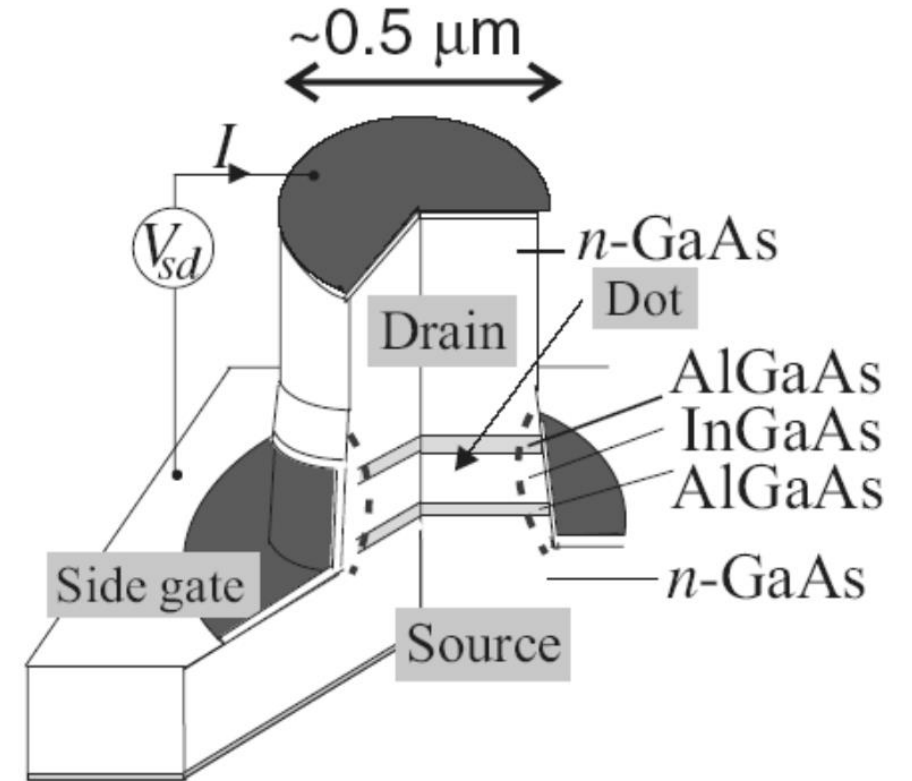
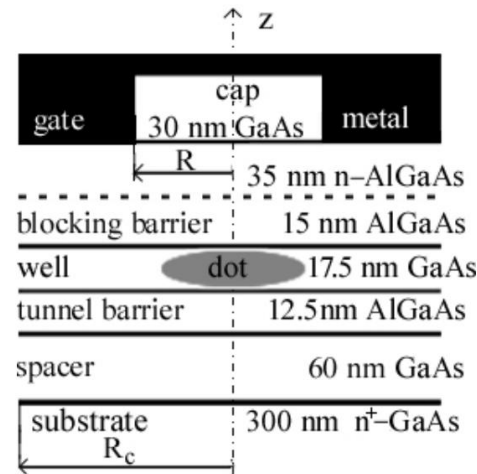
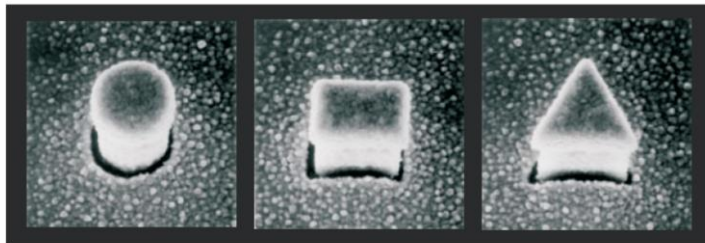
Powstawanie wysp GaAs na podłożu GaP

Kropki kwantowe

Kropki kwantowe w heterostrukturach półprzewodnikowych sterowane napięciami bramek



Struktura pasmowa oraz schematyczna ilustracja funkcji falowych w skończonej studni potencjału GaAs/AlGaAs

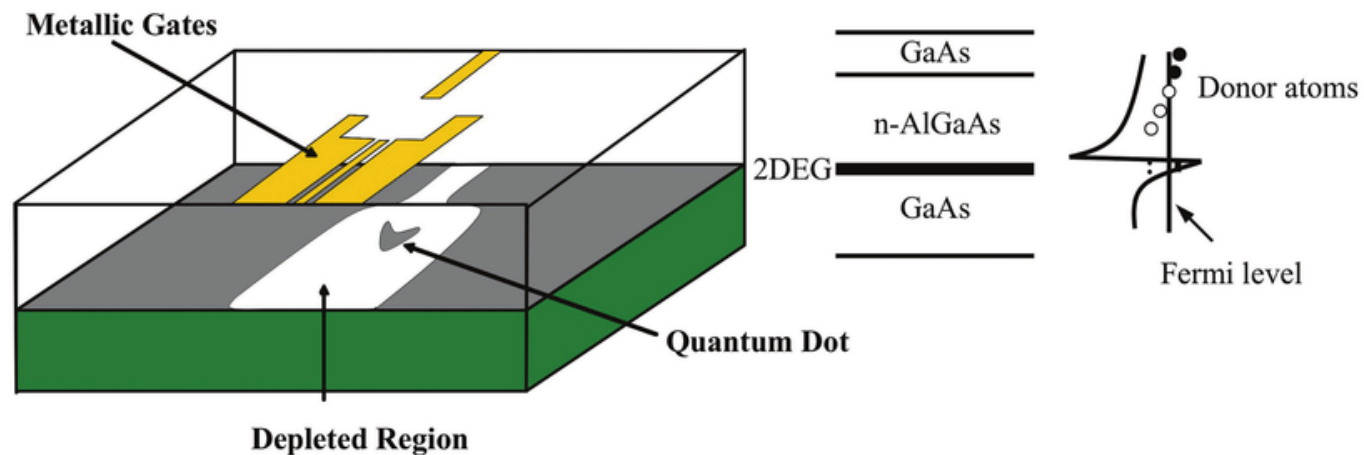


Schemat pionowego nanoukładu trójelektrodowego [S. Tarucha et al., NTT (1996)].

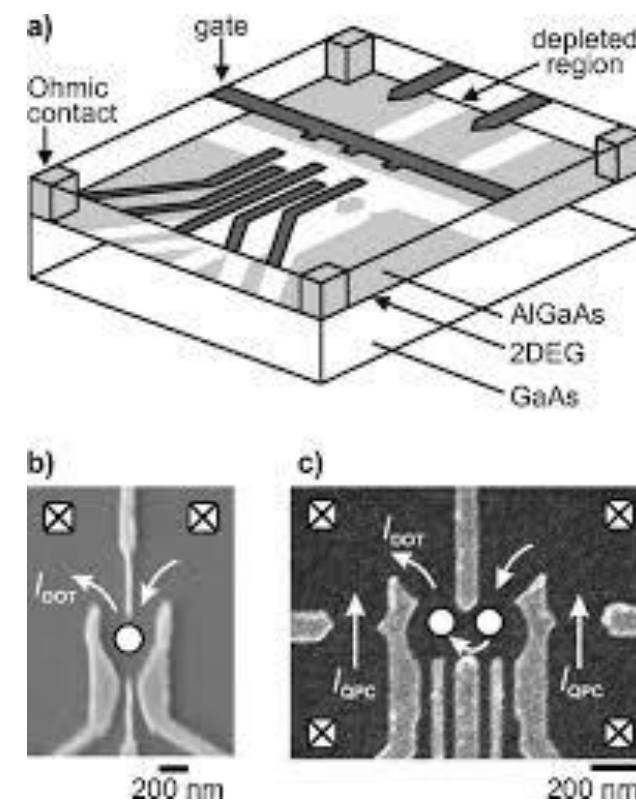
(Lewy) Obrazy z elektronowego mikroskopu skaningowego kropek kwantowych wyprodukowanych w laboratorium prof. Seigo Taruchy, NTT, Japonia. (Prawy) Profil materiałowy pojedynczego słupka.

Kropki kwantowe

Elektrostatyczne kropki kwantowe – modelowanie uwięzienia poprzez odpowiednie potencjały bramek.



Schematyczna ilustracja elektrostatycznej kropki kwantowej. Ruch elektronu w dwuwymiarowym gazie elektronowym jest ograniczany określonymi potencjałami pochodzącymi od bramek kwantowych



Obraz STM pojedynczej i podwójnej kropki kwantowej.

Kropki kwantowe – struktura elektronowa

Własności optyczne jak transportowe kropek kwantowych zależą od ich struktury elektronowej.

Wyznaczenie struktury elektronowej kropki kwantowej bazuje na rozwiązaniu wieloelektronowego równania Schrödingera, co nie jest zadaniem łatwym już dla kilku elektronów. Dlatego często stosuje się metody przybliżone.

Wyznaczenie struktury elektronowej kropki kwantowej musi uwzględniać wszystkie występujące źródła pola elektrostatycznego (potencjały), w tym:

- pole pochodzące od elektrod bramek,
- nieciągłości pasma przewodnictwa w heterostrukturach półprzewodnikowych,
- barierę Schottky'ego na złączu metal/półprzewodnik,
- pole pochodzące od zjonizowanych donorów i akceptorów,
- pole pochodzące od nadmiarowych elektronów w kropce kwantowej – oddziaływanie Hartree oraz wymiennie-korelacyjne

Dla uproszczenia można rozwiązać **równanie Schrödingera** dla jednego elektronu w średnim polu pochodzącym od pozostałych elektronów (model pola średniego)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{conf}(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r})$$

↑ masa efektywna
 ↑ potencjał uwięzienia

Kropki kwantowe – struktura elektronowa

Energia potencjalna uwięzienia

$$V_{conf}(\mathbf{r}) = V_{band}(\mathbf{r}) - e\Phi(\mathbf{r})$$

$V_{band}(\mathbf{r})$ to energia uwięzienia związana z nieciągłością dna pasma przewodnictwa,

$\Phi(\mathbf{r})$ to potencjał wypadkowego pola elektrostatycznego w układzie.

$$\Phi(\mathbf{r}) = \phi_1(\mathbf{r}) + \phi_2(\mathbf{r})$$

potencjał pochodzący od zjonizowanych domieszek
oraz elektrod bramek

potencjał pochodzący od elektronów uwięzionych
w kropce kwantowej.

Potencjał $\phi_1(\mathbf{r})$ można wyznaczyć z równania Poissona, uwzględniając potencjały bramek poprzez odpowiednie warunki brzegowe

$$\nabla^2 \phi_1(\mathbf{r}) = -\frac{\rho_D(\mathbf{r})}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

rozkład koncentracji ładunku od
zjonizowanych domieszek

Potencjał $\phi_2(\mathbf{r})$ można wyznaczyć w przybliżeniu Hartree jako

$$\phi_2(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\nu=1}^N \int d^3r' \frac{|\psi_\nu(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

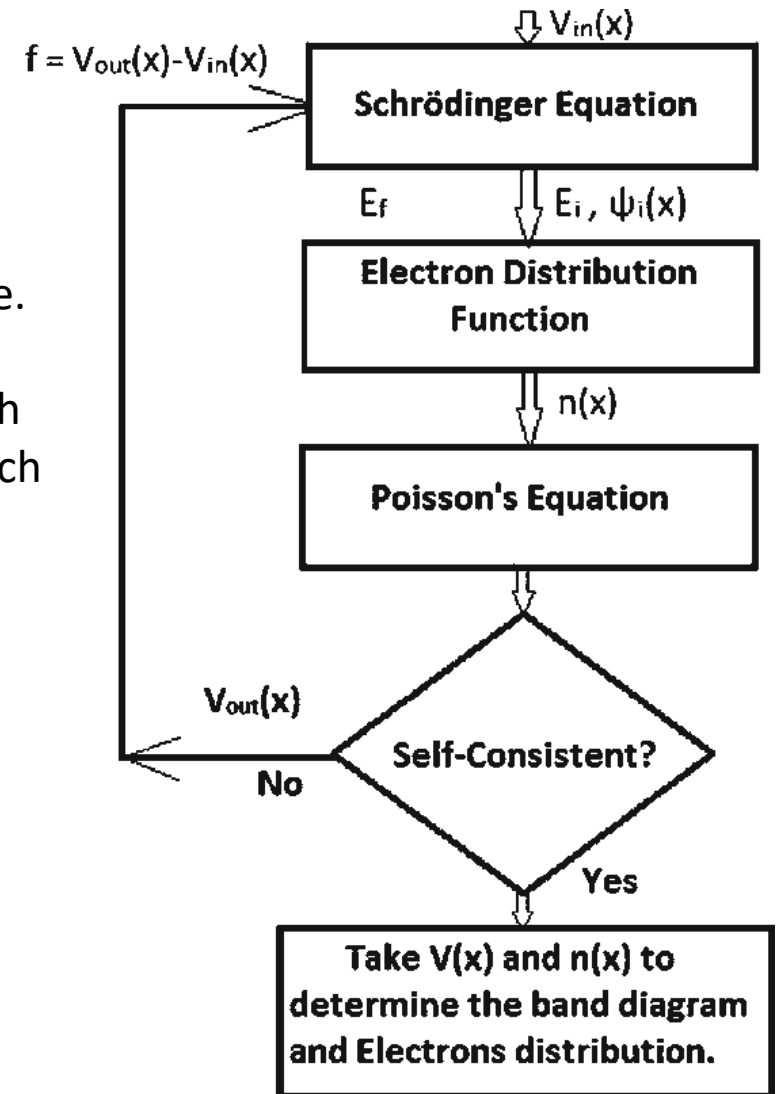
← jednoelektronowa funkcja falowa

Sumowanie przebiega po wszystkich obsadzonych stanach.

Kropki kwantowe – struktura elektronowa

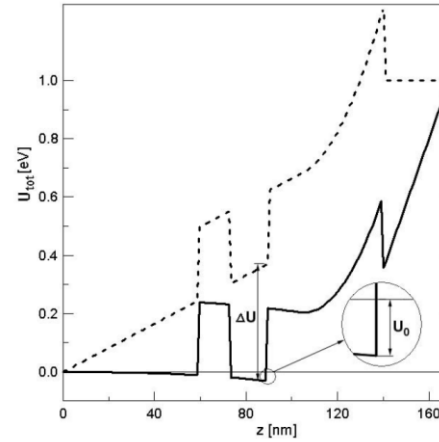
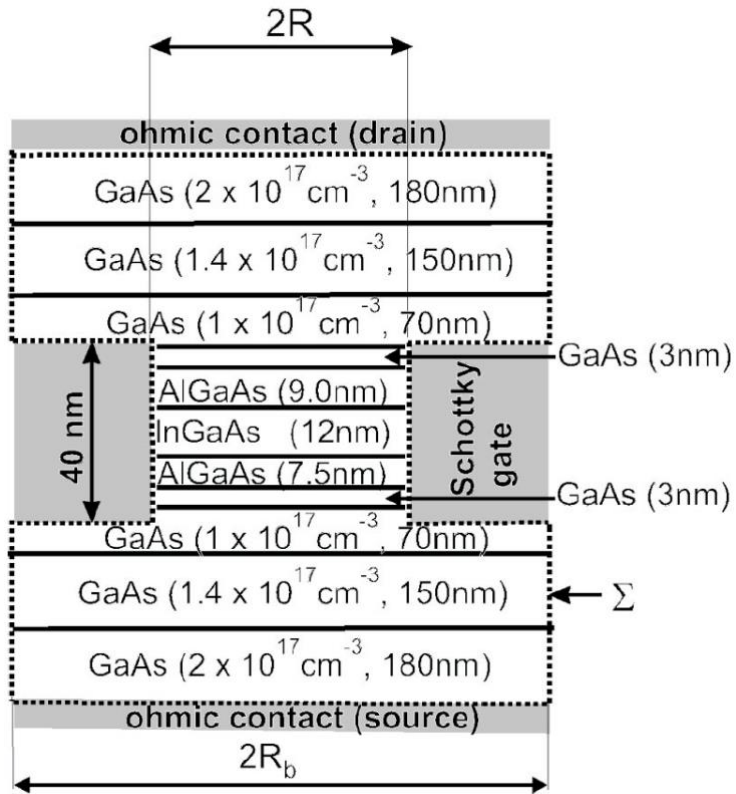
Obliczenia przeprowadzane są w sposób **samouzgodniony**:

1. Zaczynamy od pewnej wyjściowej energii potencjalnej.
2. Rozwiązujemy równanie Schrödingera otrzymując funkcje i wartości własne.
3. Wyznaczamy rozkład koncentracji elektronów.
4. Rozwiązujemy równanie Poissona dla odpowiednich warunków brzegowych uwzględniających potencjały bramek, oraz zadanego rozkładu zjonizowanych domieszek.
5. Wyznaczamy profil potencjału Hartree oddziaływania elektronowego.
6. Wyznaczamy nowy profil energii potencjalnej uwzględniając rozwiązanie równania Poissona oraz potencjał Hartree.
7. Jeżeli potencjał (koncentracja elektronowa) nie uległa samouzgodnieniu (nadal się zmienia) wracamy do punktu 2. z nowym profilem energii potencjalnej.

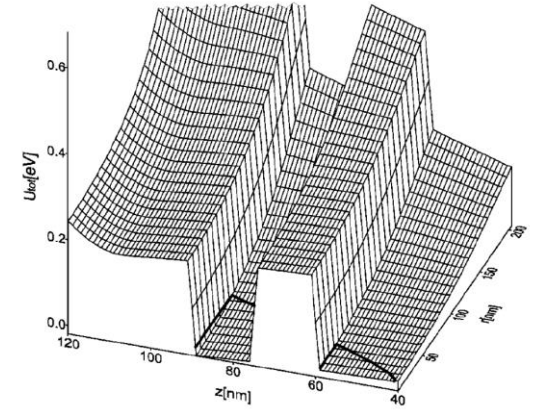


Kropki kwantowe – struktura elektronowa

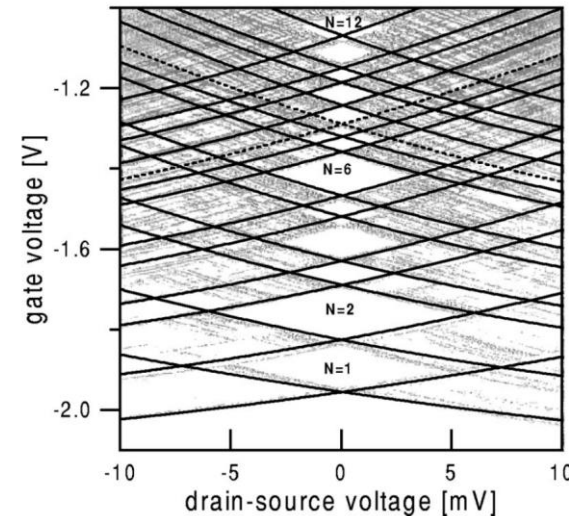
S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Phys. Rev. B 64 (2001) 195303



Przekrój samouzgodnionego profilu potencjału



Przekrój samouzgodnionego profilu potencjału z uwzględnieniem poprzecznym



Diamenty Coulomba

Kropki kwantowe – struktura elektronowa

Obliczanie struktury elektronowej dla wielu elektronów:

Metoda Hartree nie uwzględnia faktu, że elektrony są fermionami i podlegają zakazowi Pauliego, a zatem ich funkcja falowa musi być antysymetryczna ze względu na przestawienie dwóch cząstek. Zakaz Pauliego prowadzi do nowych składowych energii, a mianowicie energii wymiany oraz energii korelacyjnej. Dlatego też przy obliczaniu struktury wieloelektronowych kropek kwantowych zakłada się funkcje próbną (lub bazę) w postaci wyznaczników Slatera

W **metodzie Hartree-Focka** zakłada się, że wieloelektronowa funkcja falowa. Metoda ta uwzględnia energię wymiany, ale nie w pełni uwzględnia energię korelacyjną

$$\Psi(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \cdots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

Dlatego dalszym rozwinięciem metody Hartree-Focka jest **metoda mieszania konfiguracji (CI)**, w której zakłada się, że funkcja falowa układu wieloelektronowego jest kombinacją liniową wyznaczników Slatera z różnymi konfiguracjami orbitali.

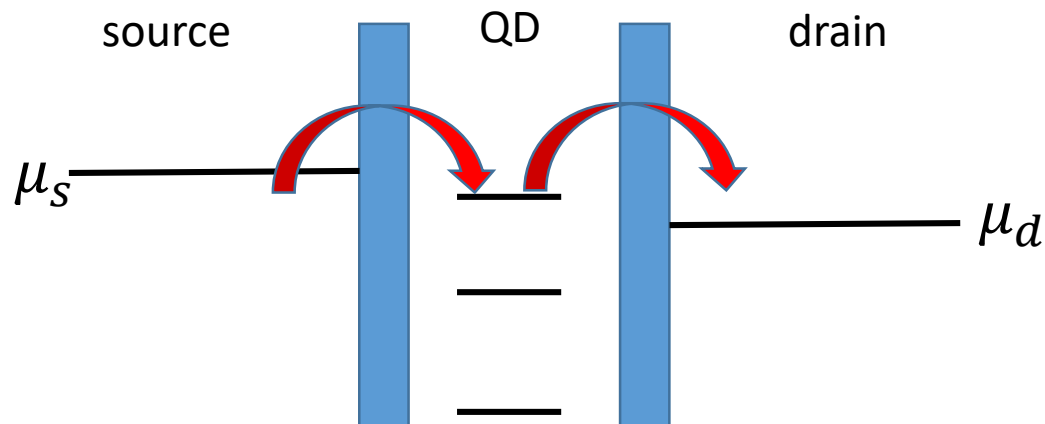
Kropki kwantowe – transport

- Elektrony nadmiarowe uwięzione w kropce kwantowej tworzą zlokalizowane przestrzennie stany związane (quasi-związane) o dyskretnych poziomach energetycznych. Typowe wartości różnic pomiędzy dyskretnymi poziomami energetycznymi: 1 – 10 meV
- Warunki tunelowania pojedynczego elektronu przez nanoukład można sformułować za pomocą potencjału chemicznego. Dla układu N elektronów w dowolnej strukturze **potencjał chemiczny** jest energią potrzebną do zwiększenia liczby elektronów o jeden, czyli

$$\mu_{N+1} = E_{N+1} - E_N$$

energia kropki z $N+1$ elektronami energia kropki z N elektronami

Proces tunelowanie przez kropkę kwantową



Potencjały chemiczne źródła i drenu

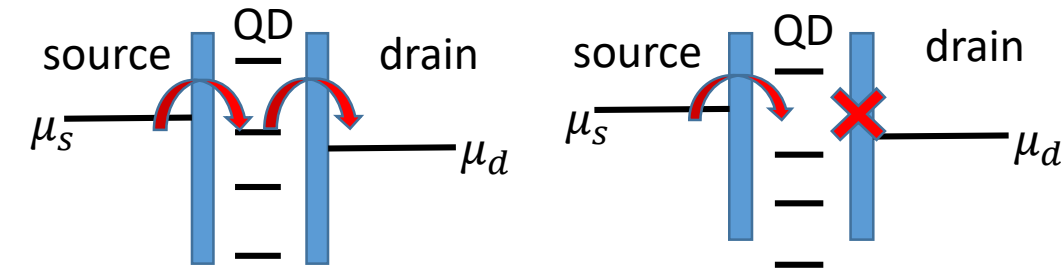
$$\mu_{d(s)} = \mu_{d(s)}^0 - eV_{d(s)}$$

Warunek transportu elektronowego przez kropkę kwantową

$$\mu_s \geq \mu_{N+1} \geq \mu_d$$

Kropki kwantowe – transport

Proces tunelowanie przez kropkę kwantową



Potencjał chemiczny kropki

$$\mu_{dot} = E_{N+1} - E_N = \varepsilon_{N+1} + \frac{e^2}{2C_\Sigma} (2N + 1) - e\phi$$

Gdy założymy, że $-eV_{sd} = \mu_d - \mu_s \rightarrow 0$, to z warunku na transport otrzymujemy

$$e\phi_{N+1} = -\phi_s + \varepsilon_{N+1} + \frac{e^2}{2C_\Sigma} (2N + 1)$$

Odległości pomiędzy pikami

$$e(\phi_{N+1} - \phi_N) = \varepsilon_{N+1} - \varepsilon_N + \frac{e^2}{C_\Sigma}$$

kwantowa blokada kulombowska

Warunek transportu elektronowego przez kropkę kwantową

$$\mu_s \geq \mu_{dot} \geq \mu_d$$

Energia układu N-elektronowego

$$E_{N+1} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i + \frac{e^2 N^2}{2C_\Sigma} - eN\phi$$

energia oddziaływania elektronowego

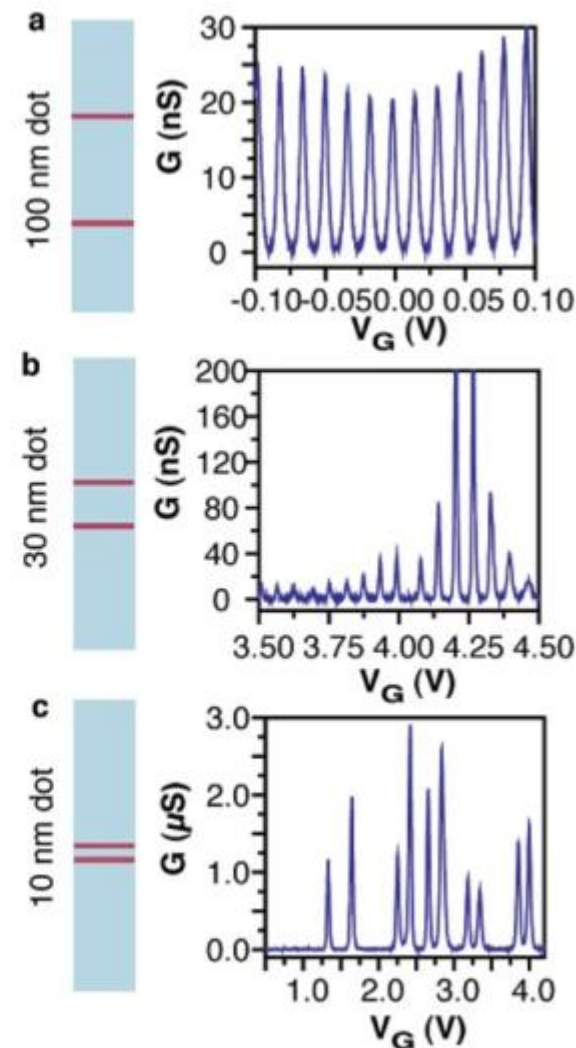
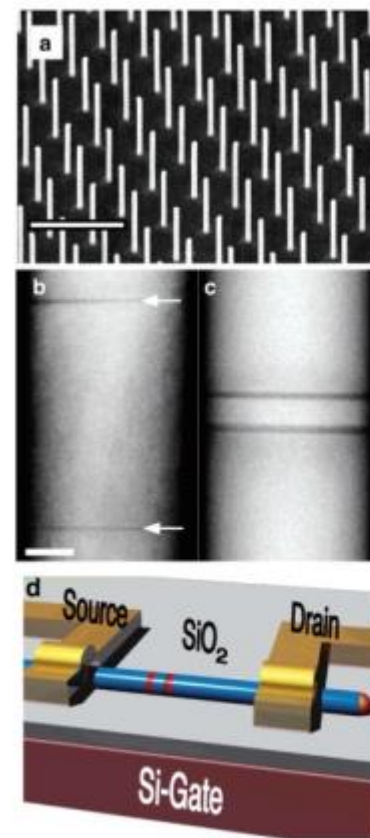
energia oddziaływania z potencjałem elektrostatycznym bramki

energia stanów jednoelektronowych

klasyczna blokada kulombowska

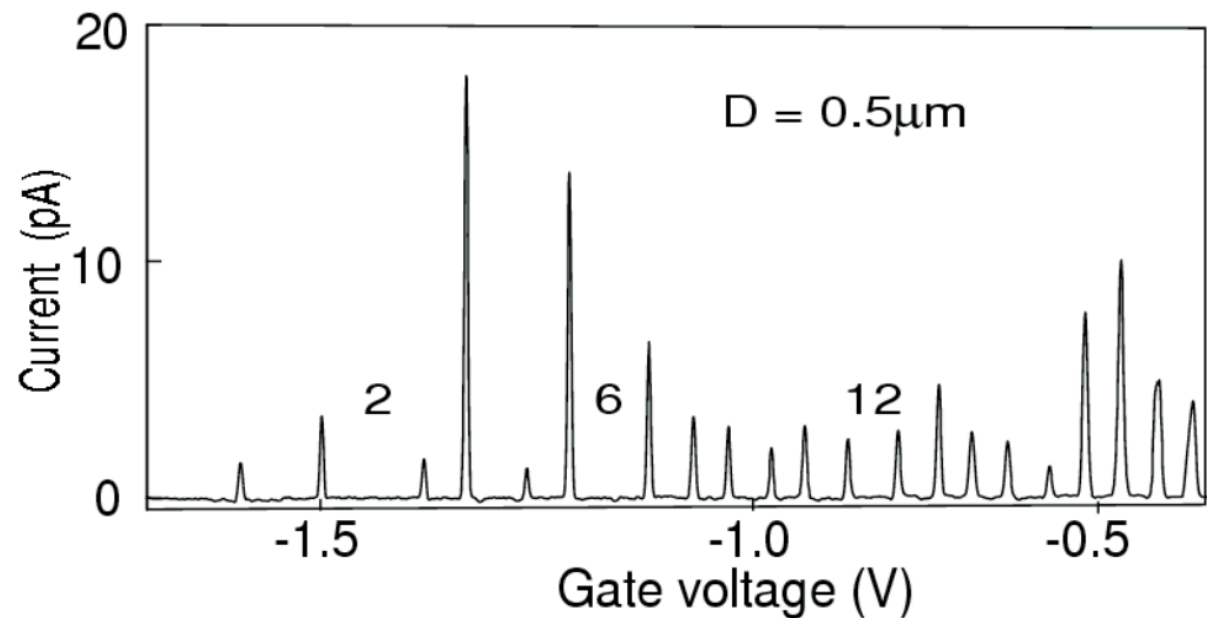
Kropki kwantowe - transport

- Dla szerokich kropek kwantowych poziomy kwantyzacji są blisko odległe i nie mają istotnego znaczenia. Na wykresie wyraźnie widać równoodległe piki odpowiadające elektrostatycznej blokadzie Coulomba.
- Dla małych kropek kwantowych poziomy kwantyzacji zaczynają odgrywać istotną rolę. Na wykresie wyraźnie widać piki których odległości określone są elektrostatyczną blokadą Coulomba oraz efektem kwantyzacji energii.



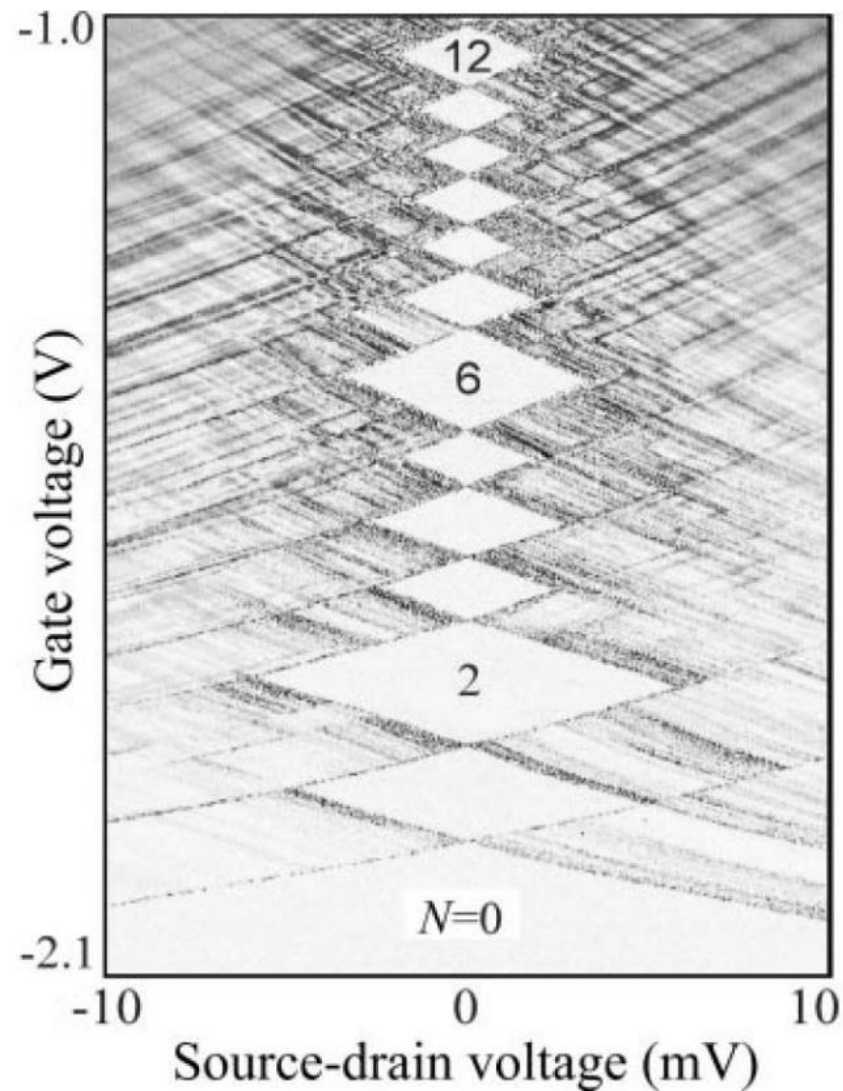
a

Kropki kwantowe - transport

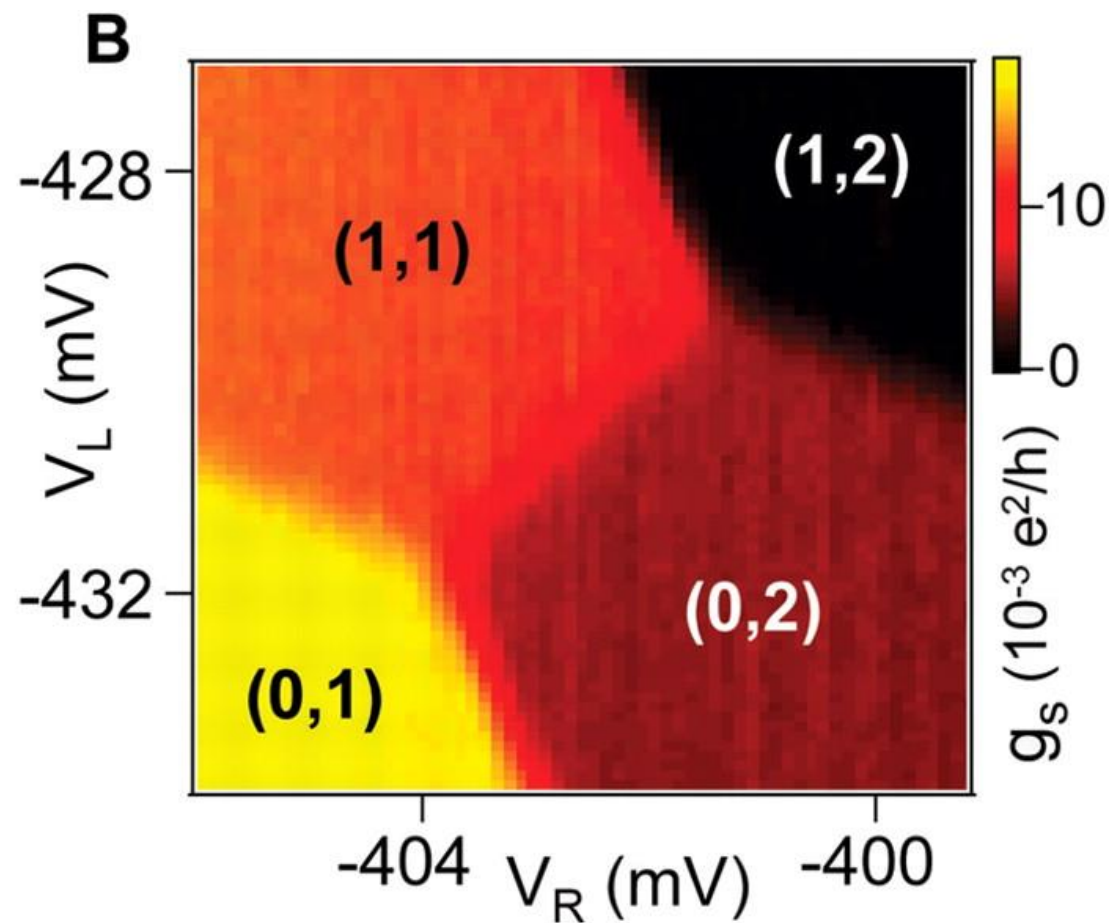
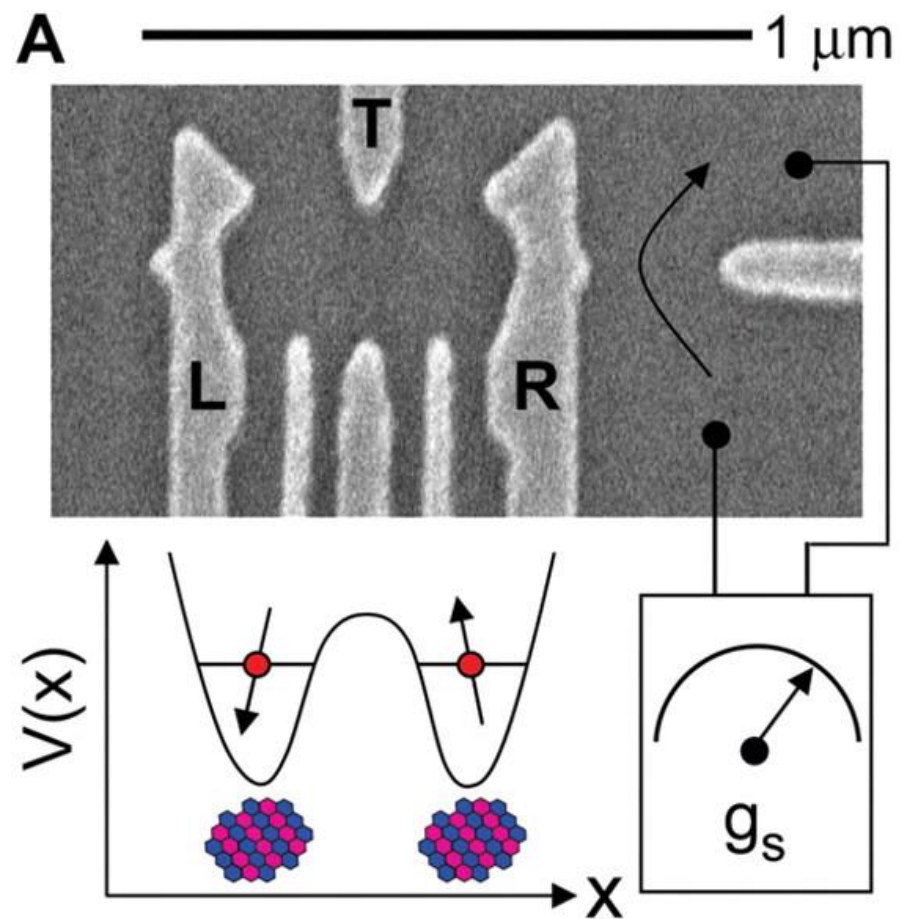


Prąd w funkcji napięcia bramki dla niewielkiego napięcia V_{sd}

Przewodnictwo różniczkowe w funkcji napięcia bramki oraz napięcia źródło-dren. Białe obszary odpowiadają blokadzie Kulombowskiej.

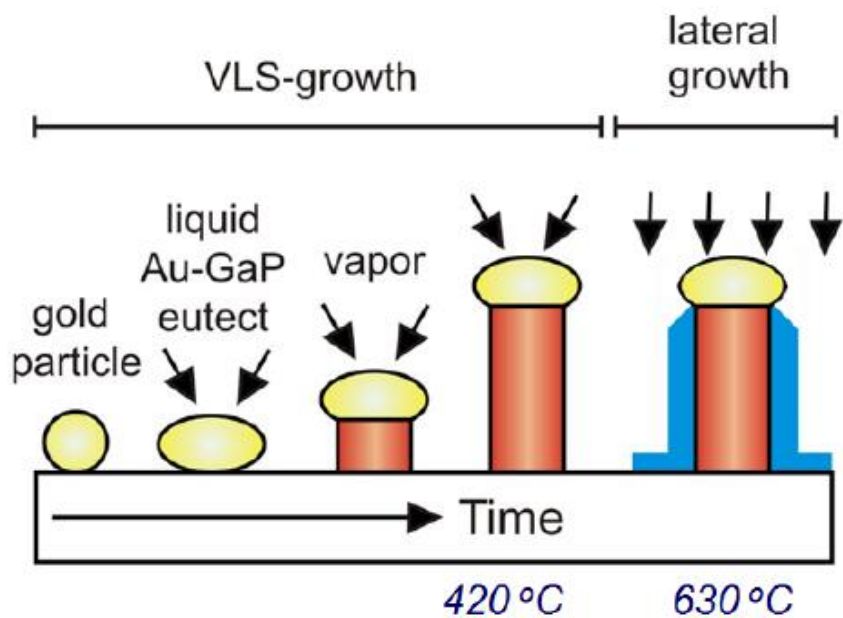


Sprzężone kropki kwantowe



Druty kwantowe

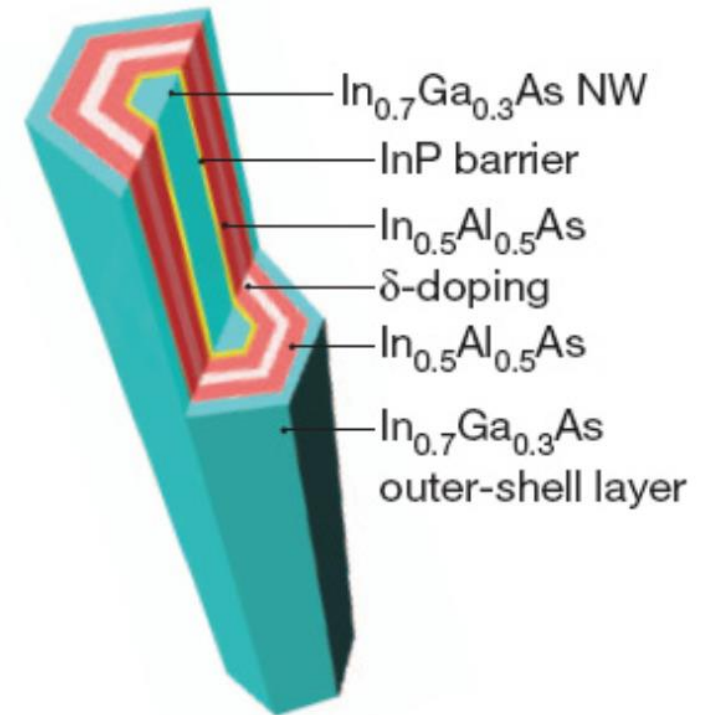
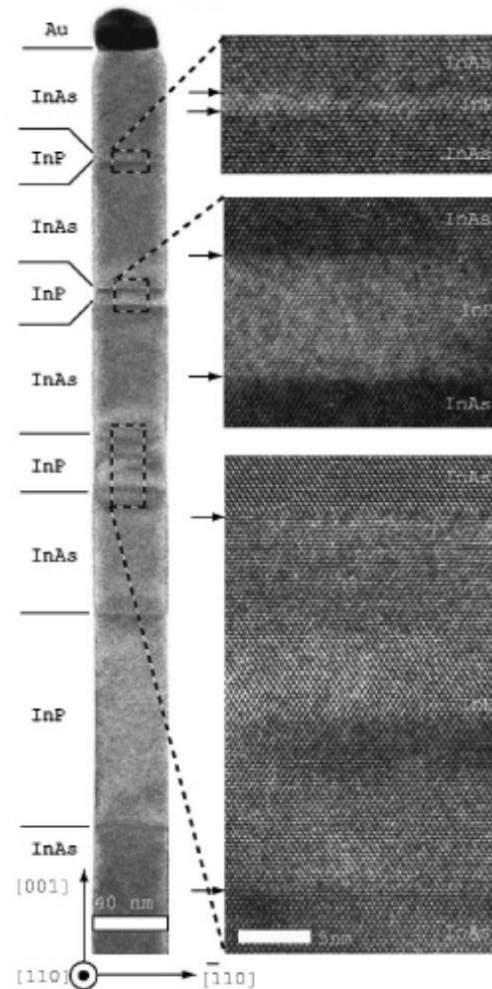
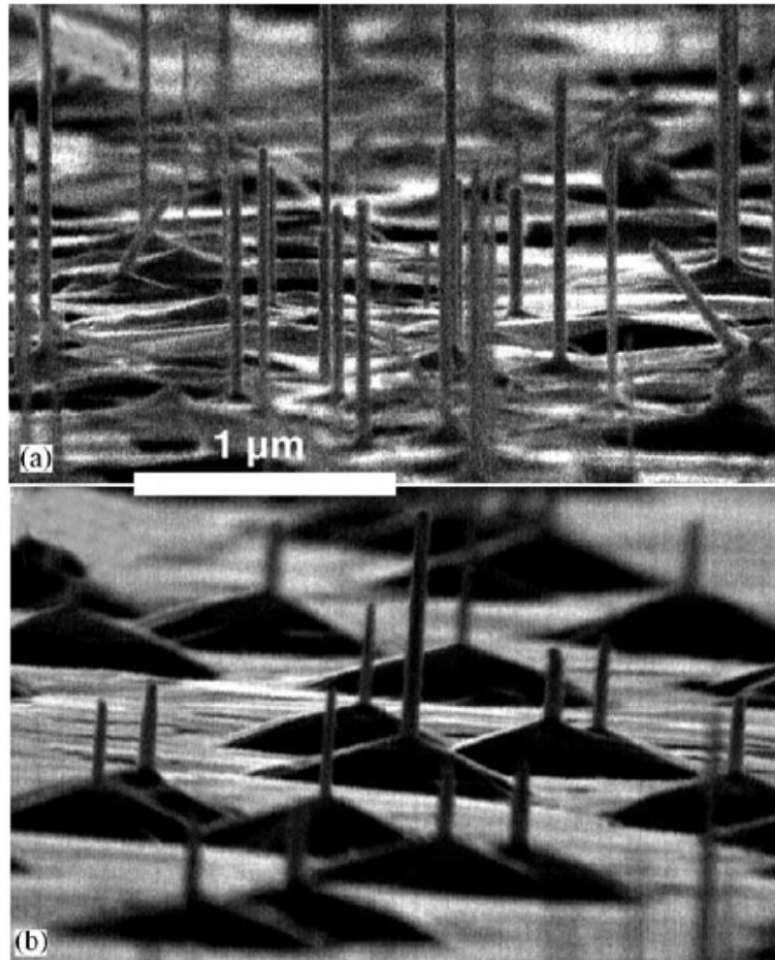
Nanodruły półprzewodnikowe są quasi-jednowymiarowymi nanostrukturami o kształcie bardzo wąskiego graniastostupa (o podstawie koła trójkąta lub sześciokąta) o średnicy podstawy od ~ 20 nm do ~ 100 nm i wysokości od ~ 100 nm do ~ 2000 nm. Zwykle do obu końców nanodrutu podłączane są elektrody (źródła i dreny), a z boku nanodrutu umieszczone są elektrody bramek.



Metoda VLS (vapor-liquid-solid)

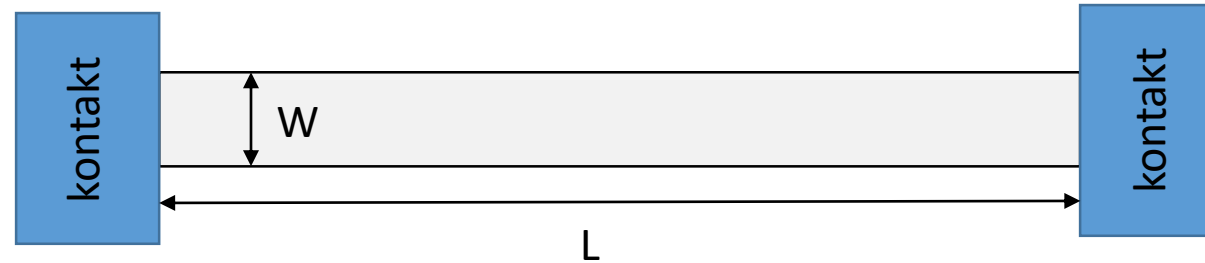
- Powierzchnia półprzewodnika z naniesionymi kropkami metalu (Au) w temperaturze, w której metal (stop metalu z półprzewodnikiem) pozostaje ciekły.
- Prekursor chemiczny materiału półprzewodnika w postaci gazowej ($\text{SiH}_4\text{SiCl}_4\text{SiI}_2$) dostarczany jest do komory reakcji.
- Prekursor adsorbuje preferencyjnie na powierzchni ciekłej kropli metalu która katalizuje jego rozkład.
- Tworzy się ciekły przesycony roztwór (np. Si:Au).
- Z przesyconego roztworu wytrąca się stały półprzewodnik na granicy faz (przy interfacie –np. Si/Au) Metaliczna kropka unosi się do góry na wzrastającej kolumnie półprzewodnika

Druty kwantowe



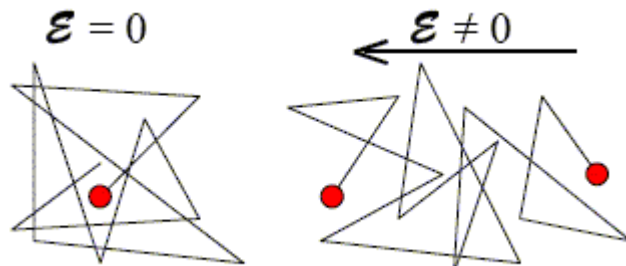
Druty kwantowe - transport

Schemat nanodrutu

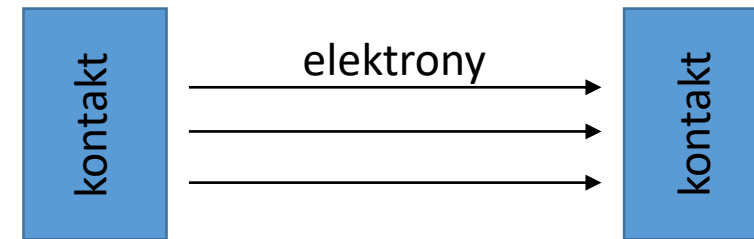


Transport w układach nanoskopowych

➤ **dryftowy i dyfuzyjny**



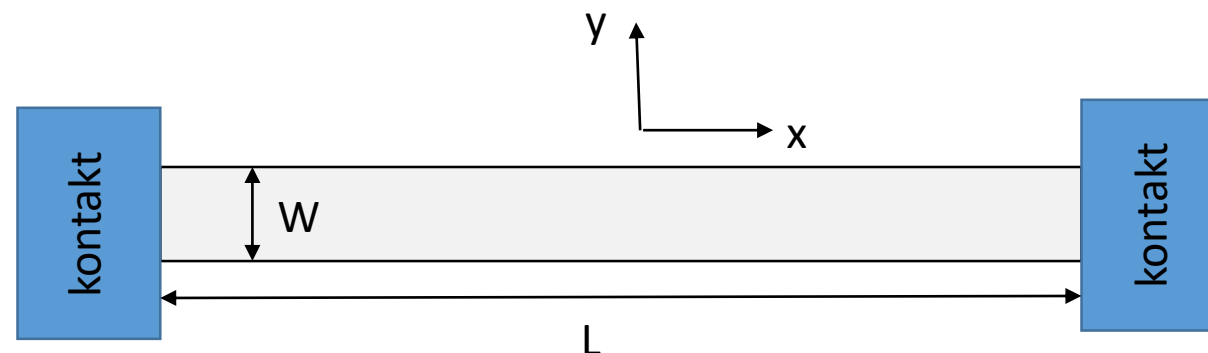
➤ **balistyczny**



W czystych nanodrutach półprzewodnikowych możemy mieć do czynienia w transportem balistycznym.

Druty kwantowe - transport

Schemat nanodrutu



Równanie Schrödingera

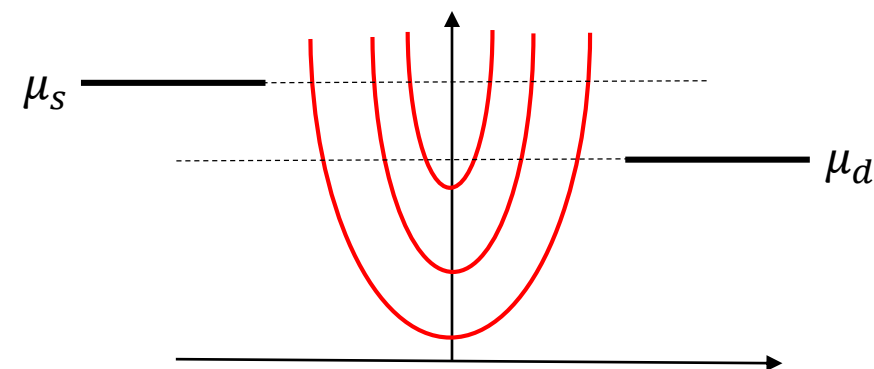
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{conf}(\mathbf{r}) \right] \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r})$$

Funkcja falowa

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \chi(y) e^{ikx} \quad \text{gdzie} \quad \chi(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{\pi n}{W} y\right)$$

Relacje dyspersji

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* W^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$



Druty kwantowe - transport

Zakładając, że kontakty są bezodbiciowe

$$i = i_{\rightarrow} - i_{\leftarrow}$$

gdzie prąd płynący w prawo i w lewo to odpowiednio

$$i_{\rightarrow} = \frac{e}{L} \sum_{n,k} V f(E_n(k), \mu_s) = \frac{e}{L} \sum_{n,k} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k} f(E_n(k), \mu_s)$$

Przechodząc z sumowaniem do całkowania

$$\sum_k \rightarrow 2(\text{spin}) \times \frac{L}{2\pi} \int dk$$

Otrzymujemy

$$i_{\rightarrow} = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{n,\min}}^{\infty} f(E_n(k), \mu_s)$$

Stąd całkowity prąd (**formuła Landauera**)

$$i = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{n,\min}}^{\infty} [f(E_n(k), \mu_s) - f(E_n(k), \mu_d)]$$

Druty kwantowe - transport

Dla niskich temperatur i M pasm

$$i = \frac{2e^2}{h} \frac{\mu_s - \mu_d}{e} M$$

Konduktancja

$$G = \frac{(\mu_s - \mu_d)/e}{i} = \frac{2e^2}{h} M$$

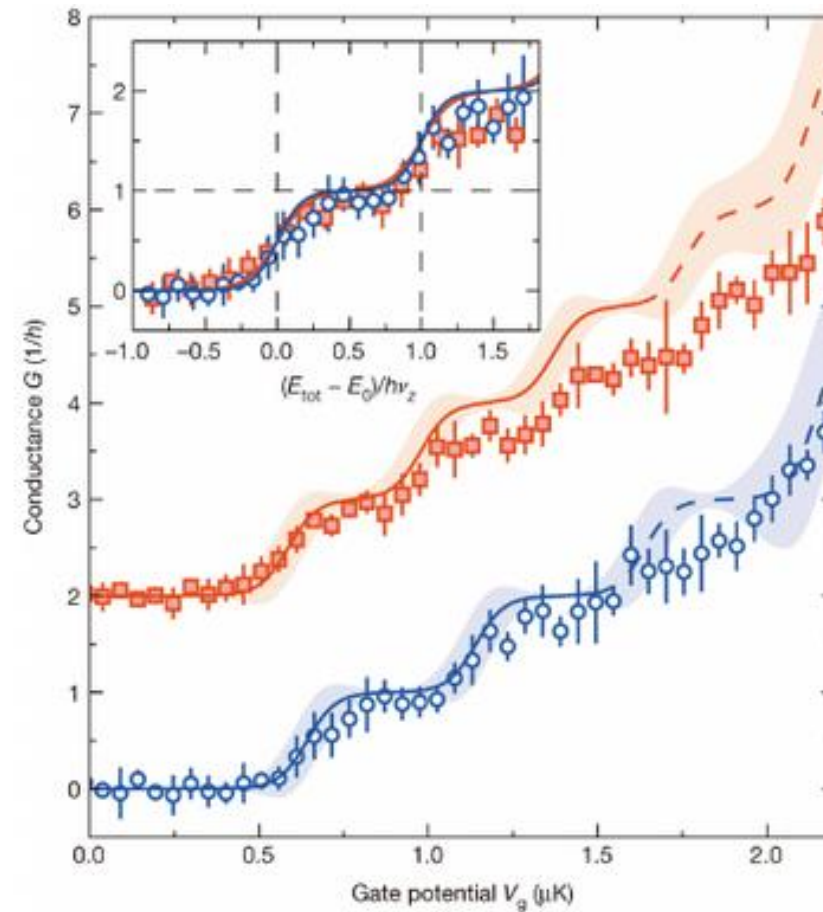
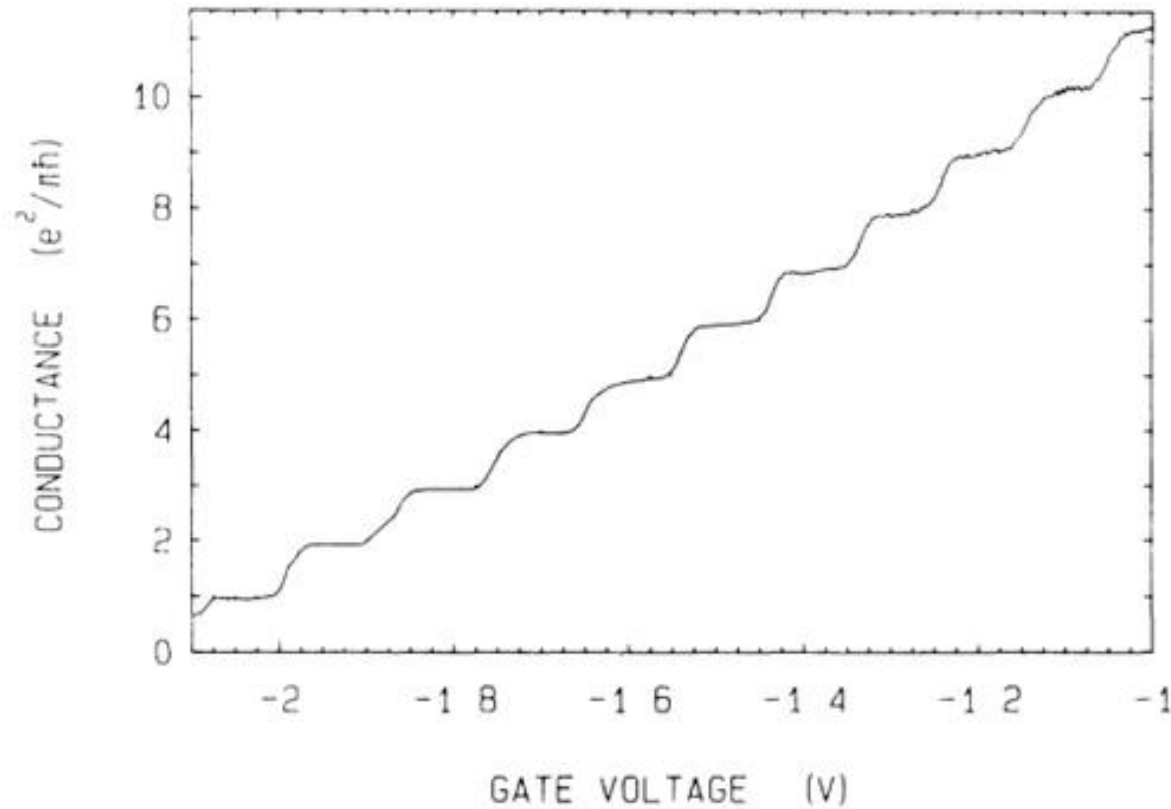
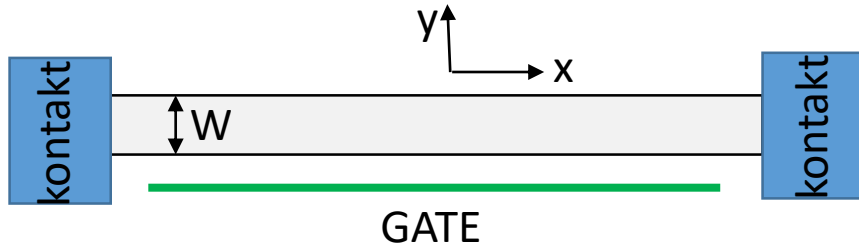
Rezystancja

$$R = G^{-1} = \frac{i}{(\mu_s - \mu_d)/e} = \frac{h}{2e^2 M} = \frac{12.9k\Omega}{M}$$

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

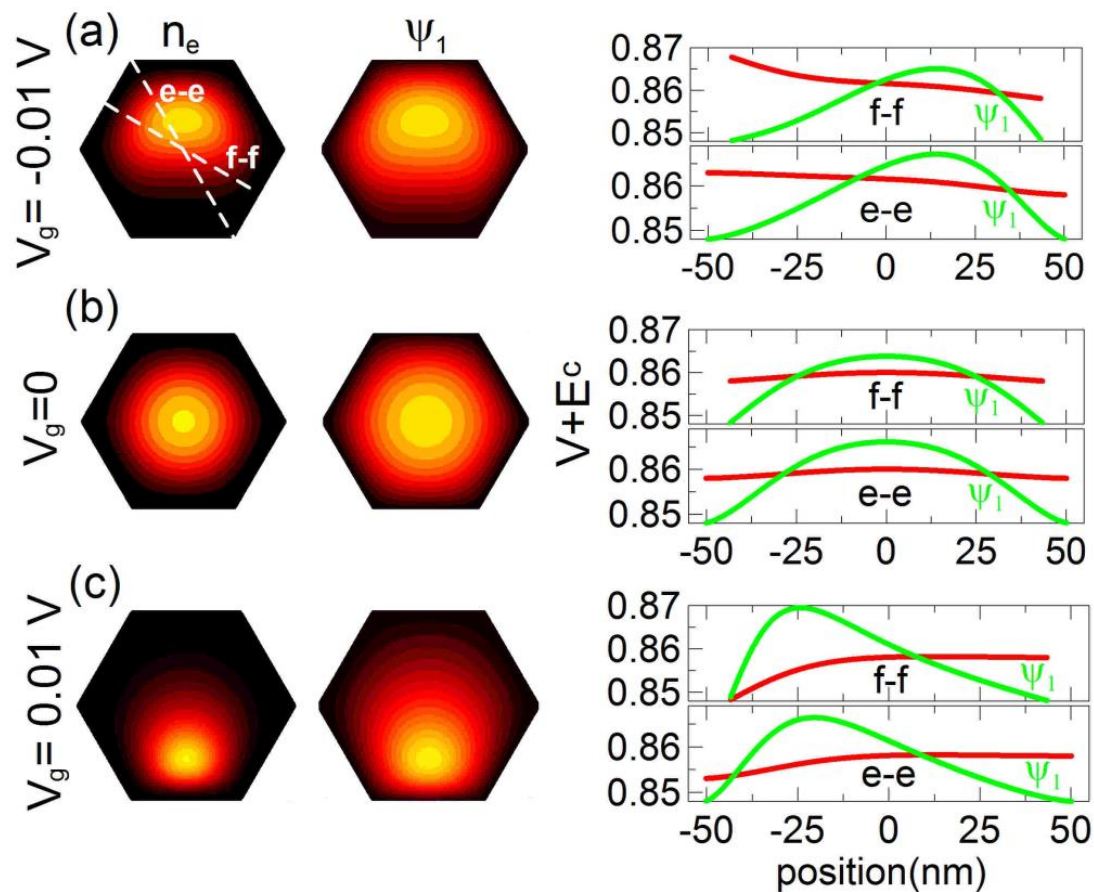
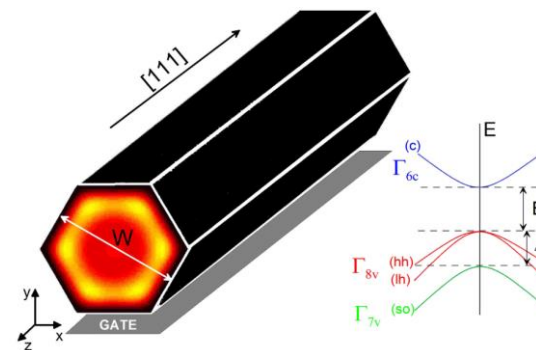
Kwant konduktancji

Druty kwantowe - transport

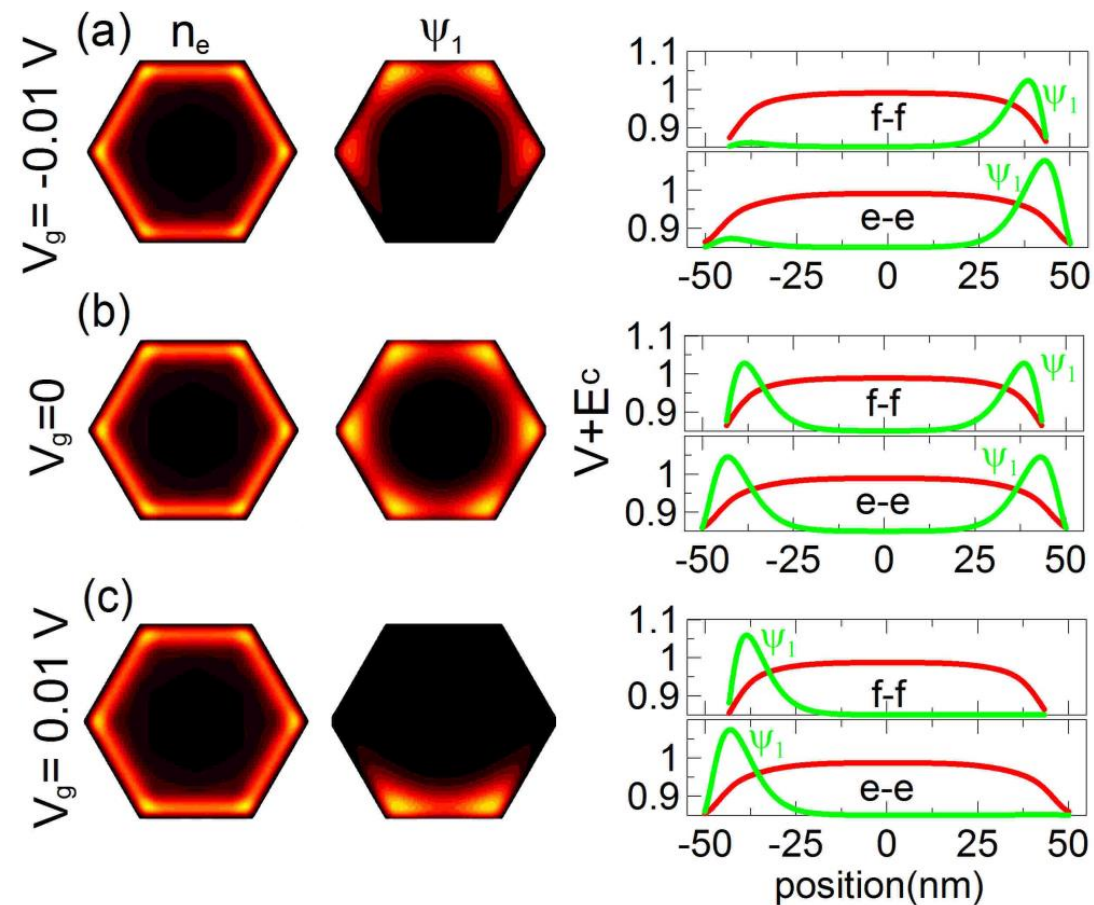


Druty kwantowe

Rozkład ładunku w nanodrutach o symetrii heksagonalnej

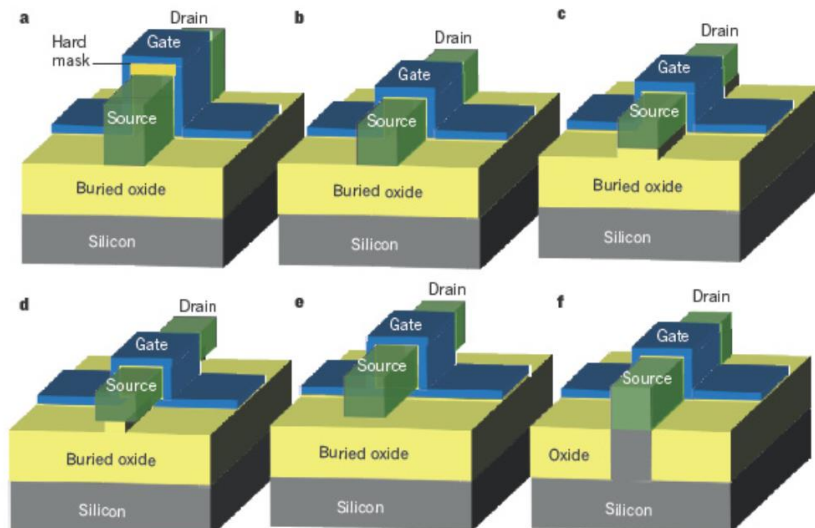
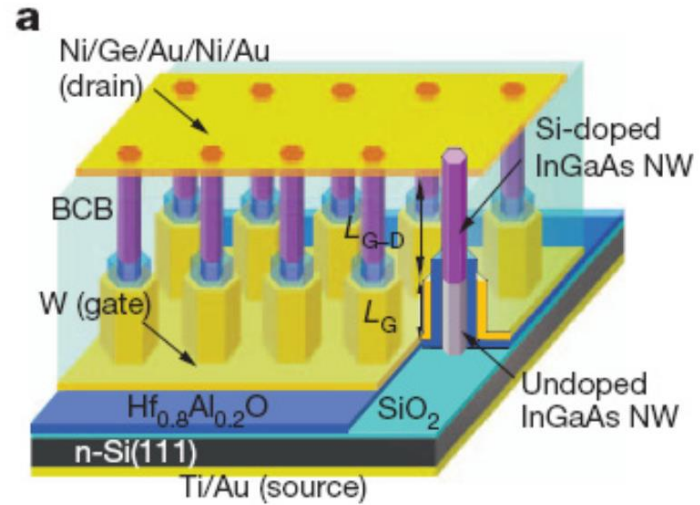


Niska koncentracja elektronów

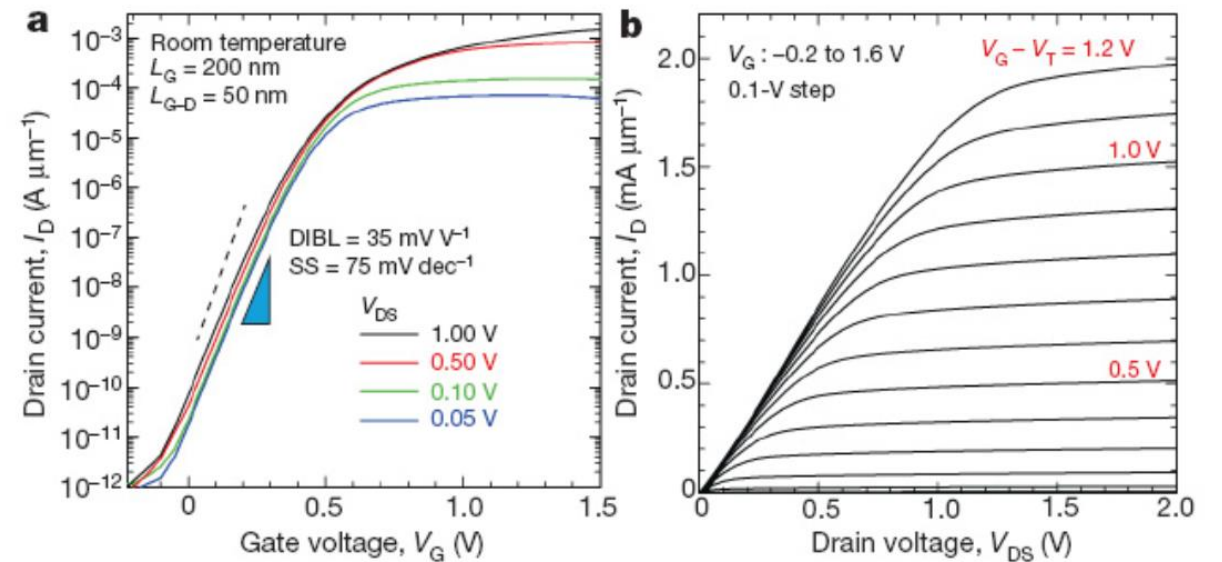


Wysoka koncentracja elektronów

Druty kwantowe



Zastosowanie nanodrutów do tworzenia nowych typów tranzystorów o lepszych parametrach.



Najważniejsze informacje z wykładu

- Kropka kwantowa to struktura zerowymiarowa, w której silne ograniczenie rozmiaru we wszystkich kierunkach prowadzi do kwantyzacji stanów energetycznych, dlatego jest nazywana często sztucznym atomem.
- Metodą pomiaru stanów kropki kwantowej jest spektroskopia transportowa, gdzie widoczne są zarówno kwantowa jak i klasyczna blokada kulombowska
- Nanodruty półprzewodnikowe to kwantowe układy jednowymiarowe.
- W zakresie balistycznym w układach tych możemy zaobserwować zjawisko kwantyzacji konduktancji.
- Perspektywy rozwoju dla nanostruktur półprzewodnikowych
 - (a) spintronika,
 - (b) komputery kwantowe,
 - (c) optoelektronika
 - (d) elektronika nowoczesna: tranzystor jednoelektronowy, itp