Univerzita Karlova v Praze Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Jan Tuček

Optické vlastnosti rezonančních tunelovacích diod

Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Milan Orlita, Ph.D.

Studijní program: Fyzika, Optika a optoelektronika, Optoelektronika a fotonika

Poděkování

Rád bych poděkoval všem, kteří mi pomáhali v průběhu práce, především vedoucímu RNDr. M. Orlitovi, Ph.D. a konzultantovi doc. RNDr. R. Grillovi, CSc. Dále děkuji doc. RNDr. M. Zvárovi, CSc. a doc. RNDr. P. Hlídkovi, CSc. za cenné rady a pomoc při realizaci jednotlivých experimentů.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne8.9.2008

Jan Tuček

Obsah

TEORETICKÁ ČÁST

1	Částice v potenciálové jámě					
	1.1	Pravoúhlá jáma konečné hloubky	8			
	1.2	Nízkodimenzionální systémy	10			
	1.3	Kvantové jámy v heterostrukturách	11			
2	Elektrony v krystalech 1					
	2.1	Pásová struktura III-V polovodičů	14			
	2.2	Heteropřechod	16			
	2.3	Metoda obálkové funkce	17			
3	Vliv	v elektrického a magnetického pole	19			
4	Tunelový transport					
	4.1	Potenciálový skok	24			
	4.2	Pravoúhlá bariéra	26			
	4.3	Proud	28			
	4.4	Rezonanční tunelování	31			
		4.4.1 Transmisní koeficient	32			
		4.4.2 Proud procházející tunelovací diodou	33			
5	Rezonanční tunelovací diody 3					
	5.1	Fyzikální procesy v RTD	35			
	5.2	Modely RTD	37			
		5.2.1 Model obálkové funkce	37			
		5.2.2 Kinetické modely	39			
6	Pře	hled literatury	42			

EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

7	Popis experimentu a vzorků		
	7.1	Experimentální uspořádání	50
	7.2	Charakteristika proměřovaných vzorků	51
8	Nelineární jevy ve fotoluminiscenci studovaných vzorků		58
	8.1	Model rezonančního tunelování	58
	8.2	Model asymetrické jámy	68
	8.3	Porovnání modelů	73
9	Záv	ěr	75

Název práce: Optické vlastnosti rezonančních tunelovacích diod Autor: Jan Tuček Katedra (ústav): Fyzikální ústav Univerzity Karlovy Vedoucí diplomové práce: RNDr. Milan Orlita, Ph.D. E-mail vedoucího: orlita@karlov.mff.cuni.cz

Abstrakt: Cílem této práce bylo studium optických vlastností rezonančních tunelovacích diod, konkrétně systémů obsahujících AlAs/GaAs/AlAs dvojitou bariéru a InGaAs kvantovou jámu. Všechny zkoumané vzorky byly připraveny metodou epitaxe z molekulárních svazků a byla u nich měřena převážně nízkoteplotní luminiscenční spektra. Pozorovali jsme silně nelineární závislost intenzity luminiscence na excitačním výkonu a magnetickém poli. K vysvětlení tohoto chování byly navrženy dva modely: jeden založený na rezonančním tunelování děr a druhý na formování vázaných stavů pro elektrony v asymetrické jámě.

Klíčová slova: Rezonanční tunelovací dioda, Fotoluminiscence, Tunelování, Asymetrická kvantová jáma

Title: Optical properties of resonant tunnelling diodes Author: Jan Tuček Department: Institute of Physics of Charles University Supervisor: RNDr. Milan Orlita, Ph.D. Supervisor's email address: orlita@karlov.mff.cuni.cz

Abstract: The aim of this work was the study of optical properties of resonant tunnelling diodes, namely systems including AlAs/GaAs/AlAs double barrier and InGaAs quantum well. All samples were grown by the molecular beam epitaxy and investigated using the standard low-temperature luminiscence experiment. We observed a strong nonlinearity of the optical response in excitation power and the magnetic field as well. Two different models based on the resonant tunnelling of holes and the asymmetric quantum well for electrons were suggested to explain this phenomenon.

Keywords: Resonant tunnelling diode, Photoluminescence, Tunnelling, Asymmetric quantum well

Použité zkratky

1D, 2D, 3D	Jedno-, dvou-, tří-dimenzionální (systém)
2DEG	Dvou-dimenzionální elektronový plyn
2DHG	Dvou-dimenzionální děrový plyn
BZ	Brillouinova zóna
DBQW	Kvantová jáma s dvojitou barérou
EPL	Elektro-fotoluminiscence
FWHM	Šířka spektra v polovině maxima
MBE	Epitaxe z molekulárních svazků
MPL	Magneto-fotoluminiscence
PL	Fotoluminiscence
RTD	Rezonanční tunelovací dioda (diody)
QD	Kvantová tečka (tečky)
QW	Kvantová jáma

Důležité symboly

a	šířka kvantové jámy
B_{\parallel}	magnetické pole v podélné orientaci
B_{\perp}	magnetické pole v kolmé orientaci
e	elementární náboj $(1.602 \times 10^{-31} \text{ kg})$
E_c	energie dna vodivostního pásu
E_{g}	šířka zakázaného pásu
E_v	energie vrcholu valenčního pásu
ε_r	relativní permitivita
ε_0	permitivita vakua $(8.854 \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1})$
F	intenzita elektrického pole
H	hamiltonián
HH	těžké díry
\hbar	redukovaná Planckova konstanta $(1.055 \times 10^{-34} \text{ Js})$
I(V)	volt-ampérová charakteristika
J	proudová hustota
k	vlnový vektor
k_B	Boltzmanova konstanta $(1.381 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1})$
LH	lehké díry
λ	vlnová délka
m	efektivní hmotnost částice
m_0	klidová hmotnost elektronu $(9.109 \times 10^{-31} \text{ kg})$
$m_{e(h)}$	efektivní hmotnost elektronu (díry)
р	hybnost
р	koncentrace děr
r	reflexní amplituda
r	polohový vektor
$\sigma^{+(-)}$	pravotočivá (levotočivá) kruhová polarizace
T	transmisní koeficient
t	transmisní amplituda
\mathcal{T}	teplota
au	čas
V	potenciál
V_0	hloubka kvantové jámy
x,y,z	prostorové souřadnice
ψ	vlnová funkce

Úvod

Je nemožné představit si moderní fyziku pevných látek bez polovodičových heterostruktur. Polovodičovým heterostrukturám a zvláště těm dvojitým, včetně kvantových jam, drátů a teček, se věnuje ve výzkumu většina fyziků zabývajících se polovodiči. Důvodem nejsou pouze jejich unikátní vlastnosti, které dovolují studovat množství fyzikálně zajímavých jevů, ale hlavně možnost jejich využití v polovodičových součástkách. Rychlý rozvoj této oblasti byl umožněn zejména díky velikému technologickému pokroku v metodách růstu krystalů a přípravě vzorků, který byl učiněn za posledních dvacet let.

Tématem této diplomové práce jsou rezonanční tunelovací diody (RTD), které jsou založeny na rezonanci elektronu-vlny mezi dvěma potenciálovými bariérami. Myšlenka rezonančního tunelování se objevila na počátku 70tých let, krátce poté, co se při růstu polovodičových krystalů začala uplatňovat epitaxe z molekulárního svazku (MBE). Od té doby je rezonanční tunelování předmětem intenzivního zájmu.

Přes svou jednoduchou strukturu jsou RTD užitečné při nejrůznějších experimentech zkoumajících kvantový transport v polovodičových nanostrukturách. V poslední době se RTD uplatňují jako silný nástroj při zkoumání nových fyzikálních jevů spojených se spinovou polarizací. Například mohou sloužit při injekci nebo detekci spinově polarizovaných elektronů.

Kapitola 1

Částice v potenciálové jámě

Při zachycení elektronu v úzké potenciálové jámě je jeho pohyb v jedné dimenzi omezen a dochází ke kvantování energie spojené s pohybem v tomto směru, tzn. dojde k vytvoření diskrétních energetických hladin. Jestliže budou vzdálenosti mezi hladinami velké, elektrony zůstanou uvězněny v základním stavu, čímž vznikne dvou-dimenzionální elektronový plyn (2DEG). V této kapitole se budeme zabývat chováním částice v potenciálové jámě. Je nutné zdůraznit, že budeme pro jednoduchost uvažovat většinou jedno-dimenzionální (1D) potenciálové jámy, pohyb v rovině jámy lze totiž snadno v hamiltoniánu separovat.

Na úvod popíšeme pravoúhlou kvantovou jámu konečné hloubky. Ta představuje nejjednodušší model, který však překvapivě dobře popisuje skutečné struktury.

1.1 Pravoúhlá jáma konečné hloubky

Předpokládáme pravoúhlou jámu hloubky V_0 a šířky *a*, znázorněnou na obrázku 1.1. Energie ε je měřena ode dna jámy. Stavy s energií $\varepsilon < V_0$ jsou vázány v jámě, zatímco stavy s $\varepsilon > V_0$ se mohou volně šířit ve směru *z*. Vázané stavy jsou popsány svou vazebnou energií *B*, což je energie potřebná k opuštění jámy. Je zřejmé, že $B = V_0 - \varepsilon$.

Vlnové funkce uvnitř jámy mají sudou nebo lichou symetrii. To můžeme zapsat jako

$$\psi(z) = \left\{ \begin{array}{c} \cos\\ \sin \end{array} \right\} kz,\tag{1.1}$$

pro-a/2 < z < a/2a odpovídající energi
e $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m.$ Mimo jámu splňuje vlnová funkce $\psi(z)$ nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + V_0\psi(z) = \varepsilon\psi(z), \qquad (1.2)$$



Obrázek 1.1: Pravoúhlá jáma konečné hloubky.

kde $\varepsilon < V_0$. Řešením je

$$\psi(z) = D \exp(\pm \kappa z) \tag{1.3}$$

a energie

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 - \varepsilon = B. \tag{1.4}$$

Hledáme řešení, která jsou kvadraticky integrabilní, tzn. že vlnové funkce limitně splňují $\psi(z) = 0$ pro $z \to \pm \infty$. Proto kladný exponent v rovnici (1.3) odpovídá z < 0 a záporný exponent z > 0. Jelikož víme, že vlnové funkce jsou sudé nebo liché, můžeme se omezit pouze na případ z > 0. Řešení pro z < 0 bychom poté nalezli ze symetrie.

Spojitost vlnové funkce vyžaduje splnění hraniční podmínky v bodě z = a/2. Pro vlnové funkce (1.1) a (1.3) tedy musí platit

$$\psi(a/2) = C \left\{ \frac{\cos}{\sin} \right\} \left(\frac{ka}{2} \right) = D \exp\left(-\frac{1}{2}\kappa a\right)$$
(1.5)

Podobně z podmínky pro spojitost derivací dostáváme

$$\frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=a/2} = Ck\left\{\frac{-\sin}{\cos}\right\}\left(\frac{ka}{2}\right) = -D\kappa\exp\left(-\frac{1}{2}\kappa a\right)$$
(1.6)

Vydělením rovnice (1.6) rovnicí (1.5) a dosazením k a κ dostaneme podle [1]

$$\begin{cases} -\tan\\ \cot \end{cases} \left(\frac{ka}{2}\right) = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2}} - 1.$$
 (1.7)

Rovnice (1.7) je transcendentní a je nutné ji řešit numericky. Za tím účelem je užitečné zavést bezrozměrnou proměnnou $\theta = ka/2$. Rovnice (1.7) poté podle [1]

přejde na tvar

$$\begin{cases} -\tan\\ \cot \end{cases} \theta = \sqrt{\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1},$$
 (1.8)

kde

$$\theta_0^2 = \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}.$$
 (1.9)

Obecně je počet řešení n dán výrazem

$$n = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}}$$
(1.10)

zaokrouhleným nahoru na nejbližší přirozené číslo. To znamená, že vždy existuje alespoň jedno řešení rovnice (1.8). Neboli, že 1D pravoúhlá jáma má vždy alespoň jeden vázaný stav, bez ohledu na to, jak je mělká nebo úzká. Tento závěr platí pro jakoukoliv 1D jámu a rovněž pro všechny 2D jámy. Jinak je tomu ve třech dimenzích, kdy musí jáma překročit kritický poloměr nebo hloubku, aby vázaný stav existoval.

1.2 Nízkodimenzionální systémy

V této části ukážeme, proč se 3D elektrony mohou chovat jako nízkodimenzionální.

Začneme 3D nečasovou Schrödingerovou rovnicí

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{R})\right]\psi(\mathbf{R}) = E\psi(\mathbf{R})$$
(1.11)

Ve vrstevnatých strukturách, můžeme celý problém velmi zjednodušit, neboť potenciál se mění pouze ve směru z kolmém na vrstvy. Toto zjednodušení můžeme použít i na kvantové jámy tvořené vrstvami GaAs a AlAs, které jsou předmětem této práce. Položíme-li tedy $V(\mathbf{R}) = V(z)$ má Schödingerova rovnice tvar

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(z)\right]\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$
(1.12)

V rovině (x,y) nepůsobí žádný potenciál a elektron se chová jako volná částice. Pohyb ve směru x a y tedy můžeme popsat rovinnými vlnami. Vlnová funkce má potom tvar

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u(z) \tag{1.13}$$

Dosadíme-li tuto rovnici do Schrödingerovy rovnice (1.12) a dále upravíme podle [1] dostaneme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]u(z) = \varepsilon u(z), \qquad (1.14)$$

kde

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}.$$
(1.15)

Toto je 1D Schödingerova rovnice pro z, ostatní dvě dimenze jsou eliminovány. Jejím řešením jsou vlnové funkce $u_n(z)$ s energiemi ε_n . Z rovnic (1.13) a (1.15) vidíme, že řešení původní 3D Schödingerovy rovnice je

$$\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r},z) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_n(z)$$
 (1.16)

$$E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \qquad (1.17)$$

kde jsme pro pohyb v rovině (x,y) zavedli 2D vektory $\mathbf{r} = (x, y)$ a $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$.

1.3 Kvantové jámy v heterostrukturách

V sekci 1.1 jsme předpokládali, že jáma a bariéra jsou tvořeny jedním materiálem. Ve skutečnosti však na vytvoření potenciálové jámy potřebujeme heteropřechod, tedy spojení dvou různých materiálů. Tuto skutečnost nyní budeme brát v úvahu. Abychom se vyhnuli dalším komplikacím, budeme předpokládat, že dno vodivostního pásu se pro oba materiály nachází v bodě Γ v k-prostoru.

Rozdílnost materiálů se projeví v různých efektivních hmotnostech (viz kapitolu 2.3). Nastávají tedy dva problémy: navazování vlnových funkcí na rozhraní a redukce 3D Schödingerovy rovnice na 1D.

Jestliže uvažujeme elektron vázaný v kvantové jámě, jsou jeho vlnové vektory uvnitř jámy a v bariéře podle [1] dány výrazy

$$k = \frac{\sqrt{2m_0 m_W (E - E_c^W)}}{\hbar}, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2m_0 m_B (E_c^B - E)}}{\hbar}, \qquad (1.18)$$

kde m_W je efektivní hmotnost v jámě a E_c^W energie dna vodivostního pásu v jámě. Stejným parametrům v bariéře odpovídají m_B a E_c^B . Hloubka jámy je $V_0 = E_c^B - E_c^W \equiv \triangle E_c$. Na rozhraní opět musí být vlnová funkce a její derivace spojitá, neboli

$$\frac{1}{m_W} \frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=a/2_-} = \frac{1}{m_B} \frac{d\psi}{dz}\Big|_{z=a/2_+}.$$
(1.19)

Z této rovnice dostaneme

$$\begin{cases} \tan \\ -\cot \end{cases} \theta = \sqrt{\frac{m_W}{m_B}} \left(\frac{\theta_0^2}{\theta^2} - 1\right),$$
 (1.20)

kde

$$\theta = \frac{ka}{2}$$
 a $\theta_0^2 = \frac{m_0 m_W V_0 a}{2\hbar^2}.$ (1.21)

Počet vázaných stavů je stejný jako v případě, kdy různé efektivní hmotnosti neuvažujeme. Závisí totiž pouze na θ_0 , čili na vlastnostech jámy. Různé efektivní hmotnosti se projeví v nižší energii vázaných stavů.

Další obtíže nastávají při redukci původně 3D Schrödingerovy rovnice na 1D. Schödingerovy rovnice pro oba materiály jsou (viz [1])

$$\left[E_c^W - \frac{\hbar^2}{2m_0 m_W} \nabla^2\right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(jáma)},\tag{1.22}$$

$$\left[E_c^B - \frac{\hbar^2}{2m_0m_B}\nabla^2\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \qquad \text{(bariéra)}. \tag{1.23}$$

Potenciál se mění pouze podél osy z, takže vlnovou funkci můžeme psát ve tvaru

$$\psi_{\mathbf{k},n} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_n(z) \tag{1.24}$$

Dosazením této vlnové funkce do rovnic (1.22) a (1.23) dostaneme 1D rovnice

$$\left[E_c^W - \frac{\hbar^2}{2m_0m_W}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_0m_W}\right]u_n(z) = Eu_n(z), \qquad (1.25)$$

$$\left[E_c^B - \frac{\hbar^2}{2m_0m_B}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_0m_B}\right]u_n(z) = Eu_n(z).$$
(1.26)

Energetický skok tvořící jámu nyní závisí na $k = |\mathbf{k}|$ a je dán výrazem

$$V_0(k) = \Delta E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \Big(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_W} \Big).$$
 (1.27)

Celková energie elektronu ve vázaném stavu je pak podle [1]

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_W} + \varepsilon_n(k), \qquad (1.28)$$

kde energie vázaného stavu ε_n rovněž závisí na k. To však lze obejít zavedením nové efektivní hmotnosti m_{eff} . Potom

$$E_n(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_n(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0 m_{eff}}.$$
(1.29)

Tyto nové efektivní hmotnosti závisejí na indexu vázaného stavu n a jsou tabelovány. Podle [1] spočívá jejich podstata ve skutečnosti, že elektron se část svého času nachází v bariéře a přebere některé její charakteristiky. Lze ukázat, že $m_{eff} \approx m_W P_W + m_B P_B$, kde P_W je pravděpodobnost výskytu elektronu v jámě a P_B pravděpodobnost výskytu v bariéře.

Kapitola 2

Elektrony v krystalech

2.1 Pásová struktura III-V polovodičů

Sloučeniny III-V nejčastěji krystalizují ve struktuře sfaleritu. Mřížka se skládá ze dvou vzájemně se prostupujících plošně centrovaných kubických mřížek. Mřížka sfaleritu není Bravaisovou mřížkou, protože elementární buňka obsahuje dva atomy.

Pásová struktura polovodičů je důsledkem řešení Schrödingerovy rovnice pro jeden elektron s energií ε

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}).$$
(2.1)

Jeden z nejdůležitějších teoretických základů pásové struktury je Blochův teorém, který říká, že pokud je potenciál $V(\mathbf{r})$ periodický s periodou mřížky, pak řešení Schrödingerovy rovnice (2.1) má tvar

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \qquad (2.2)$$

kde V je objem krystalu a $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ je funkce periodická v \mathbf{r} s periodou atomové mřížky. Z Blochova teorému lze podle [2] ukázat, že k určení energie stačí použít \mathbf{k} z primitivní buňky reciproké mříže. Standardní konvence je brát tzv. Wigner-Seitzovu buňku. Tato buňka je nazývána Brillouinova zóna (BZ) nebo častěji první Brillouinova zóna (1.BZ). Je tedy zřejmé, že vektor \mathbf{k} můžeme volit z 1.BZ. Dále, s přihlédnutím ke konečnosti krystalu, na funkci $\psi(\mathbf{r})$ aplikujeme Born-Kármánovy okrajové podmínky, což má za důsledek omezení na spočetné (v 1. BZ i konečné) množství vektorů \mathbf{k} v k-prostoru.

Rovnici (2.1) musíme dále doplnit o spin-orbitální interakci (ostatní relativistické korekce neuvažujeme), která je nezbytná pro správnou analýzu pásové struktury

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{4m_0^2c^2}(\sigma \times \nabla V(\mathbf{r}))\right]\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}).$$
(2.3)

Dosazením (2.2) do (2.3) dostaneme rovnici

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{4m_0^2c^2}(\sigma \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_0}(\mathbf{p} + (\sigma \times \nabla V(\mathbf{r})))\right] u_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}.$$
(2.4)

Pro první přiblížení pásové struktury použijeme metodu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Jedná se o poruchovou řadu v \mathbf{k} ve vybraném bodě 1. BZ. V našem případě to bude střed BZ, tedy bod Γ . Rovnici (2.4) můžeme podle [3] formálně přepsat do podoby

$$[H(\mathbf{k}=0) + W(\mathbf{k})] u_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}, \qquad (2.5)$$

poté vyřešit

$$H(\mathbf{k}=0)u_{n\mathbf{0}} = \varepsilon_{n\mathbf{0}}u_{n\mathbf{0}} \tag{2.6}$$

a člen $W(\mathbf{k})$ následně započíst standardním poruchovým počtem. Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice ve tvaru (2.6) dostaneme strukturu pásů v bodě Γ , tedy funkce u_{n0} s příslušnou energií ε_{n0} . Poruchový počet v druhém řádu dává podle [3] pro nenulová k energetické hladiny

$$\varepsilon_{n\mathbf{k}} = \varepsilon_{n0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{m \neq n} \frac{|\pi_{nm} \cdot \mathbf{k}|^2}{\varepsilon_{n0} - \varepsilon_{m0}}, \qquad (2.7)$$

kde vektor π je definován jako

$$\pi = \mathbf{p} = \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\sigma \times \nabla V) \qquad \mathbf{a} \qquad \pi_{nm} = \int_{\Omega} u_{n0}^* \pi u_{m0} d\Omega. \tag{2.8}$$

Integrujeme zde přes elementární celu krystalu Ω . Ze vztahu (2.7) můžeme určit tenzor efektivní hmotnosti pro *n*-tý pás podle definice (viz [3])

$$\frac{1}{\mu_n^{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{n\mathbf{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}.$$
(2.9)

Detailnější analýzu pásové struktury představuje Kaneův model. Kane přesně diagonalizoval poruchu W(k) pro konečný počet funkcí a poté odvodil pásovou strukturu z poruchového počtu druhého řádu. V krátkosti nastíníme první krok.

Místo 8 Blochových funkcí $|S \uparrow\rangle, |X \uparrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$ vytvoříme lineární kombinace těchto funkcí takové, že moment hybnosti $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \sigma$



Obrázek 2.1: Základní schéma pásové struktury sloučenin typu III-V (podle [4])

a jeho projekce J_z do osy z budou v této nové bázi diagonální. Matice poruchy W(k) je maticí 8×8 a její diagonalizací dostaneme hodnoty energií $\varepsilon(\mathbf{k})$. Tyto energie závisejí na třech parametrech ε_0 , \triangle a P. Význam prvních dvou parametrů je zřejmý z obrázku 2.1 a P je maticový element definovaný podle Bastarda v [3] jako

$$P = -\frac{i}{m_0} \langle S|p_x|X\rangle = -\frac{i}{m_0} \langle S|p_y|Y\rangle = -\frac{i}{m_0} \langle S|p_z|Z\rangle.$$
(2.10)

Výsledkem Kaneova modelu je pásová struktura na obrázku 2.1. Pásy jsou dvakrát degenerované a u jednotlivých pásů jsou uvedeny hodnoty celkového momentu hybnosti a jeho průmětu do osy z.

2.2 Heteropřechod

Epitaxní metody umožňují stavbu přesně definovaných materiálových rozhraní (heteropřechodů), tenkých vrstev i složitějších struktur. Pro popis pohybu elektronu v těchto strukturách využíváme poznatky získané studiem objemových krystalů, jinak řečeno předpokládáme zachování jejich pásové struktury, která je heteropřechodem pouze modifikována. Klíčovou úlohu v popisu navázání pásů hraje elektronová afinita \mathcal{X} . Afinita je definována jako energetický rozdíl mezi

hladinou vakua a dnem vodivostního pásu. Při znalosti elektronových afinit materiálů 1 a 2 můžeme podle [4] určit skok v profilu vodivostního pásu

$$\triangle E_c = \mathcal{X}_1 - \mathcal{X}_2 = \triangle \mathcal{X} \tag{2.11}$$

a valenčního pásu

$$\Delta E_v = \Delta E_{Gap} - \Delta \mathcal{X}, \qquad (2.12)$$

kde $\triangle E_{Gap}$ je rozdíl šířek zakázaného pásu materiálu 1 a 2. Hodnoty $\triangle E_c$ a $\triangle E_v$ nabývají obecně kladných i záporných hodnot a dávají tak možnost přípravy potenciálových jam i tunelovacích bariér.

2.3 Metoda obálkové funkce

Složitost řešení pohybu elektronu v objemovém krystalu si vyžaduje mnohá zjednodušení, která umožňují získat sice přibližná, zato však analytická řešení daných problémů. Nejjednodušší metodou popisu pohybu částice, elektronu nebo díry, je metoda efektivní hmotnosti (viz [4]). V okolí vhodného bodu BZ (extrému pásu) rotačně parabolicky aproximujeme průběh energie a poté považujeme částici za volnou. Periodický potenciál krystalu se takto projevuje pouze záměnou hmotnosti volného elektronu za hmotnost efektivní $m_0 \rightarrow m$.

Další přístup k problému - metoda obálkové funkce - představuje jisté zobecnění metody efektivní hmotnosti. Metoda umožňuje zjednodušený popis elektronových stavů v krystalu s dodatečným neperiodickým potenciálem $\phi(\mathbf{r})$, který se mění pozvolna vzhledem k mřížové konstantě krystalu. Doplněním $\phi(\mathbf{r})$ do rovnice (2.1) dostáváme

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \phi(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \qquad (2.13)$$

kde $V(\mathbf{r})$ je periodický potenciál krystalu. Stacionární stav $\psi(\mathbf{r})$ vyjádříme podle [4] jako sumu součinů blochovské funkce $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ v extrému pásu \mathbf{k}_0 a obálkové funkce $F_n(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n} F_{n}(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}_{0}}(\mathbf{r})$$
(2.14)

a odvodíme rovnici pro $F_n(\mathbf{r})$. Dosazením (2.14) do (2.13) dostáváme za obvyklých předpokladů pro nedegenerovaný (degeneraci v průmětu celkového momentu hybnosti neuvažujeme) *n*-tý pás rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_{e,n}} + \phi(\mathbf{r})\right] F_n(\mathbf{r}) = (\varepsilon - \varepsilon_n) F_n(\mathbf{r}), \qquad (2.15)$$

kde $m_{e,n}$ je efektivní hmotnost elektronu v *n*-tém pásu definovaná v druhém řádu poruchové teorie vztahem (2.9) a ε_n energie příslušného minima *n*-tého pásu. Pro degenerovaný pás je třeba užít první řád poruchové teorie pro degenerovaný případ. To nastává např. u valenčního pásu, kde dochází k degeneraci pásu lehkých a těžkých děr. Mimo pozvolna se měnícího potenciálu $\phi(\mathbf{r})$ lze podle [4] do rovnice (2.13) vložit i potenciál $V_n(z)$ odpovídající (skokovému) profilu *n*-tého pásu heterostruktury. Uvažujeme-li potenciál $\phi(\mathbf{r})$ závislý pouze na souřadnici *z*, pak symetrie problému umožňuje psát obálkovou funkci

$$F_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_{||}\cdot\mathbf{r}_{||}} \chi_n(z), \qquad (2.16)$$

kde S je plocha vzorku, $\mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$ a $\mathbf{r}_{||} = (x, y)$. Výsledkem je rovnice

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{\mu_n(z)}\frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2\mu_n(z)} + V_n(z) + \phi(z) + \epsilon_n\right]\chi_n(z) = \varepsilon\chi_n(z), \quad (2.17)$$

kde $\mu_n(z)$ nabývá v jednotlivých materiálech struktury hodnot $m_{e,n}$, tedy efektivních hmotností elektronu v uvažovaném pásu. Struktura rovnice (2.17) odpovídá stacionární Schrödingerově rovnici pro obálkovou funkci $\chi_n(z)$ s tzv. Ben Danielovým-Dukeovým hamiltoniánem. U obálkové funkce požadujeme spojitost funkcí

$$\chi_n(z)$$
 a $\frac{1}{\mu_n(z)} \frac{d\chi_n}{dz}$ (2.18)

kterou si vyžaduje požadavek zachování hustoty proudu.

Kapitola 3

Vliv elektrického a magnetického pole

Klasický hamiltonián popisující pohyb elektronu v systému za přítomnosti elektrického pole ve směru osy z a magnetického pole nakloněného o úhel θ v rovině (y,z), jak je znázorněno na obrázku 3.1, může být podle [5] napsán v následujícím tvaru

$$H = \frac{(p_x - By\cos\theta + Bz\sin\theta)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} - \varepsilon z + V(z), \quad (3.1)$$

kde V(z) je potenciál modelující dovolené a zakázané pásy podél osy z. Efektivní potenciál $U(z) = -\varepsilon z + V(z)$ je schématicky znázorněn na obrázku 3.1. Důležitým parametrem je vzdálenost, na které je vliv elektrického pole srovnatelný s vlivem magnetického pole: $l_0 = mF/eB^2$. Na vzdálenosti menší než l_0 elektrické pole dominuje a magnetického pole může být započteno jako porucha.

Pohyb ve směru x není volný, přesto platí $\dot{p}_x = 0$. Závislost x(t) může být vypočtena integrací rovnice

$$\dot{x} = \frac{1}{m}(p_x - By\cos\theta + Bz\sin\theta).$$
(3.2)

Jelikož p_x je integrálem pohybu, hamiltonián v rovnici (3.1) je ve skutečnosti 2D a p_x můžeme odstranit substitucí $y = \tilde{y} + p_x/B \cos \theta$. Tato změna vede podle [5] na 2D hamiltonián

$$H_2(\tilde{y}, z) = \frac{p_{\tilde{y}}^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{B^2}{2m} (\tilde{y}\cos\theta - z\sin\theta)^2 - \varepsilon z + V(z).$$
(3.3)

Po kanonické záměně proměnných

$$y' = \tilde{y}\cos\theta - z\sin\theta, \quad z' = \tilde{y}\sin\theta + z\cos\theta$$
 (3.4)



Obrázek 3.1: Uspořádání kvantové jámy (převzato z [5]).

se tento hamiltonián transformuje na

$$H_{2}^{'}(y^{'},z^{'}) = \frac{p_{y^{'}}^{2}}{2m} + \frac{B^{2}}{2m}y^{'2} + \frac{p_{z^{'}}^{2}}{2m} - \varepsilon(z^{'}\cos\theta - y^{'}\sin\theta) + V(z).$$
(3.5)

Kvantový hamiltonián (3.5) má stejný tvar jako jeho klasická analogie, ovšem p_y a p_z jsou zde operátory. Vzorec (3.5) se skládá ze dvou nezávislých částí. Obě dávají energii, která je v čase konstantní. Je zřejmé, že klasický pohyb v QW je integrabilní, a proto je užití hamiltoniánu (3.5) snadné při numerických výpočtech pohybu mezi srážkami. Právě srážky se stěnami (popsanými potenciálem V(z)) způsobují smíšení zmíněných dvou energií, což vede k tomu, že problém již není integrabilní.

Při $\theta = 0$ k žádnému smísení nedochází, při $\theta > 0$ již není pohyb integrabilní a chaotická komponenta fázového prostoru se zvětšuje se zvětšujícím se θ . Rovněž pokud zvětšujeme *B* při zafixovaném θ regulární oblasti fázového prostoru se stávají chaotickými (viz obrázek 3.2).

Pokud systém vložíme do elektrického pole, nosiče náboje se hromadí u povrchu bariéry na emitorové straně a vzniká 2DEG, což je výchozí stav pro elektrony tunelující do QW.

Energie odpovídající hamiltoniánu (3.5) je dána výrazem $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$, kde



Obrázek 3.2: Poincarého plochy pro $\theta = 0$, z = 0 a různá magnetická pole. V grafech je vyneseno \dot{y}/\dot{y}_0 versus y/y_0 , kde $y_0 = \sqrt{2mE/B}$ a $\dot{y}_0 = \sqrt{2E/m}$. Velká stabilní oblast napravo v (a) odpovídá dráze s jedním odrazem, oblast nalevo dráze se čtyřmi odrazy. Jak se magnetické pole zvětšuje, stabilní oblast se posouvá doprava (b), (c), (d) až nakonec zmizí (e),(f) (převzato z [5]).

 ψ je vlnová funkce, kterou můžeme napsat v následujícím tvaru

$$\psi(y,z) = \psi(y)\chi(z). \tag{3.6}$$

 $\chi(z)$ je 1D vlnová funkce pro pohyb ve směru z splňující rovnici

$$\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m} + U(z)\right)\chi(z) = E_{(u)}\chi(z).$$
(3.7)

Vlnová funkce pro pohyb v rovině (x,y) $\psi_n(y)$ je dána rovnicí

$$\left(\frac{1}{m}(B_{\parallel}y + B_{\perp}\langle z \rangle)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m}\right)\psi(y) = E_{(x,y)}\psi(y), \tag{3.8}$$

kde $B_{\parallel} = B \cos \theta$ a $B_{\perp} = B \sin \theta$ (příčný a kolmý směr vzhledem k elektrickému poli). Důležité je, že hodnota energie je posunutá vlivem diamagnetického členu v poruchovém rozvoji a odpovídající energie je tedy součtem tří členů

$$E = E_{(z)} + E_{(\text{diam})} + E_{(x,y)}.$$
(3.9)

První člen je neporušená energie pro vlnovou funkci $\chi(z),$ druhý je diamagnetický posun

$$E_{\text{(diam)}} = \frac{B_{\perp}^2}{2m} (\langle z^2 \rangle - \langle z \rangle^2), \qquad (3.10)$$

kde $\langle ...\rangle=\int \chi(z)...\chi(z)dz$ je středování přes funkci $\chi(z)$ a třetí člen je energie Landauovy hladiny

$$E_{(x,y)} = \frac{B_{\parallel}}{m} (n+1/2).$$
(3.11)

Při dostatečně velkém magnetickém poli a při nízkých teplotách bude obsazen pouze nejnižší stav s n = 0. Odpovídající vlnová funkce (s $p_x = 0$) je

$$\psi_0(y) = \left(\frac{B_{\parallel}}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}B_{\parallel}(y-\tilde{y})^2\right),$$
(3.12)

kde $\tilde{y} = \langle z \rangle \tan \theta$ je posun vlivem diamagnetického členu v poruchovém rozvoji. Tři členy v rovnici (3.9) mají podle [5] následující tvar:

$$E_{(z)} = \alpha (\varepsilon^{2}/m)^{1/3}, E_{(\text{diam})} = \beta B_{\perp}^{2}/(m)^{5/3} \varepsilon^{2/3}, E_{(x,y)} = \gamma B_{\parallel}/m,$$
(3.13)

kde α, β, γ jsou normovací faktory.

Obecné exaktní řešení pohybu ve směru os
yzmá podobu lineární kombinace Airyho funkcí. Pro jedno
duchost lze však užít předpis pro normovanou vlnovou funkci popisující pohyb
 ve směru osyz (viz[5])

$$\chi(z) = 2a^{-3/2}z \exp(z/a), \quad -\infty \le z \le 0.$$
(3.14)

Parametraurčíme z podmínky minima energie

$$E_{(z)} = \int \chi \left(-\frac{1}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \epsilon z \right) \chi \mathrm{d}z.$$
(3.15)

Kapitola 4 Tunelový transport

V předcházejících kapitolách jsme ukázali, jak může být elektron zachycen v kvantové jámě a nastínili jsme mechanismus vytvoření 2DEG. V této kapitole se zaměříme na pohyb volného elektronu přes potenciálovou bariéru a výsledky poté využijeme k popisu rezonančního tunelování. V celé kapitole budeme předpokládat, že elektrony jsou koherentní. Jinými slovy, že je můžeme popisovat jako vlny. Tento zjednodušující předpoklad je samozřejmě nerealistický a budeme ho v další kapitole.

4.1 Potenciálový skok

Budeme uvažovat elektron s energií E, pohybující se ve směru z přes potenciálový skok v bodě z = 0 jak ukazuje obrázek 4.1. Potenciál V(z) se mění z hodnoty 0 pro z < 0 na hodnotu V_0 pro z > 0.



Obrázek 4.1: Potenciálový skok o výšce V_0 v bodě z = 0. Nalevo je příchozí a odražená vlna, napravo vlna prošlá (podle [1]).



Obrázek 4.2: Obecný transmisní problém s nespecifikovanou "bariérou" oddělující oblast 1 a oblast 2 (podle [1]).

Klasický výsledek říká, že pokud je energie elektronu $E < V_0$, tak se elektron vždy odrazí, zatímco pokud je $E > V_0$ elektron vždy přes bariéru projde. V kvantové mechanice toto, díky vlnovému charakteru částic, neplatí.

Uvažujeme dopadající vlnu $\exp(ik_1z)$ v oblasti 1 pro z < 0 nalevo od potenciálového skoku. Časový faktor $\exp(-iEt/\hbar)$ je stejný pro všechny vlny a budeme ho zanedbávat. Od potenciálového skoku se mohou šířit dvě vlny: odražená vlna $r \exp(-ik_1z)$ v oblasti 1 a prošlá vlna $t \exp(ik_2z)$ v oblasti 2. Koeficienty r a tjsou reflexní a transmisní amplitudy a jsou obecně komplexní. Vlnové vektory jsou dány rovnicemi

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$
 a $k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$. (4.1)

Nejprve předpokládejme, že $E > V_0$, potom k_2 je reálný a vlna se může šířit. V nejobecnějším případě na potenciálový skok může dopadat vlna i zprava jak je tomu na obrázku 4.2. A, B, C a D jsou amplitudy příslušných vln. Schrödingerova rovnice má poté tvar

$$\psi(z) = \begin{cases} A \exp(ik_1 z) + B \exp(-ik_1 z), & z < 0; \\ C \exp(ik_2 z) + D \exp(-ik_2 z), & z > 0. \end{cases}$$
(4.2)

Uvážením hraničních podmínek dostaneme vyjádření amplitud na levé straně pomocí amplitud na pravé straně (viz [1]). Podmínky spojitosti pak můžeme splnit položením A=1, B=r, C=t a D=0, čímž dostaneme

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \qquad r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}.$$
(4.3)

Spíše než amplitudy nás však většinou zajímá tok nebo proud elektronů. Proto vyjádříme transmisní a reflexní koeficient jako podíl hustoty prošlého resp. odraženého proudu a hustoty dopadajícího proudu

$$T = \frac{(\hbar k_2/m)|t|^2}{(\hbar k_1/m)} = \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2},$$
(4.4)

$$R = \frac{(\hbar k_1/m)|r|^2}{(\hbar k_1/m)} = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2.$$
(4.5)

Platí, že každá částice musí projít nebo se odrazit, tedy

$$R+T=1, (4.6)$$

což rovnice (4.4) a (4.5) splňují.

Jestliže $E < V_0$, vlny napravo od potenciálového skoku jsou evanescentní (reálné, exponenciálně tlumené) s vlnovým vektorem κ_2 daným rovnicí

$$\kappa_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}.$$
(4.7)

Odcházející vlna se potom změní z $C \exp(ik_2 z)$ na exponenciálně klesající $C \exp(-\kappa_2 z)$ a příchozí vlna na exponenciálně rostoucí $D \exp(+\kappa_2 z)$, neboli nahradíme k_2 výrazem $+i\kappa_2$. Pro reflexní resp. transmisní amplitudy potom dostáváme

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + i\kappa_2}, \qquad r = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2}.$$
 (4.8)

Amplitudy r a t jsou komplexní. Exponenciálně tlumenou vlnou není přenášen žádný proud, tedy T = 0 a $R = |r|^2 = 1$. dostáváme tedy dokonalý odraz jako v klasickém případě. Exponenciálně tlumená část vlnové funkce sice proniká do bariéry (tuneluje), ale nepřenáší žádný proud.

Transmisní koeficient T(E) je znázorněn na obrázku 4.3. Klasický výsledek říká, že T=1 pro všechny energie větší než výška bariéry. Kvantově-mechanický výsledek se klasickému výsledku blíží pouze při vyšších energiích. Ve skutečnosti $T \to 0$ jako druhá odmocnina pro $E \to V_0$.

4.2 Pravoúhlá bariéra

Vztahy mezi čtyřmi vlnami v oblastech 1 a 2 znázorněnými na obrázku 4.2 můžeme popsat pomocí tzv. *T-matice*

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T^{(21)} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11}^{(21)} & T_{12}^{(21)} \\ T_{21}^{(21)} & T_{22}^{(21)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}.$$
 (4.9)

Výhodou *T-matic* je možnost popsání složitějších struktur prostřednictvím obyčejného násobení matic. *T-matice* pro potenciálovou bariéru znázorněnou na obrázku 4.2 má tvar (viz [1])

$$T^{(21)} = \frac{1}{2k_2} \begin{pmatrix} k_2 + k_1 & k_2 - k_1 \\ k_2 - k_1 & k_2 + k_1 \end{pmatrix} \equiv T(k_2, k_1).$$
(4.10)



Obrázek 4.3: Transmisní koeficient T(E) jako funkce energie E pro potenciálový skok s výškou 0.3 eV. Čárkovaně je vyznačen klasický výsledek (podle [1]).

Rovnice (4.10) platí pokud $E > V_0$. Pro $E < V_0$ musíme položit $k_2 = i\kappa_2$. Jiný způsob zápisu *T*-matice pomocí t a r je podle [1]

$$T = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix}.$$
 (4.11)

Je nutné podotknout, že jsme dosud popisovali pouze bariéru umístěnou v počátku souřadnic, tedy T(0). Zobecnění na bariéru v bodě z = d spočívá ve změně fáze vlny, která dopadá na bariéru. Podle [1] můžeme T(d) zapsat takto:

$$T(d) = \begin{pmatrix} e^{-ik_2d} & 0\\ 0 & e^{ik_2d} \end{pmatrix} T(0) \begin{pmatrix} e^{ik_1d} & 0\\ 0 & e^{-ik_1d} \end{pmatrix}.$$
 (4.12)

Budeme uvažovat bariéru symetrickou vzhledem k počátku souřadnic tvořenou potenciálem $V(z) = V_0$ pro |z| < a/2 a V(z) = 0 všude jinde (viz obrázek 4.4) a také $E > V_0$. *T-matici* bariéry můžeme sestavit ze dvou *T-matic* potenciálových skoků v bodech $z = \pm a/2$, neboli

$$T^{(31)} = \begin{pmatrix} e^{-ik_1a/2} & 0\\ 0 & e^{ik_1a/2} \end{pmatrix} T(k_1, k_2) \begin{pmatrix} e^{ik_2a/2} & 0\\ 0 & e^{-ik_2a/2} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} e^{ik_2a/2} & 0\\ 0 & e^{-ik_2a/2} \end{pmatrix} T(k_2, k_1) \begin{pmatrix} e^{-ik_1a/2} & 0\\ 0 & e^{ik_1a/2} \end{pmatrix}.$$
(4.13)



Obrázek 4.4: Potenciálová bariéra: $V(z)=V_0$ pro |z| < a/2 a V(z)=0 všude jinde (podle [1]).

Vynásobením můžeme určit transmisní amplitudu $t=1/T_{22}$ a z ní koeficient transmiseT pro $E>V_0$

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2\sin^2 k_2 a} = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)}\sin^2 k_2 a\right]^{-1}, \quad (4.14)$$

kde $k_2 = [2m(E - V_0)/\hbar^2]^{1/2}$. Jestliže $E < V_0$ dostáváme

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sin^2 \kappa_2 a\right]^{-1} \approx \frac{16E}{V_0} \exp(-2\kappa_2 a), \quad (4.15)$$

kde $\kappa_2 = [2m(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2}$ a přibližný výraz platí pro velké $\kappa_2 a$. Transmisní koeficient je znázorněn na obrázku 4.5.

Klasicky je T = 0 pro $E < V_0$ a T = 1 pro $E > V_0$. Kvantová mechanika dovoluje elektronu tunelovat skrz bariéru při $E < V_0$, přestože pravděpodobnost průchodu může být malá. Pokud $E > V_0$, transmisní koeficient je roven 1 pouze pro sin $k_2 a = 0$.

4.3 Proud

V předcházející části jsme ukázali, jak lze spočítat transmisní koeficient T jako funkci energie E. Nyní se zaměříme na veličinu, která je snadněji měřitelná. Tou je volt-ampérová charakteristika I(V).

Na obrázku 4.6 vidíme bariéru s přiloženým kladným napětím V na pravé straně. Napětí způsobí pokles energie o (-eV). V rovnováze je rozdělení elektronů dáno Fermiho funkcí, což však neplatí po přiložení napětí. Každá strana bariéry má potom svou kvazi-fermiho hladinu. Na levé straně ji označíme jako μ_L a napravo μ_R , přičemž platí $\mu_L - \mu_R = eV$.



Obrázek 4.5: Transmisní koeficient T(E) jako funkce energie E pro konečnou pravoúhlou potenciálovou jámu. Čárkovaně je vyznačen klasický výsledek (podle [1]).

Nejprve se omezíme na jednu dimenzi. V tom případě je podle Daviese [1] příspěvek k celkovému proudu od elektronů z levé strany bariéry dán integrálem

$$I_{L} = \frac{2e}{h} \int_{U_{L}}^{\infty} f(E, \mu_{L}) T(E) dE, \qquad (4.16)$$

kde integrujeme ode dna pásu U_L a koeficient 2 má původ ve spinu. Fermiho funkce $f(E, \mu_L)$ udává pravděpodobnost obsazení stavu a je dána Fermiho mezí μ_L v levém vodiči a transmisní koeficient T(E) udává pravděpodobnost, že elektron projde skrz bariéru, čímž přispěje k celkovému proudu.

Vyjádření proudu elektronů přicházejících z pravé strany je zcela analogické vztahu (4.16). Rozdíly jsou pouze ve znaménku, neboť elektrony se pohybují opačným směrem, dále ve Fermiho mezi a v integračních mezích. Tedy

$$I_{R} = -\frac{2e}{h} \int_{U_{R}}^{\infty} f(E, \mu_{R}) T(E) dE.$$
(4.17)

Elektrony s energií v intervalu od U_R do U_L nemohou přispět k celkovému proudu, neboť pro ně neexistuje žádný stav umožňující šíření. Jako spodní hranici v integrálu (4.17) tedy můžeme brát U_L . Celkový proud lze potom zapsat jako

$$I = I_L + I_R = \frac{2e}{h} \int_{U_L}^{\infty} [f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)] T(E) dE.$$
(4.18)



Obrázek 4.6: Bariéra obklopená elektronovým plynem v případě (a) malého napětí a (b) tak velkého napětí, že elektrony napravo nepřispívají k proudu (podle [1]).

Proud tedy není přímo úměrný napětí, typicky je to komplikovanější funkce a Ohmův zákon neplatí. Zmíníme se ještě o několika speciálních případech

- Pokud je napětí dostatečně velké, všechny stavy na pravé straně jsou pod U_L a k celkovému proudu tedy vůbec nepřispívají.
- Při nízkých teplotách může být Fermiho funkce nahrazena skokovou funkcí a k proudu přispívají pouze elektrony s energiemi mezi μ_L a μ_R .
- Pokud je napětí malé, můžeme Fermiho funkci rozvinout do prvního řádu Taylorova rozvoje. Potom

$$I = \frac{2e^2V}{h} \int_{U_L}^{\infty} \left(\frac{\partial f(E,\mu)}{\partial E} T(E) dE \right), \qquad (4.19)$$

kde $f(E, \mu)$ je Fermiho funkce v rovnováze.

Ve 3D případě si zjednodušíme situaci předpokladem, že potenciál $V(\mathbf{R})$ je pouze funkcí souřadnice z. Energie potom může být zapsána jako součet transverzální a z-ové komponenty. Proudová hustota J v tomto případě obsahuje část



Obrázek 4.7: (a) Konečná pravoúhlá jáma s vázaným stavem. (b) Stejná jáma v případě konečné šířky bariér, kdy se vázaný stav mění na rezonanční nebo kvazi-vázaný (podle [1]).

závislou na k_z a část odpovídající výrazu pro hustotu elektronů n_{2D} v 2DEG v rovině (x,y) s dnem pásu zvýšeným na $U_L + \hbar^2 k_z^2/2m$ (viz [1]). Proudová hustota elektronů na levé straně má tedy tvar

$$J_L = e \int_0^\infty \frac{dk_z}{2\pi} \frac{\hbar k_z}{m} T(k_z) n_{2D} \left(\mu_L - U_L - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right).$$
(4.20)

Pokud zavedeme $E = U_L + \hbar^2 k_z^2/2m$ jako podélnou komponentu celkové energie a doplníme příspěvek elektronů z pravé strany bariéry má celková proudová hustota tvar

$$J = \frac{e}{h} \int_{U_L}^{\infty} [n_{2D}(\mu_L - E) - n_{2D}(\mu_R - E)] T(E) dE.$$
(4.21)

Tento výraz může být opět zjednodušen zanedbáním příspěvku pravé strany při vysokém napětí a nahrazením Fermiho funkce funkcí skokovou při nízkých teplotách. Potom $n_{2D}(\mu) = (m/\pi\hbar^2)\mu\Theta(\mu)$ a proudová hustota má tvar

$$J = \frac{e}{h} \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{U_L}^{\mu_L} (\mu_L - E) T(E) dE.$$
 (4.22)

Díky faktoru $\mu_L - E$ mají v integrálu větší váhu nižší energie. Vysvětlením je, že řez Fermiho plochou obsahuje více elektronů pro nižší podélné energie. Toto je důležité pro vysvětlení proudu v případě rezonančního tunelování.

4.4 Rezonanční tunelování

Jak vidíme na obrázku 4.7, jestliže je elektron zachycen v jámě, jejíž bariéry mají konečnou šířku, nemůžeme mluvit o vázaném stavu, jelikož elektron může tunelovat a z QW. Mluvíme pak o rezonančním stavu. Energie tohoto stavu není přesně



Obrázek 4.8: Transmisní koeficient rezonanční tunelovací struktury v (a) lineárním a (b) logaritmickém měřítku. Plná čára je T(E), čárkovaně je transmisní koeficient bez rezonance a čerchovaně je Lorentzovská aproximace (podle [1]).

definována, ale je "rozmazána" v rozsahu \hbar/τ_l , kde τ_l je doba života elektronu mezi bariérami.

Rezonanční stavy se jasně projeví v transmisním koeficientu. Transmisní koeficient dvojité bariéry, neboli pravděpodobnost přechodu, je přibližně roven součinu transmisních koeficientů jednotlivých bariér. Toto však neplatí v okolí rezonance, kdy transmisní koeficient dramaticky roste. Tento jev se nazývá rezonanční tunelování.

4.4.1 Transmisní koeficient

Již známe vzorec T-matice pro dvojitou bariéru viz (4.13). Z ní můžeme podle [1] určit transmisní amplitudu

$$t = \frac{t_L t_R}{1 - r_L r_R \exp(2ika)}.$$
 (4.23)

Transmisní koeficient T je potom roven $T = |t|^2$ a nabývá maxima ve chvíli, kdy vymizí fázově závislé členy. V rezonanci je tedy podle [1] T rovno

$$T = T_{pk} = \frac{T_L T_R}{(1 - \sqrt{R_L R_R})^2} \approx \frac{4T_L T_R}{(T_L + T_R)^2}.$$
(4.24)

Transmisní koeficient, jako funkce energie, má potom podle Daviese [1] tvar

$$T(E) \approx T_{pk} \left[1 + \left(\frac{E - E_{pk}}{\frac{1}{2}\Gamma} \right)^2 \right]^{-1}.$$
(4.25)

Tento Lorentzovský tvar (viz obrázek 4.8) je typický pro rezonanční jevy. Energie E_{pk} je energií rezonančního stavu a výraz Γ , odpovídající FWHM, je roven

$$\Gamma = \frac{\hbar v}{2a} (T_L + T_R). \tag{4.26}$$

4.4.2 Proud procházející tunelovací diodou

Vliv napětí na dvojitou bariéru je znázorněn na obrázku 4.9. Na obrázku 4.9(a) je napětí malé, rezonanční hladina E_{pk} leží nad hladinou příchozích elektronů a prochází pouze malý proud. Na obrázku 4.9(b) se vlivem napětí dostala rezonanční hladina do úrovně elektronů na levé straně a ty teď mohou přes tuto hladinu procházet. To vede k zvětšení proudu. Proud poté roste lineárně až do chvíle, kdy rezonanční hladina dosáhne úrovně dna elektronového plynu vlevo, jak je vidět na obrázku 4.9(c). Další zvyšování napětí má za následek takové snížení rezonanční hladiny, že již není pro elektrony dosažitelná a proud dramaticky poklesne. Výsledkem je volt-ampérová charakteristika (I(V)), která vykazuje oblast se záporným diferenciálním odporem.

Obrázek 4.9 ukazuje, že přiložení napětí s systému má tři základní efekty: mění Fermiho hladiny, posunuje energii rezonančního stavu a mění profily a transmisní vlastnosti bariér. Podstatné jsou pro nás první dva efekty a změny T_L a T_R budeme pro jednoduchost zanedbávat.

Při popisu 3D případu budeme předpokládat vysoké napětí a nízké teploty, platí tedy rovnice (4.21). V integrandu se pak vyskytuje výraz $\mu_L - E$, který se však mění pomalu, a proto ho podle [1] můžeme nahradit hodnotou pro E_{pk} a umístit před integrál. Integrační meze (U_L, μ_L) pro energii E můžeme rozšířit na $(-\infty, +\infty)$, neboť významný příspěvek je pouze v okolí rezonance. Po vypočtení integrálu z (4.21) podle [1] dostáváme celkový proud

$$J = \frac{e}{h} \frac{m}{\pi \hbar^2} (\mu_L - E_{pk}) \frac{\pi}{2} \Gamma T_{pk}, \qquad (4.27)$$

za předpokladu, že pro rezonanční energii platí $U_L < E_{pk} < \mu_L$. Proud v závislosti na přiloženém napětí je tedy úměrný výrazu $(\mu_L - E_{pk}) \approx [\mu_L - E_{pk}(0) + \frac{1}{2}eV]$. To způsobuje charakteristický trojúhelníkový tvar na obrázku 4.9(e). Proud je největší, když je rezonanční energie na dně intervalu vstupních energií, neboť



Obrázek 4.9: Profil 3D RTD. Napětí roste od (a) do (d) a odpovídající I(V) charakteristika je na obrázku (e). Šedé oblasti představují elektronový plyn. Podle [1].

v tom případě má maximum stavů právě tuto (rezonanční) hodnotu podélné složky energie.

Toto je pochopitelně zjednodušený model. Realistické výpočty musí zahrnovat další efekty jako rozptyl na příměsích a fononech. Tyto složitější modely jsou předmětem další kapitoly.

Kapitola 5

Rezonanční tunelovací diody

Struktura typické RTD je znázorněna na obrázku 5.1. Zahrnuje kvantovou jámu obklopenou dvěmi bariérami (DBQW - double-barrier quantum well). Oblasti I, II a VI a VII jsou silně dopované kontakty zhotovené z polovodiče s relativně úzkým zakázaným pásem. Oblasti III a V jsou kvantové bariéry z polovodiče s relativně větším zakázaným pásem. Konečně oblast IV je kvantová jáma z polovodiče, jehož zakázaný pás je opět relativně menší.

Struktura znázorněná na obrázku 5.1 popisuje energetickou strukturu RTD jestliže na ní přiložíme napětí, neboť nás zajímá elektronový transport, který je způsoben hlavně vnějším napětím. Velikost DBQW struktury se pohybuje řádově v nanometrech a odpovídá tedy vlnové délce elektronů. Díky tomu dochází ke kvantovým jevům jako je kvantování energie, interference, tunelování atd.

Vlastnosti RTD jsou zkoumány studiem pohybu nosičů náboje, jejichž dovolené energie jsou dány pásovou strukturou. Při pohybu nosičů náboje můžeme pozorovat hlavní typy procesů, které jsou popsány v následujícím oddíle.

5.1 Fyzikální procesy v RTD

Uvažujme DBQW strukturu znázorněnou na obrázku 5.1. Jelikož kontakty jsou typicky silně dopované, lze je považovat za ohmické s vysokou proudovou hustotou. Potom je podle [6] energetické spektrum elektronů dáno Fermi-Diracovou statistikou. To znamená, že elektrony v oblasti I jsou v termální rovnováze vlivem interakcí se svým okolím. Totéž platí pro elektrony v oblasti VII.

Na rozhraní dochází k mnohonásobné reflexi elektronů vlivem jejich vlnové povahy. To vede k rezonančnímu charakteru tunelování, jak bylo popsáno v kapitole 4. Mnohonásobný odraz pak vede ke konstruktivní nebo destruktivní interferenci v závislosti na vlnové délce elektronů. Vlnová délka některých elektronů odpovídá konstruktivní interferenci a zároveň tato délka odpovídá energii, pro niž je


Obrázek 5.1: Fyzikální procesy v DBQW (převzato z [6])

pravděpodobnost průchodu blízká jedné. Jinými slovy se u těchto rezonančních energetických hladin projevuje rezonanční tunelování. Tomuto ději odpovídá proces 1 na obrázku 5.1. Energie elektronu E_1 odpovídá rezonanční energii E_0 .

Lze ovšem najít i další procesy transportu přes rezonanční hladiny. V procesu 2 elektron nejprve díky rozptylu ztratí část své energie a je zachycen na hladině E_2 ve 2D QW v oblasti II. Poté může dojít k absorpci fononu a následně tunelování přes rezonanční hladinu E_0 . Podobný je proces 3. Elektron s počáteční energií E_3 může interagovat s kmity mřížky, emitovat fonon a poté tunelovat přes E_0 . Na druhou stranu elektrony s dostatečně vysokou energií (E_4) mohou přejít přes bariéry vlivem termální emise, jak znázorňuje proces 4. Rovněž je dobré mít na paměti, že elektrony mají nenulovou pravděpodobnost tunelování přes nerezonanční stavy, které leží mezi těmi rezonančními.

Reálné fyzikální procesy probíhající v RTD jsou samozřejmě mnohem komplexnější a jsou komplikovány interakcemi elektronů s okolím. Zejména jsou to podle [6] interakce s kmity mříže, příměsemi, nerovnostmi a rovněž interakce mezi elektrony samotnými. Navíc s přiložením napětí se systém stává otevřeným a velmi se tak liší od uzavřeného kvantového systému. Všechny tyto okolnosti mohou významně měnit vlastnosti RTD a vytvoření uspokojivého modelu značné znesnadňují.

5.2 Modely RTD

Na vyvinutí fyzikálního modelu RTD bylo již vynaloženo mnoho úsilí. Motivem tohoto snažení je získání vhledu do mezoskopického transportu a návodu pro optimální design těchto polovodičových prvků.

Obecně lze RTD podle Suna [6] popsat jako otevřený kvantový systém, ve kterém je elektronový transport třídimenzionální, časově závislý, časově nevratný, disipativní a dochází k výměně částic i energie s okolím. Značně se tak liší od uzavřeného kvantového systému, kde lze do Schödingerovy rovnice zavést konzervativní hamiltonián a okrajové podmínky. Na druhou stranu pro určení specifických vlastností těchto systémů lze použít různé aproximace a zjednodušující modely. Existující modely pro RTD mohou být podle [6] rozděleny do dvou kategorií:

- dynamické nebo koherentní modely
- kinetické modely.

Zásadní rozdíl spočívá v tom, jaká modelová funkce je použita k popsání energetických stavů elektronů. Elektrony jsou totiž popsány svými vlnovými funkcemi. Fáze této vlnové funkce se může změnit například srážkou s optickým fononem. Je tedy nemožné sledovat vlnovou funkci konkrétního elektronu. Proto se k reprezentaci elektronových stavů používá modelová funkce. V kinetických modelech je touto funkcí Wignerova funkce, matice hustoty nebo Greenova funkce, zatímco v dynamických modelech je to typicky obálková funkce.

5.2.1 Model obálkové funkce

Tento oblíbený model je založen na teorii efektivní hmotnosti. Nečasová Schödingerova rovnice v modelu obálkové funkce je podle [6]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\nabla\left(\frac{1}{m}\nabla\right) + V(\mathbf{r})\right]\psi_n(\mathbf{r}) = [E(\mathbf{k}) - E_n(0)]\psi_n(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

kde potenciál $V(\mathbf{r})$ zahrnuje pásovou strukturu heteropřechodu, přiložené napětí, příspěvek od nečistot a pohyblivý elektrický náboj. Efektivní hmotnost m je vlastností materiálu a index n značí n-tý pás. Rovnice (5.1) se v praxi často převádí na 1D použitím funkce $W(\mathbf{k})$, která provádí integraci přes příčné složky vlnového vektoru k_{\parallel} . Důležitým momentem jsou hraniční podmínky. V modelu obálkové funkce se používá metoda QTBM (quantum transmitting boundary method). Ta spočívá v aplikaci smíšených hraničních podmínek zafixováním hodnot lineárních kombinací obálkových funkcí a jejich gradientů na hranici RTD. V modelu obálkové funkce je elektrická vodivost popisována pomocí transmisního koeficientu. Transmise $T(E_x)$ je funkcí podélné složky energie elektronu. Při určování I(V) charakteristiky RTD se vlnové funkce elektronů přicházejících z kontaktu považují za rovinné vlny, které se poté elasticky nebo neelasticky rozptylují na různých potenciálech zahrnutých do členu $V(\mathbf{r})$. Odražené a prošlé vlnové funkce jsou pak řešením Schödingerovy rovnice (5.1).

Po nalezení vlnových funkcí lze proudovou hustotu počítat podle vzorce (viz [6])

$$J_{tot} = -q\hbar \sum_{k} W(k) \operatorname{Im} \left[\psi_{k}^{*}(x) \frac{1}{m^{*}(x)} \frac{\partial \psi_{k}(x)}{\partial x} \right] \Delta k, \qquad (5.2)$$

nebo též podle vzorce

$$J_{tot} = \frac{qmk_B\mathcal{T}}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} T(E_x) \cdot \log\left[\frac{1 + exp\left(\frac{E_F - E_x}{k_B\mathcal{T}}\right)}{1 + exp\left(\frac{E_F - E_x - qV_A}{k_B\mathcal{T}}\right)}\right] dE_x, \quad (5.3)$$

kde E_F je Fermiho energie a E_C je energie dna vodivostního pásu.

Novější modely RTD používající obálkovou funkci zahrnují další důležité fyzikální aspekty jako efekty spojené s prostorovým nábojem, 2D akumulační vrstvu v emitorové oblasti, mezipásové efekty a rozptyl na fononech.

Efekty spojené s prostorovým nábojem se objevují kvůli dopovaným příměsím a pohyblivému náboji, který se vyskytuje v kvantových jámách stejně jako v emitoru nebo v akumulační oblasti. Jelikož hustota náboje je ovlivňována elektrostatickým potenciálem, který sama generuje, je třeba provést výpočty pro selfkonzistentní potenciál a rozložení náboje. To se podle [6] obvykle provádí pomocí iterativních výpočtů Poissonovy rovnice a Schödingerovy rovnice v aproximaci efektivní hmotnosti a následného spočtení proudové hustoty.

Jedním z důsledků self-konzistentního potenciálu je vytvoření 2D akumulační vrstvy v emitorové oblasti vlivem zakřivení pásů (viz obrázek 5.1). V této oblasti se injektované elektrony mohou rozptýlit do kvantovaných stavů a poté tunelovat přes rezonanční energetické hladiny, což odpovídá procesu 2 na obrázku 5.1. V modelu obálkové funkce je tento proces zohledňuje započtením zvláštního členu do výrazu popisujícího náboj v emitoru.

Mezipásové efekty jsou pro modelování RTD důležité, neboť model obálkové funkce neuvažuje periodickou část skutečných vlnových funkcí, nebo ji považuje za stejnou pro všechny materiály. Jestliže je tedy interakce elektronů z různých pásů důležitá pro výpočet proudu, není rovnice používající stejnou efektivní hmotnost vhodná. dalším problémem jednopásového modelu je, že neuvažuje neparabolicitu pásu. To se projeví zejména u polovodičů s úzkým zakázaným pásem. Řešením může být použití dvoupásového Kaneova modelu, který je odvozen od $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ teorie.

V rámci modelu obálkové funkce bylo vyvinuto několik přístupů, jak vyřešit rozptyl na fononech (viz [6]). V současnosti však stále neexistuje žádná univerzální metoda, který by dokázala předpovědět I(V) charakteristiku RTD v závislosti na celé šíři možných parametrů. Pro přibližný výpočet neelastického rozptylu na fononech lze například použít self-konzistentní model uvažující pro rozptyl na optických fononech imaginární optický potenciál. Časová Schrödingerova rovnice má v tomto případě tvar

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} + V - iW_0\right]\psi\tag{5.4}$$

což můžeme po vynásobení ψ^* zleva přepsat jako

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{2W_0}{\hbar} \rho \tag{5.5}$$

kde jsme pro elektronovou hustotu ρ proudovou hustotu J zavedli

$$\rho = \psi^* \psi \tag{5.6}$$

$$\mathbf{J} = -\frac{\hbar}{m} \mathrm{Im}(\psi^* \nabla \psi). \tag{5.7}$$

Z rovnice (5.5) vidíme, že v rovnovážném stavu je proudová hustota elektronů tlumena optickým potenciálem úměrně výrazu $2W_0/\hbar$.

Celkovou transmisi T_{tot} poté dostaneme jako součet koherentní transmise T_{coh} a nekoherentní transmise T_{incoh} . Koeficient tlumení A je definován jako $A = 1 - T_{coh} - R_{coh}$, kde R_{coh} je koherentní reflexe. Poté co dojde ke srážce, bude tlumená část tunelovat v obou směrech $(-x \ a + x)$ úměrně velikosti transmisního koeficientu pro každou bariéru (T_R pro pravou a T_L pro levou). Celková transmise přes dvojitou bariéru je pak podle [6]

$$T_{tot} = T_{coh} + T_{incoh} \tag{5.8}$$

$$= T_{coh} + \frac{T_R}{T_L + T_R} (1 - T_{coh} - R_{coh}).$$
 (5.9)

Celkovou proudovou hustotu pak můžeme vypočítat podle vzorce (5.3). Na obrázku 5.2 je porovnání mezi teoreticky spočtenou a změřenou I(V) charakteristikou RTD.

5.2.2 Kinetické modely

Rozdíl mezi koherentním (nebo dynamickým) modelem a kinetickým modelem spočívá v tom, že první je založen na jednočásticovém popisu a využívá čisté stavy,



Obrázek 5.2: Spočtená a experimentálně změřená I(V) charakteristika RTD (převzato z [6])

zatímco druhý používá vícečásticový popis a smíšené stavy. Pokud je potřeba započítat interakce elektronů je zřejmé, že jednoduchý jednočásticový popis nelze použít.

V kinetickém modelu je popisovaný systém považován za soubor částic, charakterizovaný maticí hustoty, Wignerovou distribuční funkcí nebo Greenovou funkcí. Problém lze rozdělit do dvou částí: na samotnou RTD (popisovanou pomocí x) a její okolí (y). Matice hustoty je podle [6] definována vzorcem

$$\rho(x,x';\tau) = \int \psi(x,z;\tau)\psi^*(x',y;\tau)dy.$$
(5.10)

Její časový vývoj je dán Liouvilleovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial \tau} = [H, \rho] + \mathcal{L}\rho,$$
 (5.11)

kde [] jsou Poissonovy závorky
a $\mathcal L$ je Liouvilleův operátor. Rovnice (5.11) může být přep
sána do následujícího tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,x';\tau) = \frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2}\right]\rho(x,x';\tau) - \frac{i}{\hbar} [V(x,\tau) - V(x',\tau)]\rho(x,x';\tau).$$
(5.12)

Wignerova funkce je definována jako Fourierova transformace matice hustoty

$$f(x,k,\tau) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(x+y;\tau) \psi(x-y;\tau) e^{2iky}.$$
 (5.13)

Podle [6] potom RTD splňuje Liouvilleovou rovnicí

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\mathcal{L}}{i\hbar} f + \mathcal{C}f, \qquad (5.14)$$

kde \mathcal{C} je srážkový operátor

$$Cf(x,k,\tau) = \int dk' [W_{kk'}f(x,k',\tau) - W_{k'k}f(x,k,\tau)]$$
(5.15)

a $W_{kk'}$ je rychlost přechodu z k' do k. Rovnice (5.14) vyjadřuje časový vývoj Wignerovy funkce pomocí Liuvilleova operátoru, reprezentujícího balistický pohyb, a srážkového operátoru, který v sobě obsahuje disipativní interakce jako je rozptyl na optických fononech.

Modely RTD založené na nerovnovážné Greenově funkci umožňují započítání interakcí mezi mikročásticemi v systému, elektron-elektronových interakcí v kontaktech, elektron-fononových interakcí a dalších rozptylových procesů. Při popisu transportu v RTD se proud považuje za odezvu na excitace. Nerovnovážná Greenova funkce je pak nositelem informace o odezvě systému na různé druhy excitací. Přiložené napětí představuje jednu z těchto excitací. Navíc však lze za vnější excitace považovat různé elementy způsobující rozptyl jako jsou fonony, elektrony, příměsi, povrchové nerovnosti atd. Model založený na Greenově funkci poskytuje přesnější informace o mikroskopických procesech v RTD než ostatní modely.

Kapitola 6 Přehled literatury

S ideou rezonančního tunelování v polovodičových heterostrukturách poprvé přišli v roce 1973 Tsu a Esaki. Rezonanční tunelovací struktury s dvojitou bariérou byly poprvé zkoumány v letech 1973-1974. Od té doby se mnoho studií zabývalo pochopením fundamentálních fyzikálních procesů, ke kterým v těchto strukturách dochází. Zpočátku byly zkoumány zejména otázky, zda je tunelování koherentní nebo zda dochází k rozptylu a dále jaké jsou důsledky nahromadění prostorového náboje v QW při rezonanci.

V roce 1990 M. S. Skolnick a kol. [7] zkoumali pomocí fotoluminiscence (PL) transportní procesy v RTD pod vlivem magnetického pole a přiloženého napětí. Zkoumanými strukturami byly GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs RTD. Studium tvarů PL spekter v závislosti na napětí poskytlo důkaz o tom, že na rezonančních hladinách dochází k hromadění náboje. To bylo potvrzeno i pozorováním struktury Landauových hladin v PL spektrech v závislosti na velikosti magnetického pole. Optická excitace vede k zářivé rekombinaci mezi nejnižším vázaným stavem elektronu a dírami v QW. Toto záření je ve spektru dobře rozlišitelné a zkoumání PL tak poskytuje jednoznačnou informaci o rozložení prostorového náboje. Výsledkem těchto pozorování bzl závěr, že značná část elektronů se před opuštěním QW rozptýlí a tunelování má tedy významnou nekoherentní složku.

Studiem tunelování v RTD pomocí měření PL se zabývali i S. R. Andrews a kol. [8]. Používali časově integrovanou a časové rozlišenou PL ke studiu transportu náboje v GaAS/AlAs RTD. Opět vycházeli z toho, že studiem PL je možné zkoumat koncentrace nosičů náboje v QW. Podle modelu zářivé rekombinace (viz [8]) je totiž intenzita luminiscence I_{PL} dána výrazem

$$I_{PL} \approx \frac{g}{(1 + R_{nr}/R_r)},\tag{6.1}$$

kde g je úměrné rychlosti generace minoritních nosičů v QW, R_{nr} odpovídá rychlosti poklesu koncentrace nosičů vlivem nezářivých procesů (zejména tunelová-

ním ven z QW) a $R_r \approx np$ je zářivá rekombinace úměrná koncentraci elektronů n a koncentraci děr p v QW. Měření excitační fotoluminiscence (PLE) ukázalo, že časově integrovaná intenzita PL s přiloženým napětím je podobná pro excitace nad a pod prahem přímé fotoexcitace QW. S. R. Andrews a kol. z toho usoudili, že koncentrace elektronů i děr v QW je určována tunelováním nosičů přes bariéry do QW. Intenzita luminiscence pak závisí nejen na intenzitě fotoexcitace a proudu elektronů, ale také na transportu děr z kontaktu přes bariéru na kolektorové straně.

V roce 1992 R. K. Hayden a kol. [9] navázali na předchozí práce a zabývali se otázkou, zda i v případě děr je tunelování nekoherentní a dochází k nějakým relaxačním procesům. Zkoumali rezonanční tunelování v *p*-typové GaAs/AlAs RTD za přítomnosti magnetického pole kolmého na rovinu bariér, které vede ke kvantování pohybu nosičů náboje. Pozorovali oscilace tunelovacího proudu v závislosti na přiloženém napětí a porovnávali je s Landauovými hladinami. Tímto způsobem mohli měřit prostorový náboj děr v QW jako funkci napětí.

Hayden a kol. skutečně zjistili, že tunelovací proces děr není koherentní a že většina děr se rozptýlí před tím, než tuneluje ven z QW. Použitím modelu efektivní hmotnosti mohli ze znalosti koncentrace děr v akumulační vrstvě a v QW a ze znalosti proudové hustoty určit efektivní hmotnosti děr při tunelování přes obě bariéry. Spočtená efektivní hmotnost pro rezonanční hladinu LH_1 byla blízká hodnotě efektivní hmotnosti lehkých děr v AlAs. To ukázalo, že díry tunelují hlavně jako lehké díry.

Dalšími, kdo se zabývali RTD na bázi GaAs/AlAs, byli v roce 1994 T. S. Turner a kol. [10]. Zaměřili se více na optické vlastnosti a zkoumali luminiscenci těchto struktur pod vlivem napětí. V PL spektru pozorovali šest rezonančních peaků pocházejících od děr. Přiřazení těchto peaků lehkým (LH_n) nebo těžkým (HH_n) děrám je možné díky výsledkům získaným z magneto-tunelovací spektroskopie a je použitelné jen v případě, že in-plane vlnový vektor $k_{\parallel} = 0$. Při nenulové hodnotě k_{\parallel} dochází ke smísení LH a HH stavů vlivem spin-orbitální interakce (viz [11]). Kromě zmíněných šesti peaků však Turner a kol. pozorovali ještě dva další peaky. Oba připsali rezonančnímu tunelování fotoexcitovaných elektronů do vodivostního pásu QW. Díky tomu je intenzita PL částečně ovlivněna i rychlostí s jakou mohou minoritní fotogenerované elektrony vstupovat do QW.

Pozorovaná luminiscence odpovídala excitonovému přechodu mezi nejnižším elektronovým a děrovým stavem v QW ($E_1 \rightarrow HH_1$). A to i v případě, kdy přiložené napětí odpovídalo rezonančnímu tunelování do stavů s vyšší energií ($LH_1, HH_2...$), neboť tunelující díry ztrácejí většinu své energie interakcí s podélnými optickými fonony. PL spektra také vykazovala s rostoucím napětím celkový rudý posuv, který je způsoben Starkovým efektem. Toto chování je charakteristické pro RTD pod napětím.

Poněkud pozměněným problémem se zabývali A. Patanè a kol. v [12]. Zkoumali rezonanční tunelování a zářivou rekombinaci elektronů a děr v *n-i-n* RTD na bázi GaAs/(AlGa)As. Zvláštností těchto RTD bylo, že v GaAs QW byly vytvořeny InAs kvantové tečky (QD). Ukázali, že vrstva InAs významně ovlivňuje kvazivázané stavy v QW. Přítomnost QD rovněž ovlivňuje rozdělení náboje v RTD. PL spektra jednoznačně ukázala, že vrstva InAs vytváří opticky aktivní stavy pod hranou GaAs vodivostního pásu. V těchto stavech se zachycují nosiče náboje generované v QW. To má za následek, že při nulovém napětí některé elektrony difundují z GaAs vrstvy do těchto stavů. Při nulovém napětí jsou tedy QD obsazeny elektrony. Tento efekt byl zkoumám měřením kapacitance v závislosti na napětí C(V). Byl pozorován nárůst kapacitance v momentě, kdy napětí bylo tak velké, že došlo k vytvoření akumulační vrstvy přiléhající k (AlGa)As bariéře.

Při zkoumání vlivu optické excitace na I(V) charakteristiku Patanè a kol. zjistili, že během rezonančního přechodu elektronů a fotogenerovaných děr přes QW mohou být některé nosiče zachyceny v QD a poté zářivě rekombinovat. Díky tomu rezonanční tunelovací proces silně ovlivňuje luminiscenci QD v závislosti na napětí. S rostoucím V intenzita PL od kvantových teček ostře roste a vykazuje tři rezonanční peaky. Patanè a kol. toto chování vysvětlují na základě předpokladu, že děrový proud I_h má dvě komponenty

$$I_h = I_{QD,h} + I_{I,h}, (6.2)$$

kde $I_{QD,h}$ je proud související s rekombinací elektronů a děr v QD a $I_{I,h}$ odpovídá děrám, které projdou přes obě bariéry a rekombinují v GaAs emitorové vrstvě. Velikost $I_{QD,h}$ a $I_{I,h}$ závisí na době, po kterou jsou nosiče zachyceny v QD a na době tunelování. Mimo rezonanci většina děr tuneluje skrz QW zatímco v rezonanci jsou zachyceny v QD a rekombinují s elektrony. Tak vznikají rezonanční peaky v intenzitě PL. Měření ukázala, že zachycení děr v QD a jejich následná rekombinace s elektrony představuje cestu ke zkoumání rezonančního tunelování děr. Možnost ovlivňovat tunelování prostřednictvím napětí rovněž poskytuje způsob, jak lze měnit koncentraci nosičů v QD.

Postupem času se stále více prací začalo zabývat spinově závislým rezonančním tunelováním, a to zejména po objevu feromagnetismu v konvenčních polovodičových sloučeninách silně dopovaných magnetickými ionty. První magnetická RTD byla zhotovena v roce 1995 D. E. Bremerem a kol. [13], kteří studovali paramagnetickou ErAs QW obklopenou bariérami AlAs. Pozorovali silné spinové štěpení elektronových stavů v QW pod vlivem magnetického pole.

Rovněž A. Slobodskyy a kol. [14] se v roce 2003 zabývali magnetickými RTD. Idea je poměrně jednoduchá. Jestliže je QW zhotovená z magnetického materiálu, energetické stavy v jámě se rozštěpí na stavy se spinem nahoru a stavy se spinem dolů. Prostřednictvím rezonance lze pak dramaticky ovlivňovat pravděpodobnost průchodu pro tyto oddělené stavy, tedy selektivně pro požadovaný spin.

Slobodskyy a kol. zkoumali paramagnetické II-VI RTD založené na ZnBeSe s jámou tvořenou ZnMnSe, tedy slabě magnetickým polovodičem. V přítomnosti magnetického pole došlo, v souladu s předchozími výsledky, k Zeemanovskému štěpení hladin v QW. Rezonance ve I(V) charakteristice vykazovala se zvětšujícím se magnetickým polem (kolmým na QW) štěpení na dva peaky. Toto štěpení odpovídalo rozdílu energií hladin v QW. Slobodskyy a kol.provedli rovněž měření teplotní závislosti I(V) charakteristiky. Zjistili, že rostoucí teplota má podobný efekt jako snižující se magnetické pole. Peaky se postupně přibližují, až nakonec splynou do jednoho.

Nemagnetickými GaAs/AlAs rezonančními tunelovacími diodami se zabýval de Carvalho a kol. [15]. Jejich experiment je podobný našemu, a proto jej popíšeme podrobněji. Zkoumali fotoluminiscenci GaAs/AlAs tunelovacích diod pod vlivem napětí a magnetického pole. Výsledky interpretovali na základě teoretického modelu, který vyvinuli. Potenciál rezonančních tunelovacích struktur spočívá v tom, že tyto systémy mohou kombinovat výhody dlouhé doby relaxace spinu a dobře definované polarizace emitovaného světla s možností flexibilně kontrolovat populaci nosičů náboje (přiloženým napětím).

Ve své práci de Carvalho a kol. přinášejí výsledky měření polarizačně rozlišené fotoluminiscence nemagnetické *p-i-p* GaAs/AlAs RTD pod vlivem přiloženého napětí, kde jsou minoritní elektrony fotogenerovány daleko od kvantové jámy. Magnetické pole aplikované kolmo na vrstvu GaAs (tvořící kvantovou jámu), vedlo k Zeemanovskému štěpení elektronových i děrových kvazi-2D stavů v QW. Analyzováním levotočivě (σ^-) a pravotočivě (σ^+) polarizované PL byl zkoumán způsob, jakým částice s různým spinem tunelují přes bariéru a ztrácejí svou energii popř. hybnost. Schématicky je to zobrazeno na obrázku 6.1.

Bylo zjištěno, že fotoluminiscenční spektra jsou vysoce závislá na napětí, což signalizuje změny obsazení základních stavů v QW vlivem injektovaných nosičů. Detailnější informaci poskytuje stupeň polarizace definovaný podle [15] jako

$$pol(V) = (I^{\sigma^+} - I^{\sigma^-})(I^{\sigma^+} + I^{\sigma^-}),$$
(6.3)

kde I^{σ^+} a I^{σ^-} jsou integrované intenzity PL pro polarizovaná spektra. Stupeň polarizace vykazuje dva různé režimy v závislosti na velikosti přiloženého napětí. Prvním je nízkonapěťový režim (do 1 V), kdy stupeň polarizace projevuje oscilační chování a dochází ke změně znaménka v blízkosti rezonančního peaku tunelovacího proudu. V tomto případě záření pochází z $E_1 - HH_1$ rekombinace (viz obrázek 6.1) a dipólové optické přechody $E_1^+ \Leftrightarrow HH_1^+$ a $E_1^- \Leftrightarrow HH_1^-$ se řídí výběrovými pravidly. Změna znaménka stupně polarizace je spojována se změnou populace stavů HH_1^{\pm} a E_1^{\pm} , když napětí probíhá přes nějaký rezonanční stav.



Obrázek 6.1: Schématický pásový diagram zobrazující spinově rozštěpené hladiny, optické přechody a injekci nosičů náboje vlivem elektrického a magnetického pole. Spinová polarizace je označena symboly (-) a (+) (převzato z [15]).

Ve vysokonapěťovém režimu (nad 1 V) stupeň polarizace roste se zvyšujícím se napětím až k hodnotě, kde se saturuje.

de Carvalho a kol. vyvinuli k interpretaci experimentálních výsledků teoretický model. Tento model je založen na následujících procesech: (i) rekombinace e-h páru, která generuje PL; (ii) spinově rozlišená injekce děr do energetických stavů HH_n^{\pm} a LH_n^{\pm} v QW následována relaxací do základního stavu HH_1^{\pm} , přičemž spin se zachovává; (iii) spinově rozlišená injekce elektronů do energetických stavů E_n^{\pm} následována relaxací do základního stavu E_1^{\pm} , přičemž spin se zachovává a (iv) napěťově závislá pravděpodobnost úniku nosičů náboje z QW tunelováním přes druhou bariéru.

Na základě popsaných procesů ovlivňujících dynamiku nosičů náboje ve vodivostním a valenčním pásu odvodili de Carvalho a kol. vzorec pro výpočet integrované PL (pro každou polarizaci) jako funkce přiloženého napětí

$$I^{\sigma^s} = \pi D |P^s| \sum_{\alpha,\beta} p^s_\alpha(V_d) (1 - \zeta^s_\alpha) n^s_\beta(V_d) (1 - \zeta^s_\beta), \tag{6.4}$$

kde $D = (eB)/(2\pi\hbar)$ je počet stavů na každé Landauově hladině na jednotku plochy (spinově nedegenerovaný), $|P^s| = |\langle cond | \sigma^s p | val \rangle|$ je síla oscilátoru, přičemž $|cond\rangle$ označuje vodivostní, $|val\rangle$ valenční pás a σ^s kruhovou polarizaci emitovaného světla. Indexy α a β označují děrové a elektronové stavy v QW $(\alpha = HH_1^s, HH_2^s, ..., LH_1^s, LH_2^s...; \beta = E_1^s, E_2^s)$. Funkce $p_{\alpha}^s(V_d)$ definovaná v [15] udává pravděpodobnost obsazení spinově polarizovaných děrových stavů v závislosti na potenciálovém skoku V_d , který je přímo úměrný napětí. Funkce n_{β}^s udává totéž pro elektrony. Pravděpodobnost úniku elektronu (díry) z QW je ζ_{β}^s (ζ_{α}^s). Stupeň polarizace pol(V)pak může být spočten přímo z rovnice (6.4).

S použitím tohoto modelu dokázali de Carvalhoa kol. poměrně dobře objasnit rozdílné chování stupně polarizace v závislosti na velikosti napětí. Při nízkém napětí jsou pravděpodobnosti úniku velmi malé ($\zeta_{\beta}^{s} \ll 1, \zeta_{\alpha}^{s} \ll 1$) díky velké výšce bariér (viz obrázek 6.1). Integrovaná PL je pak určena především koncentrací nosičů injektovaných do QW. Při vysokém napětí se efektivní výška bariéry při tunelování z QW sníží a pravděpodobnosti úniku rostou, což má za následek pokles integrované PL.

Nakonec se zmíníme o výsledcích experimentů na RTD s feromagnetickým emitorem. Prvním, kdo vytvořil takovou strukturu byli Ohno a kol. [16]. Ve I(V)charakteristice pozorovali spinové štěpení valenčního pásu v emitorové oblasti, zejména v rezonančním peaku těžkých děr HH_2 .

H. Holmberg a kol. [17] zkoumali magnetotransport děr v p-GaAs/AlAs RTD s feromagnetickým emitorem tvořeným GaAs dopovaným Mn. Dopování svrchní vrstvy GaAs změní elektrickou strukturu např. díky spinovému (Zeemanovskému) štěpení pásů v emitorové oblasti způsobenému výměnnou interakcí mezi spinem s nosičů náboje a spinem S_R 3D elektronů Mn iontů v mřížkové poloze R. Tato interakce je dána hamiltoniánem

$$H_{\text{exch}} = H_{\text{exch}}^{s} + H_{\text{exch}}^{d}$$

= $-J_{\text{exch}} \sum_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r})$
 $-J_{\text{exch}} \sum_{\mathbf{R}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) (\mathbf{S}_{\mathbf{R}} - \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}),$ (6.5)

kde J_{exch} je parametr pro výměnnou interakci. Hamiltonián (6.5) byl rozdělen na statickou a dynamickou část H^s_{exch} resp. H^d_{exch} . První dává opravu prvního řádu $E^{(1)}_{k\sigma}$ k energii pásu k ($\mathbf{k} = \text{vlnový vektor a druhý způsobuje neuspořádání$ $spinu nosičů náboje vlivem fluktuace spinu <math>\mathbf{S}_{\mathbf{R}} - \langle \mathbf{S}_{\mathbf{R}} \rangle$ ($\sigma = \uparrow (\downarrow) = \text{spin}$)). Podle



Obrázek 6.2: Schématický pásový diagram zobrazující RTD s feromagnetickým emitorem v případě nenulového štěpení pásu, $\Delta > 0$ (převzato z [17]).

[17] můžeme velikost spinového štěpení $\triangle(\mathcal{T}, B)$ mezi energetickými hladinami v závislosti na teplotě a magnetickém poli napsat takto

$$\Delta(\mathcal{T}, B) = E_{k\downarrow}^{(1)} - E_{k\uparrow}^{(1)} = \langle \mathbf{k} \downarrow | H_{\text{exch}}^s | \mathbf{k} \uparrow \rangle - \langle \mathbf{k} \uparrow | H_{\text{exch}}^s | \mathbf{k} \downarrow \rangle$$

= $x J_{\text{exch}} \langle S^z(\mathcal{T}, B) \rangle,$ (6.6)

kde x je molární zlomek atomů Mn, $x\langle S^z \rangle = \sum_{\mathbf{R}} \langle S^z_{\mathbf{R}} \rangle / N$ je průměrná spinová polarizace a N je počet elementárních buněk. Pásové štěpení \triangle , které může být u feromagnetických polovodičů mnohem větší než tepelná energie $k_B \mathcal{T}$ je jeden z nejdůležitějších parametrů při modelování spintronických součástek.

Štěpení pásu ve feromagnetickém emitoru může být pozorováno prostřednictvím spinově závislého tunelování z emitoru do nemagnetické QW. Tento proces je znázorněn na obrázku 6.2. Náboje se spinem nahoru a dolů tunelují při různých napětích, což by mělo vést ke dvěma peakům ve I(V) charakteristice. Modifikací klasické formule pro tunelovací proud, můžeme podle [17] napsat vyjádření pro spinově závislý proud

$$J_T = J_T^{\uparrow} + J_T^{\downarrow} = \int_0^\infty T_{\uparrow}(E) S_{\uparrow}(E) dE + \int_{\bigtriangleup}^\infty T_{\downarrow}(E) S_{\downarrow}(E) dE, \qquad (6.7)$$

kde \triangle je pásové štěpení (6.6) a $T_{\sigma}(E)$ je kvantově mechanický transmisní koefi-

cient daný Lorentzovskou funkcí

$$T_{\sigma}(E) = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\Gamma/2)^2 + (E - E_{\sigma}^{\text{res}})^2},$$
(6.8)

kde $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$ je FWHM rezonance, která nezávisí na spinu. Γ_L a Γ_R jsou šířky rezonance pro levou a pravou bariéru. V rovnici (6.7) bereme jako nulovou hladinu pro energii E dno subpásu se spinem nahoru \uparrow (viz obr.6.2). Potom energie rezonanční hladiny E_{σ}^{res} v rovnici (6.8) je dáno výrazem

$$E_{\sigma}^{\rm res} = E_0 - \frac{qV_{QW}}{2} + \frac{\Delta}{2}(\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}), \qquad (6.9)$$

kde E_0 je energie jednoduché hladiny v QW, kde není žádné štěpení a V_{QW} je napětí mezi bariérami. Funkce $S_{\sigma}(E)$ v rovnici (6.7) je

$$S_{\sigma}(E) = \left(\frac{qm_h k_B \mathcal{T}}{\pi^2 \hbar^3}\right) \ln\left[\frac{1 + e^{(E_{F\sigma}^L - E)/k_B \mathcal{T}}}{1 + e^{(E_{F\sigma}^R - E)/k_B \mathcal{T}}}\right],\tag{6.10}$$

kde $E_{F\sigma}^{L(R)}$ je Fermiho energie spinově polarizovaného subpásu na levé (pravé) straně. Za zmíněného předpokladu o nulové hladině energie platí

$$E_{F\sigma}^{L,R} = E_{F0}^{L,R} + \frac{\Delta}{2} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow})$$
(6.11)

a $E_{F0}^L = \hbar^2 (3\pi^2 p)^{3/2} / 2m_h$ je kvazi-Fermiho hladina pro díry před štěpením, $E_{F0}^R = E_{F0}^L - qV_{QW}$ a p je koncentrace děr.

Kapitola 7

Popis experimentu a vzorků

7.1 Experimentální uspořádání

Měření fotoluminiscence (PL), přesněji magneto- (MPL) a elektro- (EPL) luminiscence, která jsou předmětem této práce, byla realizována v optické laboratoři Oddělení fyziky polovodičů Fyzikálního ústavu UK. Základní schéma experimentu je zachyceno na obrázku 7.1. Jedná se o běžnou konfiguraci, kdy vzorek excitujeme zářením o energii vyšší, než je šířka zakázaného pásu. Excitované nosiče relaxují do kvazirovnováhy v nižších energetických hladinách a následně mezipásově rekombinují. Nosiče excitujeme laditelným Ti-safírovým nebo polovodičovým laserem. Proměřované vzorky se nacházejí v kryostatu supravodivého magnetu, u kontaktovaných vzorků je dále možno na proměřované struktury aplikovat elektrické pole. Luminiscence vzorků je analyzována komerčním fourierovským spektrometrem firmy Bruker. Následují podrobné parametry všech prvků aparatury.

Supravodivý magnet Supravodivý solenoid Spectromag SM4000-11.5 firmy Oxford Instruments umožňuje díky "split-coil" konstrukci realizaci měření MPL ve Faradayově nebo Voigtově konfiguraci v základním režimu v magnetickém poli 0-10 T v teplotním intervalu ~ 1.4 - 300 K. Při ochlazení celého solenoidu na 2.2 K lze magnetické pole zvýšit až na 11.5 T. Kryostat se skládá z vnějšího vakuového pláště, dále ze stínící dusíkové a konečně vnitřní heliové vany. Vzorkový prostor má průměr 25 mm. Teplota uvnitř kryostatu je snímána pomocí Allan-Bradley rezistorů. Supravodivé vinutí je vyrobeno z materiálu Nb₃Sn. Úbytek proudu v perzistentním módu činí 0.01% za hodinu.

Fourierovský spektrometr: Komerční fourierovský spektrometr firmy Bruker IFS 66/S. Pro měření luminiscence kvantových struktur je jako detektor používána nechlazená Si dioda citlivá v oblasti 8000-14000 cm⁻¹ (1.0-1.74 eV). Běžně



Obrázek 7.1: Schéma experimentu proměření MPL a EPL

používané spektrální rozlišení činí 2 cm⁻¹ (~ 0.25 meV).

Laser: Kontinuální laditelný Ti-safírový laser Spectra physics 3900 S čerpaný laserem Milenia nebo polovodičový laser na vlnové délce $\lambda = 633$ nm. Pro vý-stupní výkon polovodičového laseru $P_{max} = 25$ mW dostáváme na vzorku po odrazu na všech zrcátkách a oknech výkon ~ 10 mW. Průměr ozářené plochy vzorku je přibližně 200 μ m. Plošná excitační intenzita je tedy $P_{excit}^{pl} \sim 25$ W/cm².

Zdroj napětí: Zdroj konstantního napětí Keithey 230.

7.2 Charakteristika proměřovaných vzorků

Celkem bylo měřeno 5 vzorků: C092, C105, D023, D025 a D030. Všechny byly vypěstovány metodou epitaxe z molekulárních svazků (MBE) ve Fyzikálním ústavu AV ČR v Cukrovarnické. Podrobná schémata uvedených vzorků jsou na obrázcích 7.2, 7.3 a 7.4. S výjimkou vzorků D023 a D025 se jedná o rezonanční tunelovací diody, neboli struktury s dvojitou bariérou. Struktury jsou modulačně dopovány a jedná se tedy o tzv. p-i-n RTD, kde samotná tunelovací dioda je umístěna v intrinzické oblasti p-n přechodu.



Obrázek 7.2: Schéma pásové struktury vzorků C092 a C105



Obrázek 7.3: Schéma pásové struktury vzorků D023 a D025



Obrázek 7.4: Schéma pásové struktury vzorku D030

Vzorky C092 a C105 obsahují GaAs jámu obklopenou AlAs bariérami, dále InGaAs jámu s GaAs bariérami a na povrchu mají vrstvu, za nízkých teplot feromagnetického, polovodiče GaMnAs o koncentraci Mn $x \doteq 0.05$. Tyto dva vzorky se liší pouze šířkou InGaAs kvantové jámy. Navíc byly, na rozdíl od zbývajících vzorků, opatřeny dvěma kontakty (*p*- a *n*-kontakt), které umožnily přikládání elektrického pole na struktury pomocí zdroje napětí. Tato měření byla provedena na strukturách s relativně velkou aktivní plochou, která pravděpodobně znemožnila přiložení dostatečně homogenního elektrického pole, tak aby bylo pozorováno typické chování rezonanční tunelovací diody, tzn. přítomnosti oblastí s negativním diferenciálním odporem. Měření tak nepřinesla očekávaný výsledek a nejsou blíže v práci diskutována. Nedávné experimenty v Laboratoři vysokých magnetických polí v Grenoblu, provedené (mimo rámec této diplomové práce) na dobře definovaných mesa strukturách výrazně menších rozměrů prokázaly očekávané rezonančně-tunelovací chování vzorků.

Vzorky D023 a D025 obsahují pouze jednoduchou bariéru tvořenou AlAs, avšak o dvojnásobné šířce, jinak je jejich struktura takřka stejná jako u vzorku C092. Navzájem se vzorky D023 a D023 liší tím, že v případě vzorku D025 je GaAs substrát dopovaný Si, zatímco v u D023 nikoliv. Vzorek D030 opět obsahuje dvojitou bariéru a jeho struktura je velmi podobná jako u vzorku C092, je však méně symetrická díky různě silným vrstvám GaAs. Vzorek D030 také neobsahuje povrchovou vrstvu GaMnAs, která je nahrazena vrstvou GaAs:C.



Obrázek 7.5: Luminiscenční spektrum vzorku C092

Nyní se pokusíme identifikovat původ signálů v PL spektrech jednotlivých vzorků. Na obrázku 7.5 je luminiscenční spektrum vzorku C092 v nulovém elektrickém a magnetickém poli při teplotě $\mathcal{T} = 5$ K. Ve spektru vidíme tři oblasti. Luminiscence v oblasti (I) má maximum přibližně na energii $E_I = 1.34$ eV a pravděpodobně reprezentuje luminiscenci hlubokých příměsí v GaAs. Oblast (III) má maximum na $E_{III} = 1.49$ eV a jedná se převážně o luminiscenci objemového GaAs, jehož šířka zakázaného pásu je 1.52 eV. Signál o energii vyšší než 1.52 eV bezpochyby odpovídá PL z oblasti vzorku s kvantovým omezením pohybu nosičů, jeho přesný původ jsme nedokázali určit, pravděpodobně se jedná o PL z blízkého okolí RTD struktury. Oblast (II) představuje velmi ostrý peak na $E_{II} = 1.441$ eV. Jde o luminiscenci InGaAs jámy, což ověříme přibližným výpočtem.

Pro náš odhad budeme počítat energetické spektrum InGaAs jámy jako spektrum konečné nenakloněné pravoúhlé jámy v heterostruktuře (viz kapitola 1.3). Nebudeme uvažovat excitonovou interakci mezi rekombinujícími částicemi, která způsobuje posun k nižším energiím ≤ 10 meV. K výpočtu energie vázaných stavů použijeme rovnice (1.20) a (1.21). Musíme proto určit hloubku jámy V_0 a efektivní hmotnosti elektronů a děr v InGaAs. V následující tabulce jsou uvedeny hodnoty, které budeme při výpočtech potřebovat. Zdrojem je [1] a uvedené šířky zakázaných pásů jsou v limitě nulové teploty:

E_a^{GaAs}	1.52	eV
E_{q}^{InAs}	0.42	eV
E_q^{AlAs}	2.23	eV
m_e^{GaAs}	0.067	-
m_h^{GaAs}	0.5	-
m_e^{InAs}	0.022	-
m_h^{InAs}	0.41	-
m_e^{AlAs}	0.150	-
m_h^{AlAs}	0.5	-

Hloubku jámy V_0 určíme podle vzorce

$$V_0 = \frac{E_g^{GaAs} - E_g^{InGaAs}}{2},$$
(7.1)

kde E_g je šířka zakázaného pásu a horní index označuje příslušný materiál. Šířka zakázaného pásu je teplotně závislá a podle [19] pro $In_x Ga_{1-x} As$ platí

$$E_g(x,\mathcal{T}) = E_g^{GaAs}(\mathcal{T}) \cdot (1-x) + E_g^{InAs}(\mathcal{T}) \cdot x - C \cdot x^2, \tag{7.2}$$

přičemž $E_g^{GaAs}(\mathcal{T})$ je dáno rovnicí

$$E_g^{GaAs}(\mathcal{T}) = E_g^{GaAs}(0) - \frac{\alpha^{GaAs} \cdot \mathcal{T}^2}{\beta^{GaAs} + \mathcal{T}}$$
(7.3)

a $E_g^{InAs}(\mathcal{T})$ rovnicí

$$E_g^{InAs}(\mathcal{T}) = E_g^{InAs}(0) - \frac{\alpha^{GaAs} \cdot \mathcal{T}^2}{\beta^{GaAs} + \mathcal{T}}.$$
(7.4)

Parametry α , β a C pro GaAs a InAs jsou uvedeny v následující tabulce (podle [19]).

$ \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	5.58 220	$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	$\begin{array}{c} 2.76\\ 83 \end{array}$
C		0.475	

Efektivní hmotnosti elektronů a děr v $In_xGa_{1-x}As$ vypočteme podle vzorce (viz [20])

$$m_{\nu} = m_{\nu}^{InAs} \cdot x + m_{\nu}^{GaAs} \cdot (1-x) + C_{m,\nu} \cdot (1-x) \cdot (x), \tag{7.5}$$

kde $\nu=e$ pro elektrony
ah pro díry. Hodnoty parametrů jsou podle [20] jsou následující

$m_e^{InAs} \ [m_0]$	0.0237	$m_h^{InAs} [m_0]$	0.41
$m_e^{GaAs} \ [m_0]$	0.067	$m_h^{GaAs} [m_0]$	0.49
$C_{m,e}$	-0.012	$C_{m,h}$	-0.030

Dosazením do vzorců (7.1)-(7.5) pro šířku jámy $a = 5 \text{ nm}, \mathcal{T} = 5 \text{ K}$ a x = 0.11 dostaneme výsledky uvedené v následující tabulce.

$E_q^{GaAs}(5K)$	$1.518 { m eV}$
$E_q^{InGaAs}(5K)$	1.392 eV
V_0	0.063 eV
$m_e^{InGaAs} [m_0]$	0.061
$m_h^{InGaAs} [m_0]$	0.478

Nyní můžeme dosadit do vzorce (1.21) a vyřešit rovnici (1.20) numericky nebo graficky (viz [1]). Zjišťujeme, že v InGaAs jámě je pouze jeden vázaný stav pro elektrony s energií $E_{e1} = 0.040$ eV. Pro díry existují dva vázané stavy s energiemi $E_{h1} = 0.015$ eV a $E_{h2} = 0.052$ eV. Energii fotonů E_{PL} vzniklých rekombinací elektronů a děr v InGaAs jámě potom vypočteme jako

$$E_{PL} = E_q^{InGaAs} + E_{e1} + E_{h1}.$$
(7.6)

Dostáváme hodnotu $E_{PL} = 1.446$ eV, která poměrně dobře odpovídá změřené energii $E_{II}=1.441$ eV, obzvláště pokud přihlédneme k nezapočtené excitonové interakci elektronu a díry.

Analogický výpočet provedeme pro GaAs jámu s AlAs bariérami, přičemž šířka jámy je a = 4.2 nm. Zjišťujeme, že v GaAs jámě existují dva vázané stavy pro elektrony a tři pro těžké díry s následujícími energiemi

E_{e1}	0.092 eV
E_{e2}	$0.351~{\rm eV}$
E_{h1}	$0.030 \ \mathrm{eV}$
E_{h2}	$0.115~{\rm eV}$
E_{h3}	$0.247~{\rm eV}$

Přechodu $E_{e1} \rightarrow E_{h1}$ odpovídá energie $E_{PL}=1.640$ eV. Jak je vidět z obrázku 8.1b, luminiscenci z GaAs jámy nedetekujeme a její náznaky byly pozorovatelné pouze při velmi vysoké excitaci.

Na obrázku 7.6 je spektrum vzorku C105. Je podobné spektru vzorku C092 s tím rozdílem, že energie peaku $E_{II}=1.40$ eV. Opět se jedná o luminiscenci InGaAs jámy, která má u tohoto vzorku šířku a = 10 nm. Výpočet ukazuje, že v jámě existují dva vázané stavy pro elektrony a tři pro díry s těmito energiemi



Obrázek 7.6: Luminiscenční spektrum vzorku C105

E_{e1}	0.022 eV
E_{e2}	$0.063~{\rm eV}$
E_{h1}	$0.005~{\rm eV}$
E_{h2}	$0.020~{\rm eV}$
E_{h3}	$0.044~{\rm eV}$

Energie nejnižšího přechodu $E_{e1} \to E_{h1}$ je $E_{PL}=1.419$ eV. Tato hodnota je opět v poměrně dobré shodě s experimentální hodnotou.

Vzorky D023, D025 a D030 se chovají identicky jako vzorek C092 s peakem na energii 1.44 eV. Nebudeme je proto podrobně diskutovat.

Kapitola 8

Nelineární jevy ve fotoluminiscenci studovaných vzorků

Na obrázcích 7.2, 7.3 a 7.4 jsou schémata pásových struktur měřených vzorků. Měřením jejich luminiscenčního spektra v nulovém magnetickém poli bylo zjištěno, že intenzita luminiscence v závislosti na excitačním výkonu po dosažení prahové hodnoty roste exponenciálně a při vyšších výkonech lineárně (viz obrázek 8.1c). Podobný efekt lze pozorovat i při aplikaci magnetického pole B_{\perp} nad prahem luminiscence (viz obrázek 8.2). V tomto případě souvisí exponenciální nárůst PL s posunem prahu luminiscence vlivem magnetického pole. Zdrojem luminiscence je rekombinace nosičů náboje (elektronů a těžkých děr) zachycených v InGaAs jámě.

Závislost PL na excitačním výkonu se navíc silně mění s teplotou. Za vyšších teplot pozorujeme práh luminiscence při nižších excitačních výkonech, než je tomu u teplot nižších, viz obrázky 8.3 pro vzorek C092 a 8.4 pro vzorek D023. Na těchto obrázcích je sice vynesena závislost pro maximum luminiscence, ovšem pokud se PL peak nerozšiřuje, chová se maximum stejně jako integrální intenzita. Ostatní vzorky C105, D025 a D030 vykazují velice podobné chování. Za vyšších teplot pozorujeme práh luminiscence při nižších excitačních výkonech, než je tomu u teplot nižších.

8.1 Model rezonančního tunelování

Světlem jsou ve vzorku generovány nosiče náboje. Elektrony v důsledku existence vnitřního elektrického pole driftují ve směru a díry proti směru elektrického pole (viz obrázek 8.5). Elektrony generované napravo od jámy I jsou zachyceny na



Obrázek 8.1: a) Výřez PL spektra vzorku C092. b) PL spektrum vzorku C092. c) Závislost PL na excitačním výkonu pro vzorek C092. Vidíme silně nelineární chování. Prahový relativní výkon je ~ 0.1 a při zvýšení výkonu na dvojnásobek vzroste intenzita PL o dva řády.



Obrázek 8.2: Závislost PL na B_{\perp} pro vzorek C092.

donorech v n-typu. Elektrony generované nalevo od jámy I mohou být zachyceny v jámě I, ovšem předpokládáme, že v důsledku termální excitace nebo tunelování tuto jámu opět opustí a rovněž jsou zachyceny na donorech v n-typu, čímž je neutralizují a stíní tak vnitřní elektrické pole v intrinzické oblasti p-i-n přechodu.

V případě děr je situace podobná. Díry, které jsou generovány nalevo od In-GaAs jámy II, putují do jámy III. V jámě II existuje lokalizovaný stav pro (těžké) díry s energií E_2 . Díry zachycené v jámě II ji mohou opět opustit prostřednictvím tunelování nebo vlivem termální excitace. V důsledku toho díry skončí v jámě III, kde vytvoří 2D degenerovaný děrový plyn (2DHG). Hustota děr v jámě II je naopak řádově menší než v jámě III, a proto nepozorujeme luminiscenci odpovídající v obrázku 8.5 přímé rekombinaci R_a . Nepřímá zářivá rekombinace R_b je málo pravděpodobná a v našem experimentu ji nepozorujeme. V příštích experimentech by bylo vhodné pokusit se tuto luminiscenci detekovat.

Ve stacionárním stavu je tok fotogenerovaných děr do jámy III neutralizován difuzí těchto děr podél jámy III mimo sledovanou oblast. Při zvýšení excitačního výkonu se generuje více děr a jejich hustota v místě excitace roste. Tím dochází stínění vnitřního elektrického pole, což vede k přibližování hladin E_2 v jámě II a E_3



Obrázek 8.3: Závislost maxima PL na excitačním výkonu a na teplotě pro vzorek C092.



Obrázek 8.4: Závislost maxima PL na excitačním výkonu a na teplotě pro vzorek D023.



Obrázek 8.5: Detailní schéma pásové struktury.

v jámě III. Tento proces probíhá až do okamžiku než hladiny splynou a vznikne rezonanční stav. V blízkosti této rezonance díry již nemohou tunelovat z jámy II do III, neboť stavy v jámě III jsou obsazené. V důsledku toho vzroste hustota děr v jámě II. Následně pozorujeme prudký (exponenciální) nárůst intenzity luminiscence.

Skutečnost, že při vyšších excitačních výkonech již není tok fotogenerovaných děr do jámy III neutralizován jejich difuzí podél této jámy a že hustota děr v jámě III tedy roste, potvrzuje měření závislosti intenzity PL na excitačním výkonu a magnetickém poli (viz obrázek 8.2 pro vzorek C092 a 8.6 pro vzorek D023). Magnetické pole totiž v důsledku magnetorezistivity tuto difúzi omezuje.

Nyní se pokusíme popsat výše uvedený model pomocí rovnic, pro jednoduchost v limitě nulové teploty (nedochází k termální excitaci). Podmínku rovnosti generace a rekombinace můžeme zapsat

$$G = \frac{p_{III}}{t_D} + \frac{p_{II}}{t_\alpha},\tag{8.1}$$

kde p je hustota děr v příslušné jámě, G je hustota děr generovaných za jednotku času, t_D je čas potřebný k rozdifundování děr a t_{α} je čas, který stráví díra v jámě předtím než rekombinuje. Člen p_{III}/t_D odpovídá difuzi děr z jámy III do okolí a p_{II}/t_{α} je rekombinace děr v jámě II. V našem zjednodušeném modelu uvažujeme



Obrázek 8.6: Závislost maxima PL na excitačním výkonu a magnetickém poli pro vzorek D023.

koeficienty $1/t_D$ a $1/t_{\alpha}$ konstantní, přestože ve skutečnosti jsou to patrně rostoucí funkce počtu děr. Rovněž zanedbáváme difuzi děr z jámy II do okolí.

Dále zavedeme tunelovací čas t_T jako čas, který stráví díra v jámě předtím než vytuneluje. Tok děr v jámě III pak můžeme popsat rovnicí

$$\frac{p_{III}}{t_D} + \frac{p_{III}}{t_{T_3}}\theta[E_3 - E_2] = \frac{p_{II}}{t_{T_2}}\theta[E_2 - E_3],$$
(8.2)

kde t_{T_3} je tunelovací čas ze III do II a t_{T_2} je tunelovací čas ze II do III a θ je Heavisideova funkce. Levá strana rovnice (8.2) odpovídá odtoku děr z jámy III a její pravá strana je naopak přítok děr z jámy II do III. Díry generované v oblasti mezi II a III nebudeme uvažovat. Pro energii vázaného stavu v jámě II platí

$$E_2 = E_3 + \triangle E_{23} - \frac{e p_{III}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} d, \qquad (8.3)$$

kde $\triangle E_{23}$ je rozdíl energií hladin E_2 a E_3 bez osvětlení, d je efektivní vzdálenost jam II a III a člen $ep_{III}d/\varepsilon_0\varepsilon_r$ popisuje stínění v důsledku generace děr.

Nadále se budeme zabývat situací v okolí rezonance. V této situaci jsou tunelovací časy t_{T_2} a t_{T_3} téměř shodné, a proto je nahradíme společným znakem t_T . V rezonanci $(E_2=E_3)$ dosahuje p_{III} maximální hodnoty

$$p_{III,lim} = \frac{\triangle E_{23}\varepsilon_0\varepsilon_r}{ed}.$$
(8.4)

Obecně mohou nastat 3 případy:

1. $p_{III} < p_{III,lim}$

Rovnice (8.2) má v tomto případě tvar

$$\frac{p_{III}}{t_D} = \frac{p_{II}}{t_\alpha} \tag{8.5}$$

Dosazením (8.5) do (8.1) dostáváme

$$G = p_{II} \left(\frac{1}{t_T} + \frac{1}{t_\alpha} \right) \tag{8.6}$$

a pro luminiscenci platí

$$PL = \frac{p_{II}}{t_{\alpha}} = \frac{G}{t_{\alpha} \left(\frac{1}{t_{\alpha}} + \frac{1}{t_{T}}\right)} \approx \frac{t_{T}G}{t_{\alpha}}.$$
(8.7)

2. $p_{III} > p_{III,lim}$

Rovnice (8.2) má pak tvar

$$\frac{p_{III}}{t_D} + \frac{p_{III}}{t_T} = 0 \Rightarrow p_{III} = 0, \qquad (8.8)$$

z čehož vyplývá, že tento případ nemůže nastat.

3. $p_{III} = p_{III,lim}$

Tento případ popisuje rezonanci $(E_2 = E_3)$. Rovnice (8.2) má tvar

$$\frac{p_{III}}{t_D} + \frac{p_{III}}{t_T} = \frac{p_{II}}{t_T}.$$
(8.9)

Vyjádříme-li z rovnice (8.9) p_{III} dostaneme

$$p_{III} = p_{II} \frac{1}{t_T \left(\frac{1}{t_D} + \frac{1}{t_T}\right)}$$
(8.10)

a po dosazení do (8.1)

$$G = p_{II} \left(\frac{1}{t_{\alpha}} + \frac{1}{t_D + t_T} \right).$$
 (8.11)



Obrázek 8.7: Teoretická závislost intenzity luminiscence na $P_{excit} \sim G$ při nulové teplotě.

Uvážíme-li rovnice (8.4) a (8.10) dostáváme

$$p_{II,lim} = p_{III,lim} t_T \left(\frac{1}{t_D} + \frac{1}{t_T}\right) = \frac{\triangle E_{23}\varepsilon}{ed} t_T \left(\frac{1}{t_D} + \frac{1}{t_T}\right)$$
(8.12)

a po dosazení do (8.11)

$$G_{lim} = \frac{\triangle E_{23}\varepsilon}{ed} t_T \left(\frac{1}{t_D} + \frac{1}{t_T}\right) \left(\frac{1}{t_\alpha} + \frac{1}{t_D + t_T}\right).$$
(8.13)

Pro luminiscenci platí

$$PL = \frac{p_{II}}{t_{\alpha}} = \frac{G}{t_{\alpha} \left(\frac{1}{t_{\alpha}} + \frac{1}{t_D + t_T}\right)} = \frac{G}{1 + \frac{t_{\alpha}}{t_D + t_T}} \approx G$$
(8.14)

V rovnici (8.14) předpokládáme $t_T \ll t_D$ (viz dále).

Na obrázku 8.7 je znázorněn teoretický tvar závislosti intenzity luminiscence na excitačním výkonu při nulové teplotě. Z obrázku je vidět, že skutečně dochází ke spínacímu efektu.

Nyní se pokusíme odhadnout velikosti časů t_T a t_D s cílem potvrdit oprávněnost podmínky $t_T \ll t_D$.

Mezi difúzním koeficientem Da pohyblivostí nosičů μ platí Einsteinův vztah

$$\mu = \frac{eD}{k_B T},\tag{8.15}$$

kdee je elementární náboj, $\mathcal T$ je teplota
a $k_B=1.381\times 10^{-23}~{\rm JK}^{-1}$ je Boltzmanova konstanta. Zároveň je

$$D \approx \frac{x^2}{t_D},\tag{8.16}$$

kde x je charakteristická vzdálenost. Z rovnic (8.15) a (8.16) dostáváme

$$t_D \approx \frac{ex^2}{\mu k_B T}.$$
(8.17)

Za x zvolíme průměr ozářené oblasti, což je asi 100 μ m. Následně předpokládáme pohyblivost $\mu \approx 1 \text{ m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ (jde nám pouze o řádový odhad), z čehož dostaneme $t_D \sim 10^{-6} \text{ s.}$

V případě určení t_T vyjdeme z WKB aproximace. Pravděpodobnost tunelování díry trojúhelníkovou bariérou je podle [1]

$$T \approx \exp\left[-\left(\frac{2m_h V_b}{\hbar^2}\right)^{1/2} d\right],$$
 (8.18)

kde V_b je výška bariéry, d její šířka a $m_h = 0.5m_0$ je efektivní hmotnost díry. Vzorec pro výpočet energetického spektra trojúhelníkové jámy (opět ve WKB aproximaci) je podle [1]

$$\varepsilon_n \approx \left[\frac{3}{2}\pi(n-\frac{1}{4})\right]^{2/3} \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m_h}\right]^{1/3},$$
(8.19)

kde V(z) = eFz je potenciál tvořící jámu ohraničený ∞ vysokou bariérou. Z rovnice (8.19) dostaneme pro rezonanci $\varepsilon_1 = E_2 = E_3 = 0.022$ eV. Potom $V_b = 0.041$ eV, d = 13 nm a $T \approx 10^{-5}$. Dále potřebujeme znát frekvenci f, s jakou díry narážejí do bariéry. Zde se spokojíme s jednoduchým klasickým modelem, ve kterém budeme předpokládat, že

$$\varepsilon = \frac{1}{2}m_h v^2 \quad \text{a} \quad \frac{1}{f} = \frac{2a}{v}, \tag{8.20}$$

kde v je rychlost díry a a je šířka jámy. Po dosazení dostáváme $f \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ a tedy $t_T = (fT)^{-1} \sim 10^{-8} \text{ s}$. Můžeme tedy uzavřít, že v rámci našich odhadů je nerovnost $t_T \ll t_D$ splněna.



Obrázek 8.8: Závislost prahu luminiscence na teplotě.

Významným efektem, který pozorujeme při všech našich měřeních, je výrazná teplotní závislost prahu luminiscence (viz obrázek 8.8). Z hlediska navrženého modelu se zvyšování teploty projeví několika efekty. Zaprvé se zvyšuje pravděpodobnost termální excitace děr v jámě II, které pak mohou přeskočit bariéru a dostanou se do jámy III. Dalším efektem, souvisejícím s rostoucí teplotou, je obsazení stavů nad Fermiho energií v jámě III. Díry z jámy II pak vlivem obsazení těchto stavů nemohou tunelovat ze II do III a začnou se tedy v jámě II hromadit již při nižších excitačních výkonech než je tomu u nízkých teplot. Tyto nahromaděné díry pak zářivě rekombinují s elektrony z jámy I. Oba uvedené mechanismy v souladu s naším modelem vedou ke snižování prahu luminiscence s rostoucí teplotou, nedávají však výraznější příspěvek při nízkých teplotách. Naopak nebezpečný pro platnost navrženého modelu je růst difuzního koeficientu s teplotou, což vede k rychlejšímu odvodu děr mimo aktivní oblast a k posunu prahu luminiscence k vyšším excitacím.

V rozporu s navrhovaným modelem experiment ukazuje výrazný pokles prahu luminiscence při relativně malém zvýšení teploty (5 \rightarrow 20 K). Tento jev obecně svědčí o vlivu procesů aktivovaných energií typicky v řádu jednotek meV. Mezi takovéto procesy patří i delokalizace nosičů náboje z mělkých potenciálových fluktuací, předpokládaných v běžných kvantových strukturách. Tento problém zůstává otevřen.



Obrázek 8.9: Trojúhelníková jáma.

8.2 Model asymetrické jámy

V této části se budeme zabývat alternativním modelem, který by mohl vysvětlit silně nelineární chování vzorků popsané na začátku kapitoly 8. Na rozdíl od předcházejícího modelu nyní předpokládáme, že za zmíněné chování nejsou odpovědné díry, ale naopak elektrony zachycené v InGaAs jámě.

Nejprve stručně naznačíme princip modelu. Při žádném nebo malém osvětlení v jámě neexistuje vázaný stav pro elektrony z důvodu silné asymetrie jámy vyvolané vnitřním elektrickým polem. Se zvětšující se intenzitou excitace se tvar jámy změní a elektrony v ní mohou být zachyceny, avšak tunelovací čas (tedy čas, který elektron stráví v jámě předtím, než vytuneluje ven) je mnohem kratší než čas potřebný k zářivé rekombinaci (doba života excitonu). Většina elektronů proto nerekombinuje a intenzita luminiscence je malá. Pokud dále zvětšujeme intenzitu excitace, tunelovací čas se prodlužuje a když je srovnatelný s rekombinačním časem, vidíme prudký nárůst intenzity luminiscence. V situaci, kdy je vnitřní elektrické pole prakticky odstíněno pak pozorujeme lineární nárůst.

Nyní rozvedeme úvahu naznačenou v předchozím odstavci. Při malém osvětlení má potenciálová jáma pro elektrony trojúhelníkový tvar (viz obrázek 8.9). Energii *n*-tého vázaného stavu v trojúhelníkové jámě vypočteme podle vzorce (8.19). Definujeme veličinu ΔE_{pn} jako rozdíl dna vodivostního pásu v *n*-typu a vrcholu valenčního pásu v *p*-typu:

$$\triangle E_{pn} = E_{v,p} - E_{c,n}.\tag{8.21}$$

Bez osvětlení je $\bigtriangleup E_{pn}$ = E_g^{GaAs} = 1.52 eV. Dále označíme jako $\bigtriangleup z$ = 79.4 nm



Obrázek 8.10: Trojúhelníková jáma - energie vázaných stavů.

šířku intrinsické oblasti (viz obrázek 7.2). Potom můžeme ${\cal F}$ v rovnici (8.19) vyjádřit jako

$$F = \frac{\triangle E_{pn}}{\triangle z}.$$
(8.22)

Po dosazení efektivní hmotnosti elektronu v InGaAs $m_e = 0.061m_0$ do rovnice (8.19) zjistíme, že pokud je jáma čistě trojúhelníková, vázaný stav pro elektrony v ní vůbec nevznikne. To platí pro všechny vzorky. Na obrázku 8.10 jsou výsledky pro vzorek C092 (a = 5 nm) a C105 (a = 10 nm).

Pro takovou intenzitu osvětlení, kdy jáma již není čistě trojúhelníková, ji budeme velmi přibližně aproximovat jámou vytvořenou podle následujícího popisu. Dno jámy vypočteme jako průměrnou hodnotu dna skutečné jámy (viz obrázek 8.11a). Pravou bariéru, která je trojúhelníková, nahradíme efektivní pravoúhlou bariérou s výškou V_1 .

Energie *n*-tého vázaného stavu asymetrické potenciálové jámy s výškami bariér V_1 a V_2 a šířkou *a* je podle [21] rovna

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_e},\tag{8.23}$$



Obrázek 8.11: Aproximace pravoúhlou jámou a efektivní ariérou.

kde k_n je řešením transcendentní rovnice:

$$4ka = n\pi - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2m_e V_1}} - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2m_e V_2}},\tag{8.24}$$

kde hodnoty funkce arcsin jsou brány z intervalu $(0,2\pi)$. Pokud parametry jámy vyhovují nerovnosti

$$\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2m_eV_1} < \frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{\frac{V_1}{V_2}} \tag{8.25}$$

ne
existuje v ní žádný vázaný stav. Pro výšku V_2 platí

$$V_2 = V_0 + \frac{h}{2},\tag{8.26}$$

kde $h = (\triangle E / \triangle z)a$. Výšku efektivní bariéry V_1 zvolíme jako

$$V_1 = \left(V_0 - \frac{h}{2}\right)(1 - \sin \alpha).$$
 (8.27)

Pokud budeme znát energii vázaného stavu v asymetrické jámě danou rovnicí (8.23), můžeme určit pravděpodobnost tunelování T trojúhelníkovou bariérou na obrázku 8.11b. Pro tuto pravděpodobnost platí podle [1]

$$T \approx \exp\left[-\left(\frac{2m_e V_b}{\hbar^2}\right)^{1/2} d\right],$$
 (8.28)

kde V_b je výška bariéry a d její šířka. V našem případě je výška $V_b = V_0 - h/2 - \varepsilon_1$.



Obrázek 8.12: Energie vázaných stavů v závislosti na $\triangle E$.



Obrázek 8.13: Tunelovací čas v závislosti na $\triangle E$.


Obrázek 8.14: Závislost maxima PL na excitačním výkonu a na teplotě pro vzorek C105.

Při určování tunelovacího času t_T budeme postupovat analogicky jako v oddíle 8.1. Frekvenci f s jakou elektron naráží do bariéry určíme z rovnice (8.19) a následně dosadíme do vztahu $t_T = (fT)^{-1}$.

Výsledky jsou na obrázcích 8.12 a 8.13. Energie E_1 na obrázku 8.12 není energií vázaného stavu vypočtená podle rovnice (8.23), ale je vztažená ke dnu skutečné jámy, tedy $E_1 = \varepsilon_1 + h/2$. Obrázek 8.13 podporuje náš model. Doba života excitonu je totiž ~ 10^{-9} s (viz [22]). Pokud je tunelovací čas t_T řádově menší než tato doba života, rekombinuje jen zanedbatelné množství elektronů. Pokud je t_T naopak větší, téměř všechny elektrony v jámě rekombinují (zde předpokládáme, že díry se díky své větší hmotnosti začnou v jámě lokalizovat mnohem dříve než elektrony). Z obrázku 8.13 je vidět, že oblast ΔE oddělující tyto dva případy je velmi úzká, a proto pozorujeme práh a poté exponenciální nárůst PL. Pokud předpokládáme, že stínění vnitřního elektrického pole v intrinsické oblasti závisí přibližně lineárně na excitaci G (konkrétně $V_b^{1/2}d \propto \Delta E \propto G$), plyne tento exponenciální nárůst přibližně z rovnice 8.28.

Z obrázku 8.13 je rovněž vidět, že PL se objevuje teprve pro relativně malá naklonění $\triangle E$. To odpovídá skutečnosti, že energie z QW (poloha peaku) se v zásadě nemění s excitační intenzitou. Pokud by se PL objevila již pro velká $\triangle E$, pak by musel být patrný silný Starkův jev.

Na obrázku 8.14 je závislost intenzity luminiscence na excitačním výkonu pro vzorek C105. Z porovnání se vzorkem C092 (viz obrázek 8.3) plyne, že u vzorku C105 je (pro danou teplotu) dosaženo prahu luminiscence při nižším excitačním výkonu než u vzorku C092. Toto zjištění je opět v souladu s výsledky na obrázku 8.13.

Všechny úvahy, které jsme zatím v tomto oddílu uvedli, platí pro limitní případ nulové teploty. Zanedbávali jsme tedy veškeré excitace. Jestliže uvažujeme teplotu $\mathcal{T} > 0$, může elektron opustit jámu nejen tunelováním, ale i v důsledku termální excitace. S rostoucí teplotou se tedy (při dané hodnotě ΔE) zkracuje čas, který elektron stráví v jámě a tím se snižuje i pravděpodobnost zářivé rekombinace. Pozorovaný práh PL (viz obrázky 8.3 a 8.4) by se tedy měl s rostoucí teplotou posouvat k vyšším excitačním výkonům, což je však v rozporu s pozorováním.

8.3 Porovnání modelů

Oba navržené modely, přes svou jednoduchost, dokáží rozumně vysvětlit nelineární efekty v provedených optických měřeních, a to jak existenci prahu, exponenciálního nárůstu i následné přibližně v excitaci lineární chování PL signálu z InGaAs QW. Zároveň se však navrhované mechanismy v obou modelech liší a platnost jednoho modelu vylučuje platnost druhého.

Experimentální výsledky, které máme aktuálně k dispozici, sice nedovolují jednoznačné zavržení jednoho z modelů, podrobná diskuse závislosti polohy prahu PL signálu na teplotě systému a aplikovaném magnetickém poli spíše vede k preferování modelu rezonančního tunelování mezi InGaAs QW a trojúhelníkovou jámou vytvořenou AlAs bariérou RTD struktury, tak jak byl navržen v podkapitole 8.1. V modelu asymetrické jámy by totiž s rostoucí teplotou mělo docházet k posunu prahu PL k vyšší excitačním výkonům z důvodu termální emise elektronů z InGaAs QW. V modelu rezonančního tunelování by rostoucí teplota neměla mít zásadní vliv na prahový excitační výkon. Experimentálně pozorovaný posun prahu k nižším výkonům tak spíše odpovídá modelu rezonančního tunelování. Posun prahu k nižším excitačním výkonům s rostoucí teplotou by mohl také souviset se změnou šířky zakázaného pásu, která s teplotou klesá a excitační výkon potřebný k odstínění vnitřního elektrického pole je tak bezesporu nižší. Absolutní velikost posunu prahu však výrazně přesahuje hodnotu očekávatelnou pouze ze změny šířky zakázaného pásu GaAs a nemůže tak celkový posun prahu vysvětlit.

Zajímavým efektem je také výrazný nárůst PL signálu blízko nad prahem s magnetickým polem, viz obrázek 8.2. Aplikace relativně malého magnetického pole vede k řádovému posílení PL signálu, neboli k výraznému posunu prahu k nižším excitačním intenzitám. Tento efekt lze vysvětlit existencí magnetorezistence ve směrech kolmých k tomuto poli, která vede k omezení in-plane difuze excitovaných nosičů již při relativně malých velikostech magnetického pole. Avšak vzhledem k tomu, že in-plane difuzi přirozeně předpokládáme v obou modelech, tento efekt, byť výrazný, nedokáže vyloučit jeden z navrhovaných modelů.

Zajímavá je skutečnost, že pozorované nelineární jevy pravděpodobně vůbec nesouvisí s přítomností za nízkých teplot feromagnetickou vrstvou polovodiče GaMnAs a stejně tak nezávisí na přítomnosti dvojité bariéry v RTD struktuře. Vzhledem k tomu, že nelineární chování bylo detekováno nejprve na vzorcích C092 a C105, které obsahují jak GaMnAs tak RTD diodu, bylo nutné připravit novou sérii vzorků, které by vliv těchto vrstev eliminovaly. To bylo dosaženo přípravou vzorků D023 a D025 bez dvojité bariéry a vzorku D030 bez GaMnAs vrstvy.

Kapitola 9

Závěr

Předmětem diplomové práce bylo studium rezonančních tunelovacích diod optickými metodami a základní vyhodnocení jejich kvality a vhodnosti pro následné experimenty, kdy budou kombinována elektrická a optická měření s cílem studia spinové polarizace fotogenerovaných nosičů vyvolané externím i interním magnetickým polem. Práce byla koordinována v rámci spolupráce se skupinou skupinou Prof. Yary Galvao-Gobato (Federální univerzita Sao Carlos, Brazílie). Studované vzorky byly připraveny na bázi materiálů GaAs/GaAlAs/GaInAs metodou epitaxe z molekulárních svazků ve Fyzikálním ústavu Akademie věd ČR, v.v.i., a doplněné vrstvou feromagnetického polovodiče GaMnAs. Měření magneto- a elektrofotoluminiscence provedená v Laboratoři infračervené spektroskopie Fyzikálního ústavu UK potvrdila vysokou kvalitu připravených vzorků a jejich vhodnost pro následná kombinovaná transportní a optická měření. Tato měření aktuálně probíhají ve spolupráci Laboratoří vysokých magnetických polí v Grenoblu.

Při základní charakterizaci vzorků metodou nízkoteplotní luminiscence byla pozorována silně nelineární a prahem charakterizovaná emise z InGaAs kvantové jámy. Tomuto zajímavému efektu byla věnována hlubší pozornost. V práci byly navrženy a diskutovány dva základní modely vysvětlující toto neobvyklé chování, a to buď na základě rezonančního tunelování v okolí InGaAs jámy nebo vlastností vázaných stavů elektronu v silně asymetrické kvantové jámě.

Na základě analýzy dat byla navržena a připravena nová série vzorků, která umožnila vyloučit souvislost pozorovaného nelineárního chování luminiscenčního signálu s přítomností za nízkých teplot feromagnetické vrstvy GaMnAs a stejně tak přímý vliv dvojité tunelovací bariéry.

Literatura

- [1] J. H. Davies (1998): The physics of low-dimensional semiconductors. Cambridge University Press, Cambridge.
- [2] Simon M. Sze (1981): The physics of semiconductor devices. A Wiley-Interscience Publication, New York.
- [3] G. Bastard (1992): Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Monographies de physique, Paris.
- [4] M. Orlita (2002): Studium kvantových jam v systému GaAs/GaAlAs
 Diplomová práce. MFF UK.
- [5] E. B. Bogomolny and D. C. Rouben (1998): Semiclassical description of resonant tunneling. *Eur. Phys. J.* B **9**, 695-718.
- J. P. Sun, G. I. Haddad, P. Mayumder and J. N. Schulman (1998): Resonant Tunneling diodes: Models and properties. *Proceedings of the IEEE*, Vol. **70**, No. 4, 641-661.
- M. S. Skolnick, D. G. Hayes, P. E. Simmonds, A. W. Higgs, G. W. Smith, H. J. Hutchinson, C. R. Whitehouse, L Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, M. L. Leadbeater and D. P. Halliday (1990): Electronic processes in double-barrier resonant-tunneling structures studied by photoluminescence spectroscopy in zero and finite magnetic fields. *Phys. Rev.* B 41, 10754-10766.
- [8] S. R. Andrews, A. J. Turberfield and B. A. Miller (1991): Optical studies of tunneling in double barrier diodes. *Superlattices and Microstructures* Vol. 9, No. 3, 357-361.
- [9] R. K. Heyden, L. Eaves, M. Henini, D. K. Maude, J. C. Portal and G. Hill (1992): Hole space-charge buildup and evidence for sequential tunneling in *p*-type double-barrier resonant tunneling devices. *Appl. Phys. Lett.* **60** (12), 1474-1476.

- T. S. Turner, L. Eaves, C. R. H. White, M. Henini ang G. Hill (1994):
 Quantum well luminescence due to minority photoelectrons in p-type resonanttunneling structures. *Semicond. Sci. Technol.* 9, 552-554.
- R. K. Hayden, D. K. Maude, L. Eaves, E. C. Valadares, M. Henini, F. W. Sheard, O. H. Hughes, J. C. Portal and L. Cury (1991): Probing the Hole Dispersion Curves of a Quantum Well Using Resonant Magnetotunneling Spectroscopy. *Physical Review Letters* Vol. 66, No. 13, 1749-1752.
- [12] A. Patanè, A. Polimeni, L. Eaves, P. C. Main, M. Henini, Yu. V. Dubrovskii, A. E. Belyaev, P. N. Brounkov, E. E. Vdovin, Yu. N. Khanin and G. Hill (2000): Resonant tunneling and photoluminis-cence spectroscopy in quantum wells containing self-assembled quantum dots. *Journal of Applied Physics* Vol. 88, No. 4, 2005-2012.
- D. E. Bremer, K. Zhang, C.J. Schwarz, S. P. Chau, S. J. Allen, J. P. Ibbetson, J. P. Zhang, C. J. Palmstrom and B. Wilkins (1995):. Appl. Phys. Lett. 67, 1268.
- [14] A. Slobodskyy, C. Gould, T. Slobodskyy, C. R. Becker, G. Schmidt and L. W. Molenkamp (2003): Voltage-Controlled Spin SElection ina MagneticResonant Tunneling Diode. *Physical Review Letters* 90, No. 24, 246601
- [15] H. B. de Carvalho, Y. Galvão Gobato, M. J. S. P. Brasil, V. Lopez-Richard, G. E. Marques, I. Camps, M. Henini, L. Eaves and G. Hill (2006): Voltage-controlled spin injection in nonmagnetic GaAs/AlAs resonant tunneling structures. *Phys. Rev.* B 73, 155317.
- [16] H.Ohno, N. Akiba, F. Matsukura, A. Shen, K. Otani and Y. Ohno (1998):. Appl. Phys. Lett 73, 363.
- [17] H. Holmberg, N. Lebedeva, S. Novikov, M. Mattila, P. Kuivalainen, G. Du, X. Han, M. Malfait and V. V. Moshchalkov (2007): Magnetotransport of holes through an AlAs/GaAs/AlAs resonant tunneling quantum well with a ferromagnetic $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As emitter}$. *Phys. Stat. Sol.* **204**, No. 10, 3463-3477.
- [18] O. Thomas, O. Makarovsky, A. Patanè, L. Eaves, R. P. Campion, K.
 W. Edmonds, C. T. Foxton and B. L. Gallagher (2007): Measuring

the hole chemical potential in ferromagnetic $Ga_{1-x}Mn_xAs/GaAs$ heterostructures by photoexcited resonant tunneling. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 082106.

- [19] Helmut Brech (1998): Optimization of GaAs based High Electron Mobility Transistors by Numerical Simulations - Dissertation. Technischen Universität Wien, Fakultät für Elektrotechnik.
- [20] Vassil Palankovski (2000): Simulation of Heterojunction, Bipolar Transistors - Dissertation. Technischen Universität Wien, Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik.
- [21] Jiří Formánek (2004): Úvod do kvantové teorie. Academia, Praha.
- J. Feldmann, G. Peter, E. O. Göbel, P. Dawson, K. Moore, C. Foxon and R. J. Elliott (1987): Linewidth dependence of radiative exciton lifetimes in quantum wells. *Phys. Rev. Lett.* 59, 2337 2340.