



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Ημικλασσική προσομοίωση QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Στέφανος Π. Σάρρας

Επιβλέπων: Ιωάννης Π. Ξανθάκης

Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2014



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ,
ΗΛΕΚΤΡΟΟΠΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Ημικλασσική προσομοίωση QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Στέφανος Π. Σάρρας

Επιβλέπων: Ιωάννης Π. Ξανθάκης

Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 21^η Ιουλίου 2014

.....
Ι. Ξανθάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π

.....
Δ. Τσαμάκης
Καθηγητής Ε.Μ.Π

.....
Η. Γλύτσης
Καθηγητής Ε.Μ.Π

Αθήνα, Ιούλιος 2014

.....
Στέφανος Π. Σάρρας

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π

Copyright © Στέφανος Π. Σάρρας, 2014

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθηκεύση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Μία ολόκληρη εποχή τεχνολογικής εξέλιξης των ημιαγωγικών διατάξεων ψηφιακών εφαρμογών φτάνει στο τέλος της. Για δεκαετίες η σμίκρυνση του MOSFET αύξησε συνεχώς την απόδοση των διακοπτικών στοιχείων και των ολοκληρωμένων κυκλωμάτων υψηλής επίδοσης (high performance ICs). Η δοκιμασμένη συνταγή αδυνατεί πλέον να δώσει τα επιθυμητά άλματα στα χαρακτηριστικά των διατάξεων. Η βιομηχανία των ημιαγωγών και η ερευνητική κοινότητα αναζητούν εναγωνίως την τεχνολογία που θα αντικαταστήσει την Si CMOS. Πολλές διατάξεις εμφανίζονται ως επίδοξοι διάδοχοι. Η όποια λύση προτιμηθεί θα πρέπει να έχει εξαιρετικές και μακροχρόνιες προοπτικές για να πάρει τη θέση της τεχνολογίας πυριτίου, της πιο μελετημένης και εξελιγμένης ίσως ανθρώπινης τεχνολογίας, που αναπτύχθηκε τα τελευταία πενήντα χρόνια. Οι μέχρι τώρα προτεινόμενες πειραματικές διατάξεις QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V επιδεικνύουν πολύ αξιόλογα χαρακτηριστικά.

Στην εξερεύνηση των δυνατοτήτων και των ορίων διαφορετικών υλικών και διατάξεων τα τελευταία χρόνια, πολύ σημαντικό ρόλο παίζει η ανάπτυξη προγραμμάτων προσομοίωσης ημιαγωγικών διατάξεων. Τα προγράμματα προσομοίωσης αφορούν τόσο τις κατασκευαστικές διεργασίες των ημιαγωγικών διατάξεων όσο και τη λειτουργία τους. Η προσφορά τους είναι πολύτιμη σε εξοικονόμηση χρόνου και πόρων. Το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό της εξέλιξης των αλγορίθμων προσομοίωσης είναι η αποδοτικότητα και η ακρίβεια με την οποία προσομοιώνουν φυσικά φαινόμενα τα οποία είναι πολύ απαιτητικά από υπολογιστικής άποψης. Πολλές φορές το ένα από τα δύο χαρακτηριστικά θυσιάζεται στο βωμό του άλλου.

Η εργασία χωρίζεται σε τρία κεφάλαια. Στο πρώτο κεφάλαιο αναπτύσσονται θεμελιικές έννοιες της θεωρητικής ανάλυσης ημιαγωγικών διατάξεων στην κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας. Στο δεύτερο κεφάλαιο αναπτύσσονται τα φαινόμενα μεταφοράς φορέων στους ημιαγωγούς. Δίνεται βάρος στην κλασσική μεταφορά φορέων, ενώ εισάγεται και η φόρμουλα του Landauer ως βάση για να παρουσιαστούν βασικές έννοιες της βαλλιστικής μεταφοράς φορέων. Στο τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζεται το αδιέξοδο στο οποίο έχει βρεθεί η τεχνολογία πυριτίου και τα πλεονεκτήματα που παρουσιάζουν οι διατάξεις QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V. Επίσης συνοψίζονται τρία διαφορετικά σύνολα εξισώσεων που χρησιμοποιούνται σε προγράμματα προσομοίωσης καθώς και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έγιναν στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της παρούσας διπλωματικής εργασίας, καθηγητή κ. Ιωάννη Ξανθάκη για την καθοδήγησή του καθόλη τη διάρκεια των τελευταίων μηνών. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω την υποψήφια διδάκτορα Αργυρώ Γκύλη. Η συνεργασία μαζί τους ήταν εξαιρετική και απρόσμενα γόνιμη σε γνώση και εμπειρίες.

Πίνακας Περιεχομένων

1	Θεωρητική ανάλυση ημιαγωγικών διατάξεων σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας.....	8
1.1	Από τη Χαμιλτονιανή πολλών σωμάτων στην 1e εξίσωση Schrödinger.	8
1.2	Το θεώρημα του Bloch.....	11
1.3	Το Μοντέλο Kronig-Penney	14
1.4	Η εξίσωση ενεργούς μάζας.....	18
1.5	Οι ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής ενεργούς μάζας.....	22
1.6	Πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των κυματαριθμών k	23
1.7	Πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των ενεργειών.....	25
1.8	Στατιστική κατανομή των ηλεκτρονίων.....	27
1.9	Πυκνότητα ηλεκτρονίων σε τρισδιάστατο ημιαγωγό	28
1.10	Χαμηλοδιάστατα φυσικά συστήματα (low dimensional systems).....	31
2	Φαινόμενα μεταφοράς φορέων στους ημιαγωγούς	40
2.1	Ταχύτητα και δυναμική των κυματοπακέτων	40
2.2	Ημικλασική θεωρία μεταφοράς φορέων	45
2.3	Στατιστική κατανομή ταχυτήτων στη θερμοδυναμική ισορροπία.....	46
2.4	Στατιστική κατανομή εκτός ισορροπίας	46
2.5	Quasi-Fermi levels.....	47
2.6	Υπολογισμός ρεύματος χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου από BTE	48
2.7	Εξίσωση ρεύματος για ετεροδιατάξεις.....	52
2.8	Ρεύμα υψηλής πεδιακής έντασης	53
2.9	Περιορισμοί στη χρήση της BTE	55
2.10	Landauer Formula	57
3	Αποτελέσματα προσομοίωσης QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V.	63
3.1	Αναζητώντας τον τέλειο διακόπτη	63
3.2	Ημιαγωγικές διατάξεις III-V, QW-FETs	66
3.3	Συστήματα εξισώσεων προσομοίωσης ημιαγωγικών διατάξεων.	70
3.4	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	78
4	References	92

1 Θεωρητική ανάλυση ημιαγωγικών διατάξεων σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας

1.1 Από τη Χαμιλτονιανή πολλών σωμάτων στην 1e εξίσωση Schrödinger.

Η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το πρόβλημα ενός κρυσταλλικού πλέγματος είναι

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{P_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum'_{j,j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum'_{i,i'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} \quad 1.1$$

Με \mathbf{r}_i συμβολίζουμε τη θέση του i -οστού ηλεκτρονίου και με \mathbf{R}_j τη θέση του j -οστού πυρήνα. Z_j είναι ο ατομικός αριθμός του j -οστού πυρήνα και p_i, P_j οι τελεστές της ορμής του i -οστού ηλεκτρονίου και του j -οστού πυρήνα αντίστοιχα. Για να λύσουμε αυτό το πρόβλημα πολλών σωμάτων κάνουμε τις παρακάτω προσεγγίσεις. Πρώτα από όλα διαχωρίζουμε τα ηλεκτρόνια σε ηλεκτρόνια σθένους και σε ηλεκτρόνια του πυρήνα. Ηλεκτρόνια του πυρήνα ονομάζουμε τα ηλεκτρόνια των συμπληρωμένων τροχιακών, π.χ. τα $1s^2, 2s^2, 2p^6$ ηλεκτρόνια στην περίπτωση του Si. Αυτά τα ηλεκτρόνια είναι αρκετά εντοπισμένα γύρω από τον πυρήνα ώστε να κινούνται μαζί με τον πυρήνα ως ένα συσσωμάτωμα και τελικά μπορούμε στο πρόβλημά μας να θεωρήσουμε τους ιοντικούς πυρήνες που αποτελούνται από τους ατομικούς πυρήνες μαζί με τα παραπάνω ηλεκτρόνια. Με αυτή την προσέγγιση στην χαμιλτονιανή (2.1) οι δείκτες j, j' συμβολίζουν πλέον τους ιοντικούς πυρήνες ενώ οι δείκτες i, i' συμβολίζουν τα ηλεκτρόνια σθένους. Δηλαδή ηλεκτρόνια που ανήκουν σε μη πλήρη τροχιακά.

Η επόμενη προσέγγιση που κάνουμε είναι η προσέγγιση Born-Oppenheimer ή αλλιώς η αδιαβατική προσέγγιση. Οι συχνότητες των ιοντικών ταλαντώσεων στα στερεά είναι συνήθως μικρότερες από $10^{13} s^{-1}$. Οι συχνότητες της κίνησης των ηλεκτρονίων στους ημιαγωγούς είναι της τάξης των $10^{15} s^{-1}$. Επομένως μπορούμε να θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια «βλέπουν» τα ιόντα ακίνητα, ενώ από την άλλη τα ιόντα δεν μπορούν να παρακολουθήσουν την κίνηση των ηλεκτρονίων και θεωρούμε ότι αισθάνονται ένα χρονικά μέσο αδιαβατικό ηλεκτρονικό δυναμικό. Με αυτόν τον τρόπο αποσυνπλέκουμε την κίνηση των ιόντων από την κίνηση των ηλεκτρονίων. Με την προσέγγιση Born-Oppenheimer η χαμιλτονιανή (1.1) μπορεί να γραφτεί

$$H = H_{ions}(\mathbf{R}_j) + H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0}) + H_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j) \quad 1.2$$

Όπου ο πρώτος όρος περιγράφει την κίνηση των ιόντων, υπό την επίδραση του ιοντικού δυναμικού και του μέσου χρονικά αδιαβατικού ηλεκτρονιακού δυναμικού. $H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0})$ είναι η χαμιλτονιανή για τα ηλεκτρόνια με τα ιόντα «παγωμένα» στις θέσεις ισορροπίας τους \mathbf{R}_{j0} . $H_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j)$ είναι η χαμιλτονιανή που περιγράφει τη διαταραχή στην ενέργεια των ηλεκτρονίων η οποία οφείλεται στην απομάκρυνση των ιόντων από τη θέση ισορροπίας τους. Το φαινόμενο αυτό είναι γνωστό ως αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-φωνονίων (electron-phonon interaction) και είναι η αιτία της ηλεκτρικής

αντίστασης των ημιαγωγών σε θερμοκρασία δωματίου, όταν αναφερόμαστε σε επαρκώς καθαρά από προσμίξεις κρυσταλλικά πλέγματα.

Η ανάλυσή μας επικεντρώνεται στη χαμιλτονιανή των ηλεκτρονίων

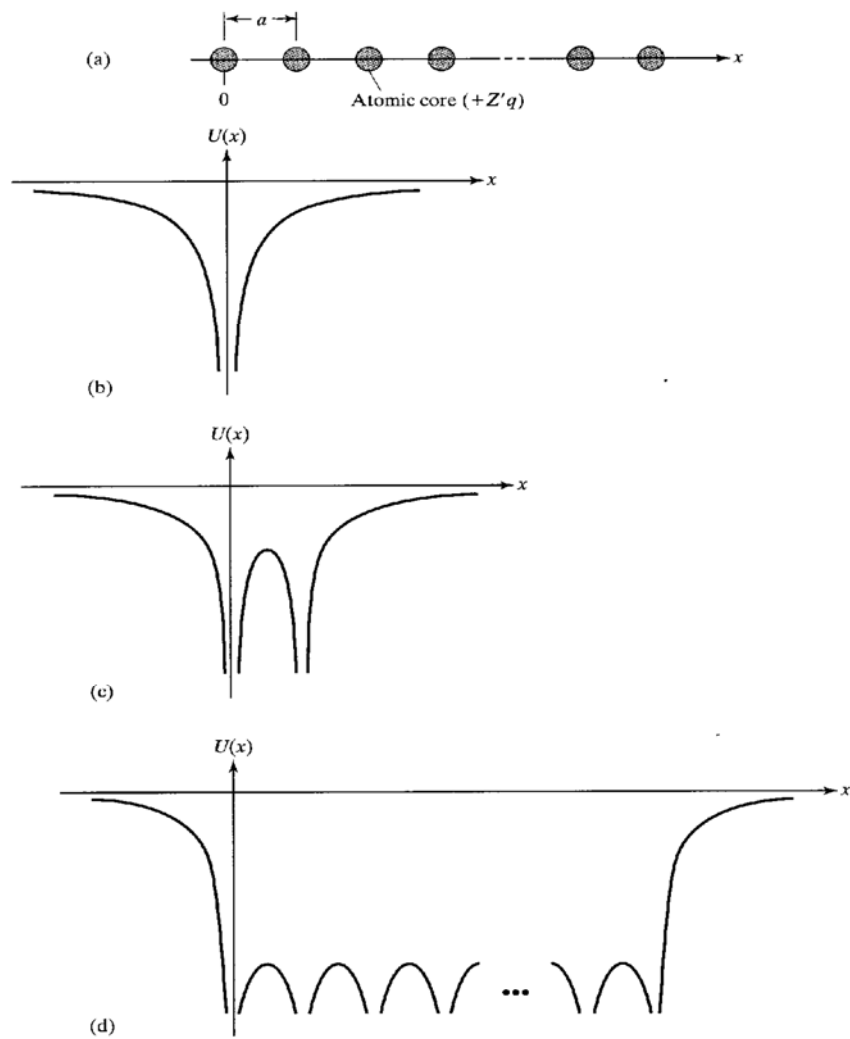
$$H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{j0}) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} \quad 1.3$$

Συνεχίζουμε να έχουμε ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων (ένα στερεό έχει $>10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ηλεκτρόνια) το οποίο απλοποιούμε δραστικά μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου [1]. Θα θεωρήσουμε δηλαδή ότι η επίδραση στην κίνηση ενός ηλεκτρονίου που οφείλεται στα υπόλοιπα ηλεκτρόνια και στους ιοντικούς πυρήνες προσεγγίζεται από ένα δυναμικό το οποίο είναι ίδιο για κάθε ηλεκτρόνιο. Με αυτόν τον τρόπο το πρόβλημα πολλών σωμάτων μετατρέπεται σε ένα πρόβλημα ενός ηλεκτρονίου μέσα στο κρυσταλλικό πλέγμα, αρκεί να προσδιορίσουμε το κατάλληλο δυναμικό. Η Χαμιλτονιανή του προβλήματος θα είναι

$$H_{1e} = \frac{p^2}{2m_e} + U(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) \quad 1.4$$

Για τον προσδιορισμό του δυναμικού του προβλήματός μας, τα ηλεκτρόνια στο εσωτερικό ενός ημιαγωγού μπορούν να θεωρηθούν ότι βρίσκονται μέσα σε ένα τρισδιάστατο κουτί δυναμικού με πολύ «περίπλοκο» εσωτερικό. Σε έναν πραγματικό κρύσταλλο και στις θερμοκρασίες που λειτουργούν οι ημιαγωγιμες διατάξεις θα υπάρχουν κρυσταλλικές ατέλειες (άτομα που λείπουν από τη θέση τους, νοθεύσεις κλπ.) και τα άτομα που συνθέτουν τον κρύσταλλο του ημιαγωγού θα ταλαντώνονται γύρω από τη θεωρητική θέση ισορροπίας τους. Διαχωρίζουμε το δυναμικό το οποίο «αισθάνεται» ένα ηλεκτρόνιο σε εξωτερικό $U_E(\mathbf{r}, t)$ που προέρχεται από ένα εξωτερικό πεδίο που επιβάλλεται στον ημιαγωγό και σε εσωτερικό-μικροσκοπικό το οποίο προέρχεται από την κρυσταλλική δομή του ημιαγωγού. Επίσης σύμφωνα με τα παραπάνω μπορούμε να διαχωρίσουμε το μικροσκοπικό δυναμικό σε ένα τέλειο περιοδικό δυναμικό $U_L(\mathbf{r}, t)$ και σε ένα δυναμικό σκέδασης $U_S(\mathbf{r}, t)$ το οποίο προσομοιώνει τις παραπάνω ατέλειες.

Η γενική μορφή του περιοδικού δυναμικού, στην απλοποιημένη μονοδιάστατη εκδοχή του, μπορεί να καθοριστεί με βάση το σχήμα 1.1. Εξετάζεται για λόγους απλοποίησης το μονοδιάστατο πρόβλημα. Οι ιοντικοί πυρήνες με συνολικό φορτίο $(+Z'q)$ εκτείνονται στον άξονα από τη θέση $x=0$ έως τη θέση $x=(N-1)*a$, όπου a η πλεγματική σταθερά και N ο συνολικός αριθμός ατόμων στην κρυσταλλική αλυσίδα. Αν υποθέσουμε ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ των ιόντων και των ηλεκτρονίων σθένους είναι καθαρά αλληλεπίδραση Coulomb τότε η ελκτική δύναμη που αναπτύσσεται ανάμεσα στο ιόν στη θέση $x=0$ και ένα ηλεκτρόνιο, δημιουργεί την εξάρτηση ως προς x της δυναμικής ενέργειας όπως εικονίζεται στο σχήμα 1.1(b). Παίρνοντας υπόψη και την ελκτική δύναμη από το ιόν στη θέση $x=a$ η δυναμική ενέργεια γίνεται όπως στο σχήμα 1.1(c). Τελικά λαμβάνοντας υπόψη την αλληλεπίδραση του ηλεκτρονίου με όλους τους ιοντικούς πυρήνες παίρνουμε το προφίλ της δυναμικής ενέργειας που απεικονίζεται στο σχήμα 1.1(d).

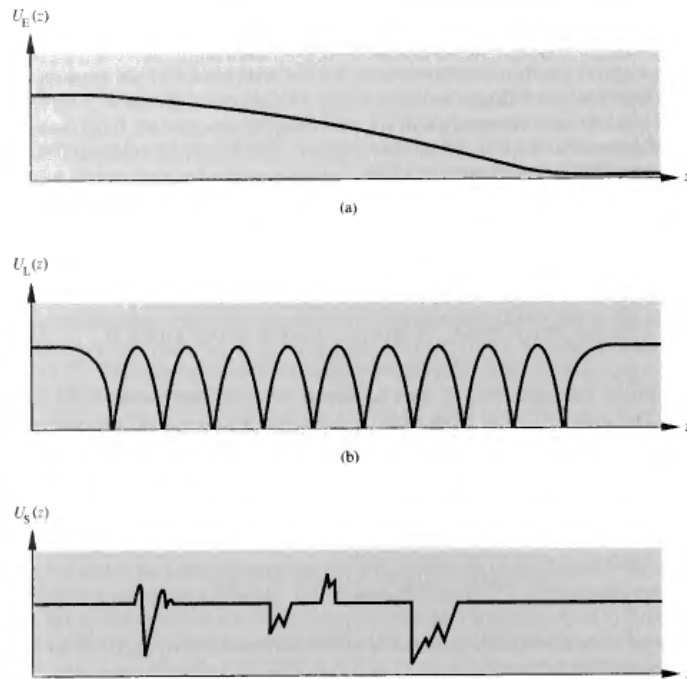


Σχήμα 1.1 (α) Κρυσταλλική αλυσίδα N ατόμων, με σταθερή διατομική απόσταση a , (β) δυναμικό Coulomb, (γ) προφίλ δυναμικού διατομικής αλυσίδας, (δ) προφίλ δυναμικού N -ατομικής αλυσίδας. [2]

Τα υπόλοιπα μέρη του δυναμικού, $U_E(\mathbf{r}, t)$ και $U_S(\mathbf{r}, t)$, είναι της μορφής που απεικονίζεται στο σχήμα 1.2(a) και 1.2(c). Ανοίγοντας μια μικρή παρένθεση, όπως θα δούμε και παρακάτω ένα τέλειο περιοδικό δυναμικό αφήνει «άθικτη» τη διάδοση ενός κύματος-ηλεκτρονίου αφού τα σκεδαζόμενα μέρη ανασυνθέτουν το αρχικό μέτωπο διάδοσης. Αντίθετα, ένα δυναμικό το οποίο είναι σχεδόν περιοδικό, λόγω διαταραχών όπως αυτές του σχήματος 1.2(c) (οφείλονται σε νοθεύσεις, απουσίες, θερμική κίνηση ατόμων, αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων) προκαλεί σκεδάσεις αλλάζοντας την διεύθυνση διάδοσης ή και την ενέργεια του ηλεκτρονίου. Έτσι δικαιολογείται και η ονομασία δυναμικό σκέδασης για τον όρο $U_S(\mathbf{r}, t)$.

Η χαμιλτονιανή του προβλήματός μας λοιπόν θα είναι

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U_E(\mathbf{r}, t) + U_L(\mathbf{r}, t) + U_S(\mathbf{r}, t) \quad 1.5$$



Σχήμα 1.2 (α) Δυναμικό εξωτερικού πεδίου $U_E(\mathbf{r}, t)$, (β) περιοδικό κρυσταλλικό δυναμικό $U_L(\mathbf{r}, t)$, (γ) δυναμικό σκέδασης (scattering potential) $U_S(\mathbf{r}, t)$. [3]

Η κβαντομηχανική ανάλυση απλοποιείται αν παραλείψουμε τον όρο $U_S(\mathbf{r}, t)$, δηλαδή κάνοντας την παραδοχή ότι το κρυσταλλικό πλέγμα είναι τέλει, ότι τα άτομα είναι ακίνητα στις θέσεις ισορροπίας τους και αγνοώντας την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-ηλεκτρονίων. Τότε στην περίπτωση που δεν εφαρμόζεται στη διάταξη κάποιο ηλεκτρικό πεδίο η δυναμική ενέργεια στη διάταξη είναι $U(\mathbf{r}, t) = U_L(\mathbf{r}, t)$ και η εξίσωση Schrödinger του μονοδιάστατου προβλήματος

$$H_{1e}\Psi = E\Psi \quad 1.6$$

Όπου

$$H_{1e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + U_L(\mathbf{r}, t) \quad 1.7$$

1.2 Το θεώρημα του Bloch

Το θεώρημα του Bloch είναι πολύ χρήσιμο στην κβαντομηχανική ανάλυση όταν στο πρόβλημά μας εμπλέκεται ένα περιοδικό δυναμικό, όπως στην περίπτωση του $U_L(\mathbf{r}, t)$. Μας δίνει τη δυνατότητα να συσχετίσουμε την κυματοσυνάρτηση σε μια μοναδιαία κυψελίδα ενός περιοδικού δυναμικού με ένα ισόδυναμο σημείο σε μία άλλη μοναδιαία κυψελίδα οπότε μας επιτρέπει να επικεντρώσουμε την

αναζήτηση λύσης της εξίσωσης Schrödinger σε μία μόνο κυψελίδα η οποία επαναλαμβανόμενη συνθέτει το αρχικό συνολικό πρόβλημα. Στην περίπτωση του μονοδιάστατου προβλήματος το θεώρημα του Bloch μας λέει ότι

Αν το δυναμικό $U(x)$ είναι περιοδικό τέτοιο ώστε $U(x + a) = U(x)$

$$\text{Τότε} \quad \psi(x + a) = e^{ika}\psi(x)$$

$$\text{Ή ισοδύναμα} \quad \psi(x) = e^{ikx}u(x)$$

Όπου $u(x)$ συνάρτηση με την ίδια περιοδικότητα με την συνάρτηση του δυναμικού U , δηλαδή $u(x + a) = u(x)$.

Ομοίως για ένα τρισδιάστατο σύστημα που χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα συμμετρίας μετατόπισης \mathbf{a} και ένα περιοδικό δυναμικό $U(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{r})$ το θεώρημα του Bloch υποδεικνύει ότι

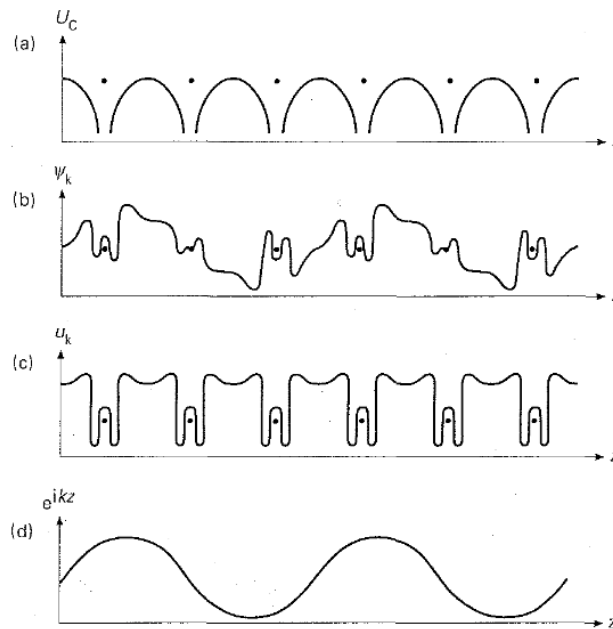
$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{ik \cdot \mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})$$

Ή ισοδύναμα

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik \cdot \mathbf{r}}u(\mathbf{r}) \quad 1.8$$

Όπου $u(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u(\mathbf{r})$.

Παρατηρούμε ότι $|\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2$ καθώς επίσης και ότι η κυματοσυνάρτηση είναι ένα επίπεδο κύμα του οποίου το πλάτος διαμορφώνεται από την $u(\mathbf{r})$ που αντανακλά την περιοδικότητα του δυναμικού. Ένα παράδειγμα συνάρτησης Bloch βλέπουμε παρακάτω.



Σχήμα 1.3 (α)Περιοδικό κρυσταλλικό δυναμικό (β) Η κυματοσυνάρτηση Bloch (γ) Η συνάρτηση διαμόρφωσης πλάτους (δ) $\exp(ikz)$, επίπεδο κύμα. [4]

Από τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι αν θεωρήσουμε κρύσταλλο που εκτείνεται άπειρα θα πρέπει το k να είναι πραγματικός αριθμός, για να μην απειρίζεται η κυματοσυνάρτηση στο $x = \pm\infty$, ενώ δεν επιβάλλεται κάποιος άλλος περιορισμός. Όταν μελετάμε το αντίστοιχο πρόβλημα πεπερασμένης έκτασης, επειδή οι πληροφορίες μας σχετικά με τις συνοριακές συνθήκες στα πραγματικά άκρα του ημιαγωγού πιθανόν να είναι ελλιπείς, χρησιμοποιούμε τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Επίσης όπως γίνεται φανερό παρακάτω οι λύσεις του προβλήματος είναι οδεύοντα κύματα στην περίπτωση που εφαρμόζουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες, ενώ στην περίπτωση που στα άκρα της διάταξης εφαρμόσουμε συνθήκες απειρόβαθου πηγαδιού οι λύσεις είναι στάσιμα κύματα. Έτσι είναι προτιμότερο στην ανάλυση των διατάξεων να εφαρμόζουμε τις πρώτες. Αντιμετωπίζουμε, δηλαδή, τον κρύσταλλο ως αλυσίδα N ατόμων. Σε αυτή την περίπτωση πρώτο και τελευταίο σημείο είναι ένα και το αυτό και θα πρέπει

$$\psi(x) = \psi(x + Na) = e^{ikNa}\psi(x) \quad 1.9$$

Ισοδύναμα

$$e^{ikNa} = 1$$

$$k = \frac{2\pi n}{Na} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad 1.10$$

Επίσης $Na = L$, άρα η (1.10) γράφεται ισοδύναμα

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad 1.11$$

Για έναν κρύσταλλο λοιπόν πεπερασμένου μήκους, το k παίρνει διακριτές τιμές. Επίσης, μπορούμε να περιορίσουμε το εύρος των τιμών του κυματαριθμού k σε μία ζώνη $2\pi/a$ και να έχουμε το πλήρες σύνολο των δυνατών κυματοσυναρτήσεων, καθώς έξω από αυτό το εύρος παίρνουμε επαναλαμβανόμενα τις ίδιες λύσεις. Συνήθως επιλέγουμε αυτή η ζώνη να είναι η $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, η οποία ονομάζεται πρώτη ζώνη Brillouin. Επομένως μπορούμε να γράψουμε την (1.11)

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2 \quad 1.12$$

Είναι λοιπόν φανερό ότι ο κυματαριθμός παίρνει ένα σύνολο πεπερασμένων τιμών, οι οποίες είναι τόσο πιο πυκνές όσο πιο μεγάλο είναι το μήκος του ημιαγωγού που εξετάζουμε. Πρακτικά σε πολλές περιπτώσεις θεωρούμε το φάσμα των τιμών του συνεχές, ωστόσο υπάρχουν διατάξεις όπου μία τέτοια θεώρηση θα ήταν από πλευράς φυσικής ερμηνείας λαθεμένη και θα μας οδηγούσε σε σοβαρές αποκλίσεις από την πραγματικότητα.

1.3 Το Μοντέλο Kronig-Penney

Ακόμα και με όλες τις παραπάνω απλοποιήσεις που έχουν γίνει η επίλυση της (1.7) είναι εξαιρετικά δύσκολη, λόγω της μαθηματικά δύσκολης μορφής του κρυσταλλικού δυναμικού. Για αυτόν το λόγο κάνουμε μία ακόμα προσέγγιση που εξιδανικεύει τη μορφή του κρυσταλλικού δυναμικού και διευκολύνει την εξαγωγή λύσεων κλειστής μορφής της (1.7). Αυτή η προσέγγιση ονομάζεται μοντέλο Kronig-Penney και συνοψίζεται στο σχήμα 1.4. Στο μοντέλο αυτό θεωρείται ότι ο κρύσταλλος εκτείνεται άπειρα. Σκοπός της ανάλυσης που ακολουθεί στην ενότητα αυτή δεν είναι η εξαγωγή ακριβών λύσεων, αλλά η ανάδειξη ποιοτικών χαρακτηριστικών του ενεργειακού φάσματος των ηλεκτρονίων στους ημιαγωγούς (ενεργειακές ζώνες, ενεργειακό διάκενο) που παίζουν κυρίαρχο ρόλο στη σχεδίαση ημιαγωγικών διατάξεων.

Θεωρούμε ηλεκτρόνιο μάζας m και ενέργειας E μέσα στο ιδανικό δυναμικό του Σχήματος 1.4(b). Το θεώρημα του Bloch όπως ήδη αναφέραμε συσχετίζει τη λύση σε μια «κυψελίδα» μήκους $a+b$ με τα υπόλοιπα σημεία του κρυστάλλου. Θεωρούμε άκρα της θεμελιώδους κυψελίδας τα σημεία $x=-b$ και $x=a$. Τότε η εξίσωση Schrödinger στις δύο περιοχές του προβλήματος θα είναι

$$\frac{d^2\psi_a}{dx^2} + \alpha^2\psi_a = 0 \quad 0 < x < a \quad 1.13$$

Όπου $\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Και

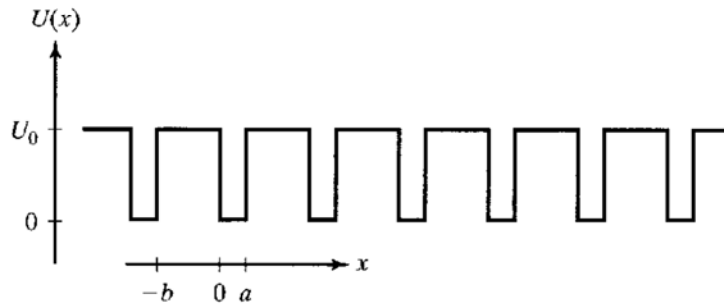
$$\frac{d^2\psi_b}{dx^2} + \beta^2\psi_b = 0 \quad -b < x < 0 \quad 1.14$$

Όπου

$$\beta = \begin{cases} i\beta_- & \beta_- = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} & 0 < E < U_0 \\ \beta_+ & \beta_+ = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2} & E > U_0 \end{cases}$$



(a)



(b)

Σχήμα 1.4 (α) Περιοδικό δυναμικό (β) Μοντέλο Kronig-Penney. [2]

Οι γενικές λύσεις των (1.13), (1.14) είναι της μορφής

$$\psi_a(x) = A_a \sin(ax) + B_a \cos(ax) \quad 1.15$$

$$\psi_b(x) = A_b \sin(\beta x) + B_b \cos(\beta x) \quad 1.16$$

Η κυματοσυνάρτηση και η παράγωγός της πρέπει να είναι συνεχείς στο $x=0$. Επίσης θα ικανοποιούν τις περιοδικές συνθήκες που επιβάλλει η υπόθεση της άπειρης αλυσίδας στα άκρα της περιοχής που εξετάζουμε. Επομένως θα έχουμε τις τέσσερις παρακάτω σχέσεις:

$$\left. \begin{aligned} \psi_a(0) &= \psi_b(0) \\ \frac{d\psi_a}{dx} \Big|_{x=0} &= \frac{d\psi_b}{dx} \Big|_{x=0} \end{aligned} \right\} \text{Συνθήκες συνέχειας} \quad 1.17$$

$$\left. \begin{aligned} \psi_a(a) &= e^{ik(a+b)} \psi_b(b) \\ \frac{d\psi_a}{dx} \Big|_{x=a} &= e^{ik(a+b)} \frac{d\psi_b}{dx} \Big|_{x=-b} \end{aligned} \right\} \text{Συνθήκες περιοδικότητας} \quad 1.18$$

Οι παραπάνω συνθήκες οδηγούν στο σύστημα εξισώσεων:

$$A_a [\sin(aa) + (\alpha/\beta) e^{ik(a+b)} \sin(\beta b)] + B_a [\cos(aa) - e^{ik(a+b)} \cos(\beta b)] = 0 \quad 1.19$$

$$A_a [\alpha \cos(aa) - \alpha e^{ik(a+b)} \cos(\beta b)] + B_a [-\alpha \sin(aa) - \beta e^{ik(a+b)} \sin(\beta b)] = 0 \quad 1.20$$

Για να έχει το σύστημα μία και μοναδική λύση η ορίζουσά του πρέπει να ισούται με μηδέν, άρα μετά από πράξεις καταλήγουμε:

$$-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \sin(\beta b) + \cos(\alpha a) \cos(\beta b) = \cos k(a + b) \quad 1.21$$

Εισάγοντας τις μεταβλητές $\alpha_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$ και $\xi = E/U_0$ και διακρίνοντας περιπτώσεις για το εύρος του E καταλήγουμε

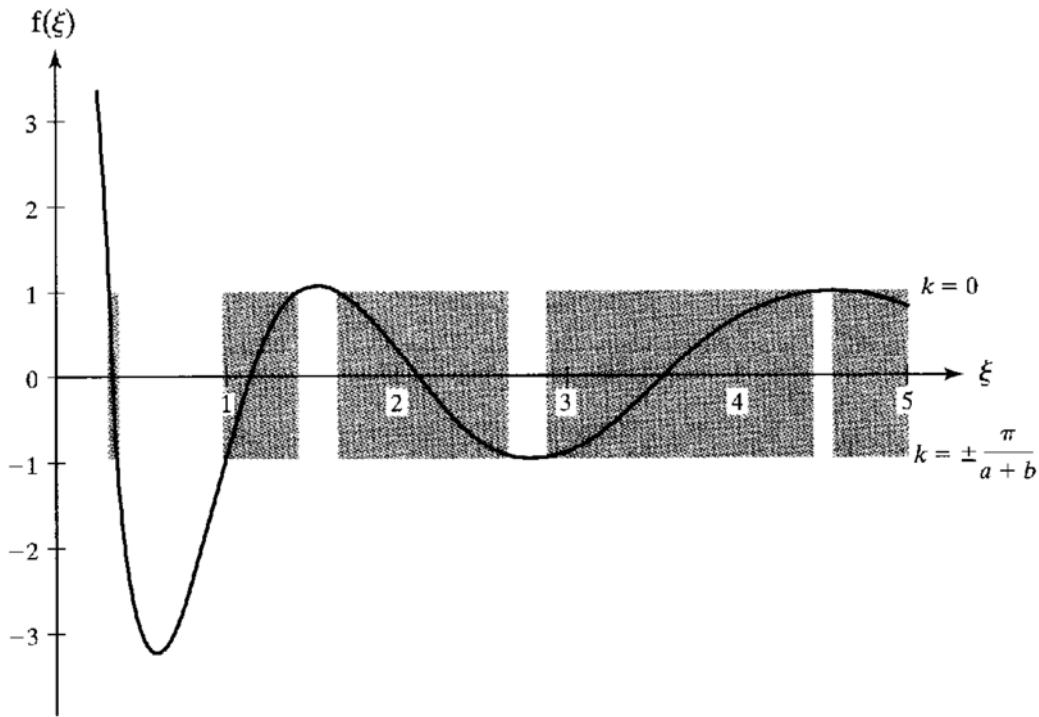
$$\begin{aligned} \frac{1 - 2\xi}{2\sqrt{\xi(1-\xi)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{\xi}) \sinh(\alpha_0 b \sqrt{1-\xi}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{\xi}) \cosh(\alpha_0 b \sqrt{1-\xi}) \\ = \cos k(a + b) \quad 0 < E < U_0 \end{aligned} \quad 1.22a$$

$$\begin{aligned} \frac{1 - 2\xi}{2\sqrt{\xi(\xi-1)}} \sin(\alpha_0 a \sqrt{\xi}) \sin(\alpha_0 b \sqrt{\xi-1}) + \cos(\alpha_0 a \sqrt{\xi}) \cos(\alpha_0 b \sqrt{\xi-1}) \\ = \cos k(a + b) \quad E > U_0 \end{aligned} \quad 1.22b$$

Παρατηρούμε ότι πέρα από τις φυσικές σταθερές του προβλήματος, το αριστερό μέλος των εξισώσεων εξαρτάται μόνο από την ενέργεια E, ενώ το δεξί μέλος μόνο από τον κυματαριθμό k. Συνεπώς οι εξισώσεις (1.22a), (1.22b) καθορίζουν τις επιτρεπτές τιμές του E που αντιστοιχούν σε δεδομένο k.

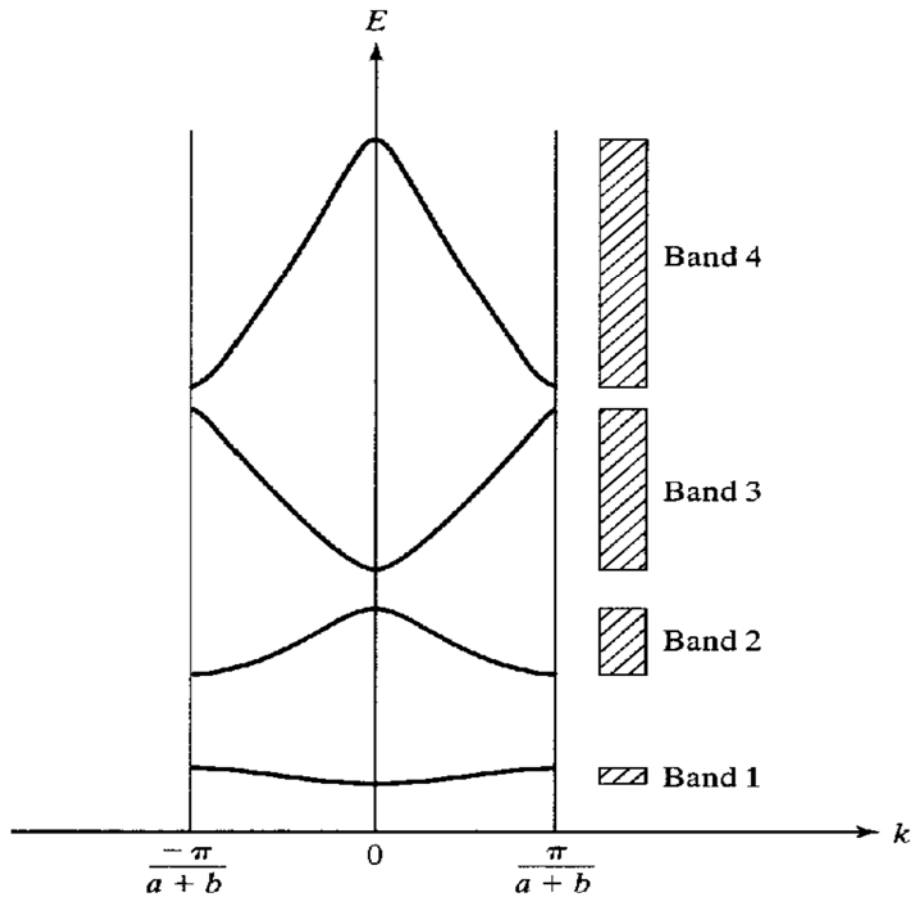
Υποθέσαμε άπειρο κρύσταλλο οπότε το k είναι οποιοσδήποτε πραγματικός αριθμός. Άρα το δεξί μέλος της (1.22) παίρνει όλες τις τιμές στο διάστημα [-1,1]. Αν ορίσουμε το αριστερό μέλος της (1.22) ως f(ξ) τότε οι επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας είναι αυτές για τις οποίες η f(ξ) λαμβάνει τιμές στο διάστημα [-1,1].

Στο Σχήμα 1.5 απεικονίζεται η γραφική επίλυση της (1.22), για συγκεκριμένες τιμές σταθερών $\alpha_0 b = \alpha_0 a = \pi$. Παρατηρούμε ότι η f(ξ) ταλαντώνεται και παίρνει τιμές μεγαλύτερες του 1 και μικρότερες του -1. Το ίδιο συμβαίνει για οποιοδήποτε σύνολο σταθερών. Επομένως, γίνεται φανερό ότι υπάρχουν περιοχές επιτρεπόμενων ενεργειών, οι σκιασμένες περιοχές στο Σχήμα 1.5 και απαγορευμένες περιοχές ενεργειών, οι μη σκιασμένες στο Σχ. 1.5. Οι περιοχές των επιτρεπόμενων ενεργειών λέγονται ενεργειακές ζώνες, ενώ οι απαγορευμένες περιοχές ονομάζονται ενεργειακά διάκενα.



Σχήμα 1.5 Γραφική επίλυση της εξίσωσης (1.22) που προσδιορίζει τις επιτρεπτές και τις απαγορευμένες ενέργειες. [2]

Στο Σχ. 1.6 απεικονίζονται οι ενεργειακές ζώνες και τα ενεργειακά διακένα στην πρώτη ζώνη Brillouin. Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονίσουμε ότι οι ενεργειακές ζώνες που προκύπτουν από το μοντέλο Kronig-Penney και παρουσιάζονται στο Σχ. 1.6, παριστάνουν μια εξιδανικευμένη προσέγγιση του πραγματικού ενεργειακού φάσματος των ηλεκτρονίων στους ημιαγωγούς. Το πραγματικό φάσμα διατηρεί τα γενικά χαρακτηριστικά της ύπαρξης ενεργειακών ζωνών και ενεργειακών διακένων, ωστόσο τα ελάχιστα και μέγιστα των ζωνών μπορεί να αποκλίνουν αρκετά από το γράφημα του Σχ. 1.6. Υπάρχουν υπολογιστικές μέθοδοι πρώτων αρχών (ab initio) που προβλέπουν με πολύ μεγαλύτερη ακρίβεια το ενεργειακό φάσμα των ημιαγωγών. Σε παρακάτω ενότητες απεικονίζονται οι ενεργειακές ζώνες ημιαγωγών που μας ενδιαφέρουν, υπολογισμένες με τέτοιες ακριβείς μεθόδους.



Σχήμα 1.6 Ενεργειακό φάσμα ημιαγωγών όπως προκύπτει από το προσεγγιστικό μοντέλο Kronig-Penney. [2]

1.4 Η εξίσωση ενεργούς μάζας.

Η εξίσωση της ενεργούς μάζας αποτελεί μία πολύ χρήσιμη προσέγγιση στη θεωρητική ανάλυση των ημιαγωγικών διατάξεων καθώς μας επιτρέπει υπό προϋποθέσεις να αγνοήσουμε την ύπαρξη του κρυσταλλικού δυναμικού και άρα να θεωρήσουμε τη διάταξή μας ως ένα πηγάδι δυναμικού με όρια στις τρεις διευθύνσεις τις φυσικές διαστάσεις του ημιαγωγού. Παρακάτω παραθέτουμε τις βασικές ιδέες της προσέγγισης αυτής.

Κάθε ενεργειακή ζώνη γύρω από ένα μέγιστο ή ελάχιστο της μπορεί να αναπτυχθεί σε σειρά του k όπως παρακάτω. Στη μία διάσταση γύρω από ένα ακρότατο της ενεργειακής ζώνης, στην περίπτωση μας το $k=0$, έχουμε:

$$E(k) = E(0) + \frac{dE}{dk}k + \frac{1}{2} \frac{d^2E}{dk^2}k^2 + \dots = E(0) + \frac{1}{2} \frac{d^2E}{dk^2}k^2 \quad 1.24$$

Όπου χρησιμοποιήσαμε ότι $\frac{dE}{dk} = 0$ αφού αναπτύσσουμε γύρω από ακρότατο. Αν ορίσουμε την ενεργό μάζα

$$m^* = \hbar^2 \frac{1}{\frac{d^2E}{dk^2}} \quad 1.25$$

Τότε

$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad 1.26$$

Παραθέτουμε ξανά για λόγους συνοχής την εξίσωση του προβλήματος χωρίς προσέγγιση

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H \Psi_0(\mathbf{r}, t) \quad 1.27$$

Όπου $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ η λύση του πλήρους προβλήματος και

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U_E(\mathbf{r}, t) + U_L(\mathbf{r}, t) + U_s(\mathbf{r}, t) \quad 1.28$$

Τώρα ορίζουμε την εξίσωση ενεργούς μάζας ως

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H' \Psi(\mathbf{r}, t) \quad 1.29$$

και αντίστοιχα τη χαμιλτονιανή ενεργούς μάζας

$$H' = E(-i\nabla) + U_E(\mathbf{r}, t) + U_s(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + E(0) + U_E(\mathbf{r}, t) + U_s(\mathbf{r}, t) \quad 1.30$$

Τότε αναπτύσσοντας την $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ στη βάση των ιδιοσυναρτήσεων της H και την Ψ στη βάση των ιδιοσυναρτήσεων της H' , μετά από πράξεις καταλήγουμε ([3], σελ. 186-190)

$$\Psi_0(\mathbf{r}, t) \approx u_{v,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad 1.31$$

Δηλαδή η λύση της (1.27) είναι περίπου ίση με το γινόμενο του περιοδικού στοιχείου της κυματοσυνάρτησης Bloch και της λύσης της (1.29). Άρα μπορούμε να πούμε ότι η $\Psi(\mathbf{r}, t)$ είναι η

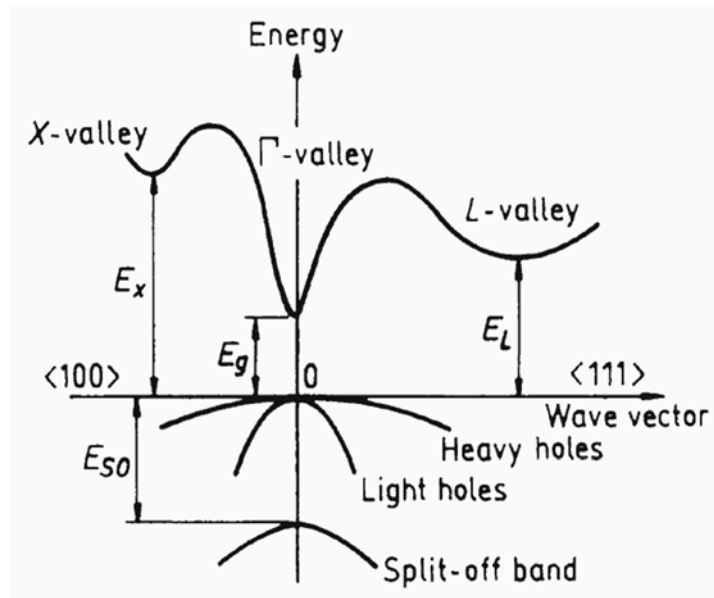
περιβάλλουσα της $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$. Η προσέγγιση της (1.31) είναι τόσο πιο ορθή όσο πιο αργά μεταβάλλεται το δυναμικό του προβλήματος.

Γίνεται φανερό ότι η παραπάνω προσέγγιση είναι αρκετά βολική αφού πρώτα από όλα μας δίνει τη δυνατότητα να θεωρήσουμε ότι για τις ενεργειακές στάθμες κοντά στα ακρότατα τα ηλεκτρόνια του ημιαγωγού συμπεριφέρονται όπως τα ηλεκτρόνια ενός ελεύθερου ηλεκτρονιακού αερίου με την τροποποίηση $m_e \rightarrow m^*$ ή αλλιώς μεταβάλλεται μόνο η κυρτότητα της καμπύλης της ενέργειας ως προς k του ελεύθερου ηλεκτρονιακού αερίου. Επίσης όπως θα δούμε παρακάτω η περιβάλλουσα της $\Psi_0(\mathbf{r}, t)$ περιέχει επαρκή πληροφορία όσον αφορά τις ιδιότητες μεταφοράς φορτίου μιας ημιαγωγίμης διάταξης.

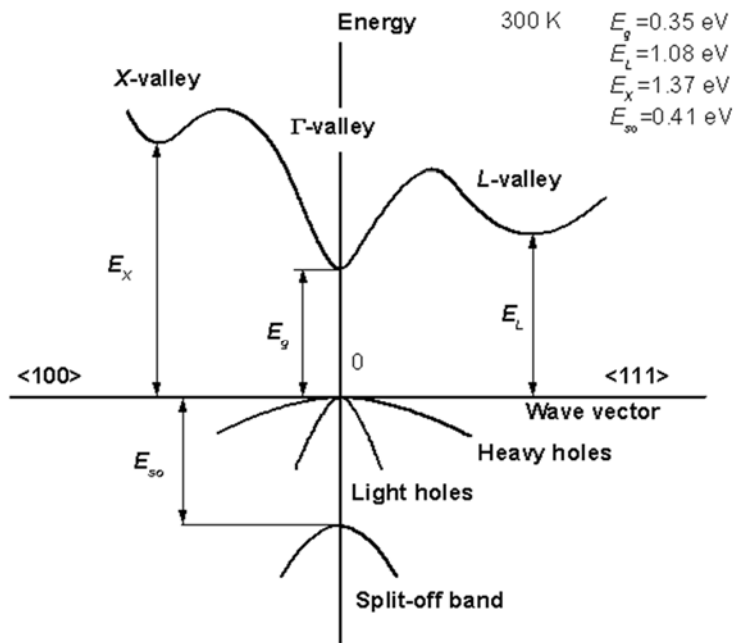
Συγκριτικά στοιχεία για τα υλικά InGaAs, InAs, Si.

Στον παρακάτω πίνακα παρατίθενται φυσικές παράμετροι E_g, m_n^*, χ , που προσδιορίζουν βασικά χαρακτηριστικά του ενεργειακού φάσματος για τα υλικά $In_{0.53}Ga_{0.47}As$, $InAs$ και Si που άπτονται του ενδιαφέροντος της παρούσας εργασίας. Επίσης τα σχήματα 1.7, 1.8 και 1.9 απεικονίζουν τα διαγράμματα E-k για τα παραπάνω υλικά.

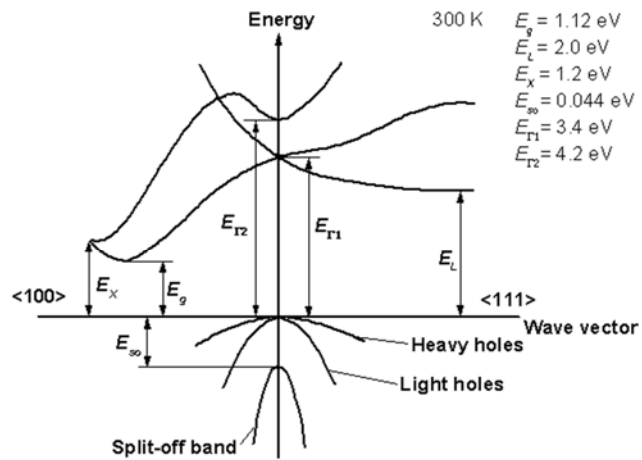
	$In_{0.53}Ga_{0.47}As$	$InAs$	Si
Ενεργειακό διάκενο E_g	0.74eV	0.354eV	1.1eV
Ενεργός μάζα ηλεκτρονίων m_n^*	0.041 m_0	0.023 m_0	0.26 m_0
Ηλεκτρονική συγγένεια	4.5eV	4.9eV	4.05eV



Σχήμα 1.7 Διάγραμμα E-k για το υλικό $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ [5]



Σχήμα 1.8 Διάγραμμα E-k για το υλικό InAs [6]



Σχήμα 1.9 Διάγραμμα E-k για το υλικό Si. [5]

1.5 Οι ιδιοκαταστάσεις της χαμιλτονιανής ενεργούς μάζας

Αν υποθέσουμε μια ημιαγωγική διάταξη μήκους L χωρίς εξωτερικές πολώσεις και αγνοήσουμε το δυναμικό σκέδασης τότε η εξίσωση ενεργούς μάζας στη μία διάσταση γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + E_{c0} \Psi(x) = E \Psi(x) \quad 1.32$$

Οι λύσεις της (1.32) είναι

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \quad 1.33$$

Όπου

$$k_x = \sqrt{\frac{2m^*(E - E_c)}{\hbar^2}} \quad 1.34$$

Εφαρμόζοντας συνοριακές συνθήκες Born-Von Karman

$$\Psi(0) = \Psi(L)$$

και

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x=L}$$

Παίρνουμε για το k ότι

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L_x}, \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad 1.35$$

και

$$E_{k_x} = E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} = E_c + \frac{2\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{m^* L^2} \quad 1.36$$

Παρατηρούμε ότι η διαφορά μεταξύ δύο διαδοχικών ενεργειακών επιπέδων n και $n+1$ είναι

$$\Delta E_n = \frac{2\hbar^2 \pi^2 (n_x + 1)^2}{m_e L^2} - \frac{2\hbar^2 \pi^2 n_x^2}{m_e L^2} = \frac{2\hbar^2 \pi^2}{m_e L^2} (2n_x + 1) \quad 1.37$$

Από τη σχέση (1.37) γίνεται φανερό ότι όσο πιο μικρό είναι το μήκος του ημιαγωγού τόσο πιο αισθητή γίνεται η διαφορά ανάμεσα στα ενεργειακά επίπεδα. Αντιθέτως στο όριο του $L \rightarrow \infty$ το ενεργειακό φάσμα τείνει να γίνει συνεχές.

Με επέκταση της λύσης για 3 ανεξάρτητους βαθμούς ελευθερίας βρίσκουμε ότι για το τρισδιάστατο πρόβλημα του ημιαγωγού χωρίς πολώσεις θα έχουμε τις ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_{k_x, k_y, k_z}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{ik_y y} \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ik_z z} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} e^{ikr} \quad 1.38$$

Και ιδιοτιμές της ενέργειας

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad 1.39$$

Με

$$k_x = \frac{2n_x \pi}{L_x}, \quad k_y = \frac{2n_y \pi}{L_y}, \quad k_z = \frac{2n_z \pi}{L_z}, \quad \mu\epsilon \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Η (1.39) ισχύει για ιστροπικά υλικά ($m_x^* = m_y^* = m_z^* = m^*$). Για μη ιστροπικά υλικά οι ιδιοτιμές της ενέργειας δίνονται από την (1.40)

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^*} \quad 1.40$$

Από αυτό το σημείο και έπειτα θα εννοείται ότι τα υλικά μας είναι ιστροπικά και θα χρησιμοποιείται η σχέση (1.39), καθώς οι ημιαγωγοί που μας απασχολούν στην παρούσα εργασία είναι ιστροπικοί.

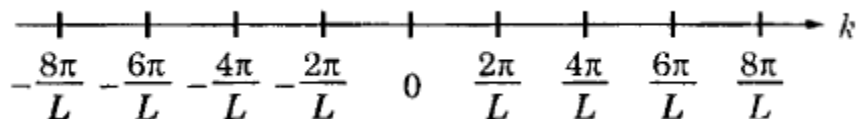
1.6 Πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των κυματαριθμών k

Στην παραπάνω εξέταση του μονοδιάστατου προβλήματος είδαμε ότι οι επιτρεπτές τιμές του κυματαριθμού k δίνονται από την (1.35). Άρα κάθε ιδιοκατάσταση καταλαμβάνει χώρο $\frac{2\pi}{L_x}$ στο χώρο των κυματαριθμών, όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.10. Μπορούμε να ορίσουμε ως πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των κυματαριθμών το μέγεθος $N_{1D}(k)$ τέτοιο ώστε το γινόμενο $N_{1D}(k)dk$ να ισούται με τον αριθμό των επιτρεπτών καταστάσεων στο διάστημα k ως k+dk. Δηλαδή θα έχουμε

$$N_{1D}(k)dk = \frac{L_x}{2\pi} dk$$

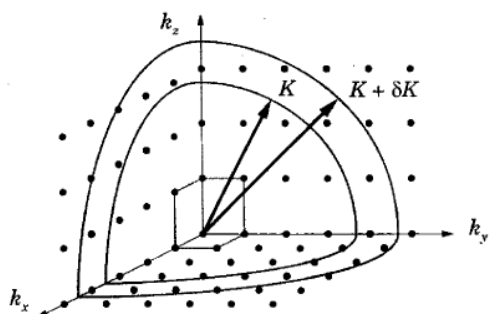
Άρα

$$N_{1D}(k) = \frac{L_x}{2\pi} \quad 1.41$$



Σχήμα 1.10 Επιτρεπτές τιμές του k , για περιοδικές συνοριακές συνθήκες σε μονοδιάστατο ημιαγωγό μήκους L , σχεδιασμένες σε μία ευθεία, ως μια απλή αναπαράσταση του χώρου των κυματαριθμών. [7]

Αντίστοιχα για το πρόβλημα των τριών διαστάσεων τα επιτρεπόμενα σημεία στο χώρο των κυματαριθμών φαίνονται στο Σχήμα 1.11.



Σχήμα 1.11 Ο χώρος των κυματαριθμών για τρισδιάστατο ημιαγωγό

Ο στοιχειώδης όγκος που καταλαμβάνει στο χώρο των καταστάσεων μία δυνατή ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής θα είναι σε αυτήν την περίπτωση

$$\Omega_0 = (\Delta k_x)(\Delta k_y)(\Delta k_z) = \frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y} \times \frac{2\pi}{L_z} = \frac{8\pi^3}{V} \quad 1.42$$

Όπου $\Delta k_i = \frac{2\pi}{L_i}$, $i = x, y, z$ η σταθερή απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων πάνω στους αντίστοιχους άξονες. Αντίστοιχα με το μονοδιάστατο πρόβλημα ο αριθμός των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου του χώρου των κυματαριθμών είναι

$$N_{3D}(k) = \frac{L^3}{8\pi^3}$$

Για να λάβουμε υπόψη το spin των ηλεκτρονίων με δύο δυνατές τιμές $s = \pm \frac{1}{2}$ πολλαπλασιάζουμε την παραπάνω σχέση με 2 και η τελική έκφραση για την πυκνότητα καταστάσεων ενός ημιαγωγού είναι

$$N_k = \frac{\text{Αριθμός καταστάσεων ηλεκτρονίων}}{\text{Όγκος του χώρου των κυματαριθμών}} = 2 \times \frac{L^3}{8\pi^3} = \frac{V}{4\pi^3} \quad 1.43$$

Κάνοντας την αντίστοιχη εργασία για το δισδιάστατο πρόβλημα μπορούμε να καταλήξουμε στη γενική φόρμουλα

$$N_k^d = 2 \times \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \quad 1.44$$

Όπου d οι διαστάσεις του προβλήματος.

Όπως θα δούμε και παρακάτω στην ανάλυση των ημιαγωγικών διατάξεων συχνά βρισκόμαστε μπροστά στο πρόβλημα να υπολογίσουμε αθροίσματα της παρακάτω μορφής:

$$\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k})$$

όπου $g(\mathbf{k})$ συνάρτηση του \mathbf{k} και η άθροιση γίνεται σε όλες τις καταστάσεις της ζώνης Brillouin. Σε αυτές τις περιπτώσεις και όταν είναι εφικτό, είναι βολικό να θεωρούμε συνεχές το φάσμα των δυνατών καταστάσεων και να ολοκληρώνουμε παρά να αθροίζουμε. Η πυκνότητα καταστάσεων είναι χρήσιμη σε αυτή την «μετατροπή» που μας δίνει

$$\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) = N_k \int g(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad 1.45$$

Τέτοια αθροίσματα είναι απαραίτητα στον υπολογισμό μεγεθών όπως η πυκνότητα φορέων η πυκνότητα ρεύματος κλπ.

1.7 Πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο των ενεργειών

Από τη σχέση (1.44) φαίνεται ότι στο χώρο των κυματαριθμών η πυκνότητα καταστάσεων είναι σταθερή σε όλο το εύρος της ζώνης Brillouin. Πολλές φορές είναι υπολογιστικά απλούστερο να χρησιμοποιήσουμε την πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων. Το σχήμα 1.12 απεικονίζει τη σχέση μεταξύ $N(E)$ και $N(\mathbf{k})$. Οι καταστάσεις κατανέμονται ομοιόμορφα στα \mathbf{k} αλλά όχι στις ενέργειες.

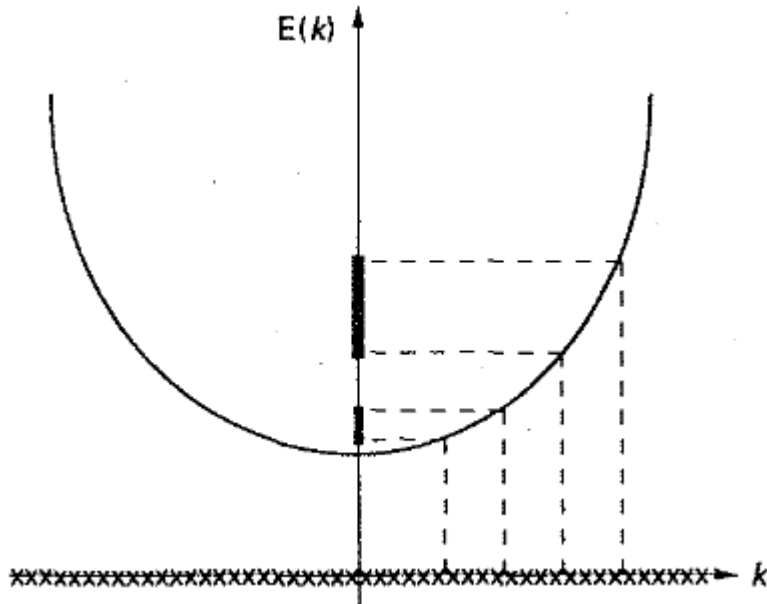
Αν οι επιτρεπτές ενέργειες του συστήματος είναι ε_n τότε η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων δίνεται από τη σχέση (1.46)

$$N(E) = \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \quad 1.46$$

όπου $\delta(x)$ η συνάρτηση Dirac.

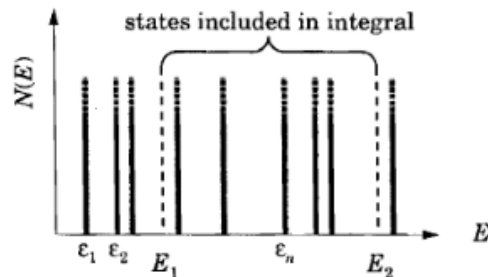
Για να διαπιστώσουμε την ορθότητα της (), θα επαληθεύσουμε ότι το ολοκλήρωμα $\int_{E_1}^{E_2} N(E) dE$ μας δίνει τον αριθμό των καταστάσεων του συστήματος ανάμεσα στις ενέργειες E_1 και E_2 . Έχουμε λοιπόν

$$\int_{E_1}^{E_2} N(E) dE = \int_{E_1}^{E_2} \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) dE = \sum_n \int_{E_1}^{E_2} \delta(E - \varepsilon_n) dE \quad 1.47$$



Σχήμα 1.12 Απεικόνιση της πυκνότητας καταστάσεων στο χώρο των κυματαριθμών και στο χώρο των ενεργειών. Στο χώρο των κυματαριθμών η πυκνότητα καταστάσεων είναι ομοιόμορφη όπως φαίνεται από τον άξονα x . Ένα συγκεκριμένο πλήθος κυματαριθμών, παρόλα αυτά, καταλαμβάνει διαφορετικά εύρη ενεργειών όπως φαίνεται στον κάθετο άξονα. Σε αυτό το παράδειγμα η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων μειώνεται καθώς αυξάνεται η ενέργεια αφού έχουν θεωρηθεί μονοδιάστατα ηλεκτρόνια. [4]

Αν η ενέργεια ε_n βρίσκεται ανάμεσα στις τιμές E_1 και E_2 , τότε το ολοκλήρωμα της συνάρτησης Dirac θα μας δώσει μονάδα, αντιθέτως για τις ενέργειες έξω από αυτό το διάστημα το ολοκλήρωμα δίνει μηδέν. Ακολουθώντας εκτελώντας την άθροιση βλέπουμε ότι κάθε ενεργειακή κατάσταση προστίθεται στις προηγούμενες που βρίσκονται στο διάστημα ανάμεσα σε E_1 και E_2 .



Σχήμα 1.13 Ο ορισμός της πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων μέσω της συνάρτησης Dirac, απεικονίζεται η απαρίθμηση των καταστάσεων στο διάστημα $[E_1, E_2]$ μέσω της ολοκλήρωσης της πυκνότητας καταστάσεων στο ίδιο διάστημα.

Αυτό ακριβώς είναι το αποτέλεσμα που θα περιμέναμε από την ολοκλήρωση μίας συνάρτησης πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων και έτσι επαληθεύεται η ορθότητα της (). Ακολούθως ορίζουμε την πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων ανά μονάδα όγκου του ημιαγωγού ως

$$g_c(E) = \frac{N(E)}{V} = \frac{1}{V} \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \quad 1.48$$

Για να εξάγουμε μία αναλυτική έκφραση της πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων ανά μονάδα όγκου αξιοποιούμε τα αποτελέσματα της παραπάνω ενότητας για τη μετατροπή της άθροισης σε ολοκλήρωση και αντικαθιστούμε τις εκφράσεις για την ενέργεια. Τότε θα έχουμε

$$\begin{aligned} g_c(E) &= \frac{1}{V} N_k \int_{k'} \delta[E - E(k')] dk'^3 = \frac{1}{V} \frac{V}{4\pi^3} \int_{k'} \delta \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} \right] 4\pi k'^2 dk' \\ &= \frac{2m^*}{\pi^2 \hbar^2} \int_{k'} \delta[k^2 - k'^2] k'^2 dk' \end{aligned} \quad 1.49$$

Όπου χρησιμοποίησαμε την ταυτότητα $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{a}$. Επίσης γνωρίζουμε ότι

$$\int \delta(x - x') f(x') dx' = f(x)$$

Στην (1.49) κάνουμε την αλλαγή μεταβλητής $x = k^2$ και παίρνουμε

$$\begin{aligned} g_c(E) &= \frac{2m^*}{\pi^2 \hbar^2} \int_{k'} \delta[k^2 - k'^2] k'^2 dk' = \frac{2m^*}{\pi^2 \hbar^2} \int_{x'} \delta(x - x') \frac{\sqrt{x'}}{2} dx' = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{x} = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2} k \\ &= \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{2m^*(E - E_{c0})}{\hbar^2}} = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m^*(E - E_{c0})} \end{aligned} \quad 1.50$$

Όπου αντικαταστήσαμε το k σύμφωνα με τη σχέση

$$E = E_{c0} + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_{c0} + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_i^2$$

1.8 Στατιστική κατανομή των ηλεκτρονίων

Κάθε ημιαγωγός είναι ένα πολυηλεκτρονιακό σύστημα. Ενδιαφερόμαστε για την πιθανότητα κατάληψης των δυνατών ενεργειακών σταθμών των ηλεκτρονίων ώστε να εξάγουμε συμπεράσματα για την κατανομή και άλλων μακροσκοπικών στατιστικών ποσοτήτων.

Τα ηλεκτρόνια με αριθμό σπιν $s = \frac{1}{2}$ ανήκουν στην οικογένεια των φερμιονίων (ημιακέραιο σπιν) και σύμφωνα με την αρχή του Pauli μπορούν να βρεθούν σε κατάσταση με την ίδια ενέργεια E μόνο εάν έχουν διαφορετικό σπιν. Η στατιστική κατανομή Fermi-Dirac δίνεται από την παρακάτω σχέση:

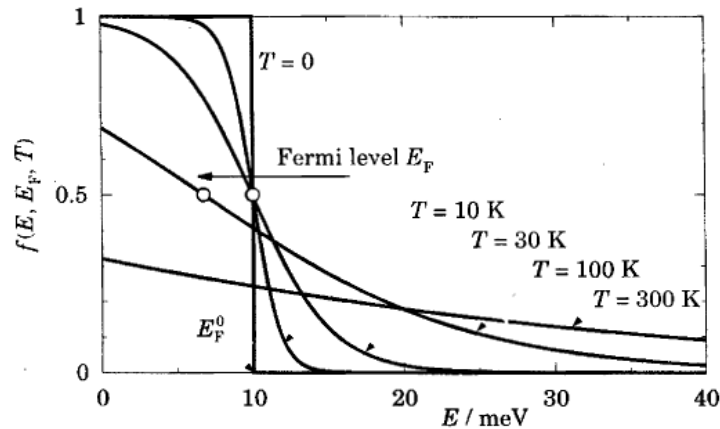
$$\mathcal{F}_{\mathcal{F}}(E_{l,s}) = \frac{1}{1 + e^{(E_{l,s} - E_F)/(k_B T)}} \quad 1.51$$

Όπου T η θερμοκρασία του κρυσταλλικού πλέγματος. Όταν $(E_{l,s} - E_F) > 3 \times (k_B T)$, τότε $e^{(E_{l,s} - E_F)/(k_B T)} \gg 1$ και η κατανομή Fermi τείνει στην κατανομή Boltzmann

$$\mathcal{F}_{\mathcal{F}}(E) \approx e^{-\frac{E_F - E}{k_B T}} \quad 1.52$$

Στο όριο $T \rightarrow 0$, η συνάρτηση Fermi τείνει στη βηματική συνάρτηση

$$\mathcal{F}_{\mathcal{F}}(E) = \theta(E_F - E)$$



Σχήμα 1.14 Η στατιστική κατανομή Fermi-Dirac για διαφορετικές θερμοκρασίες.

1.9 Πυκνότητα ηλεκτρονίων σε τρισδιάστατο ημιαγωγό

Στις δύο παραπάνω ενότητες αποκτήσαμε εκφράσεις για την πυκνότητα καταστάσεων ανά ενέργεια και ανά όγκο (1.50) καθώς επίσης και για την πιθανότητα κατάληψης μίας ενεργειακής στάθμης (1.51). Το γινόμενο τους ισούται με τον αριθμό των ηλεκτρονίων ανά ενέργεια και ανά όγκο, ενώ το συνολικό πλήθος ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου δίνεται με ολοκλήρωση σε όλο το φάσμα των ενεργειών.

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E) f(E, E_f) dE \quad 1.53$$

Αντικαθιστώντας με τις εκφράσεις των παραπάνω ενότητων η (1.53) γράφεται

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_C}{k_B T} \right) \quad 1.54$$

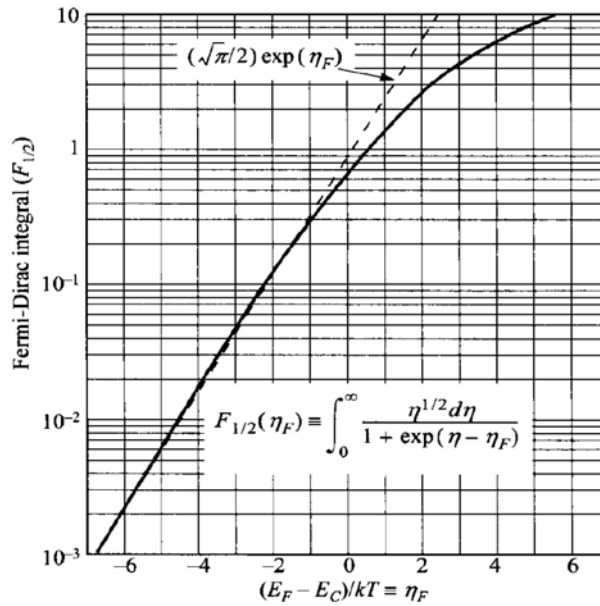
Όπου N_c η ενεργός πυκνότητα ηλεκτρονίων

$$N_c = 2 \left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad 1.55$$

Το ολοκλήρωμα Fermi-Dirac θέτοντας τις μεταβλητές $\eta \equiv (E - E_C)/k_B T$ και $\eta_F = (E_F - E_C)/k_B T$ ορίζεται από την έκφραση

$$F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_C}{k_B T} \right) \equiv F_{1/2}(\eta_F) = \int_{E_C}^{\infty} \frac{[(E - E_C)/k_B T]^{1/2} dE}{1 + \exp[E - E_F/k_B T]} \frac{1}{k_B T} = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{1/2}}{1 + \exp(\eta - \eta_F)} d\eta \quad 1.56$$

Στο σχήμα 1.15 βλέπουμε τη γραφική παράσταση της $F_{1/2}(\eta_F)$.



Σχήμα 1.15 Γραφική αναπαράσταση της $F_{1/2}(\eta_F)$. [8]

Για $\eta_F < -1$ παρατηρούμε ότι το ολοκλήρωμα προσεγγίζεται από μία εκθετική συνάρτηση. Στο σημείο $\eta_F = 0$, όταν δηλαδή η στάθμη Fermi συμπίπτει με τη ζώνη αγωγιμότητας το ολοκλήρωμα ισούται με ≈ 0.6 και αντίστοιχα η πυκνότητα φορτίου $\approx 0.7N_c$.

Οι μη εκφυλισμένοι ημιαγωγοί είναι εξ ορισμού αυτοί στους οποίους η νόθευση είναι μικρότερη από N_c και η στάθμη Fermi βρίσκεται αρκετά $k_B T$ χαμηλότερα από τη ζώνη αγωγιμότητας, δηλαδή $\eta_F < -1$. Τότε ισχύει η στατιστική κατανομή Boltzmann και το ολοκλήρωμα Fermi-Dirac προσεγγίζεται από την

$$F_{1/2}(\eta_F) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp(\eta_F) \quad 1.57$$

Ενώ η εξίσωση (1.54) για την πυκνότητα των ηλεκτρονίων γίνεται

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_B T}\right) \quad 1.58$$

Ή ισοδύναμα

$$E_F - E_c = (k_B T) \ln(n/N_c) \quad 1.59$$

Αντίστοιχα για τις οπές θα έχουμε

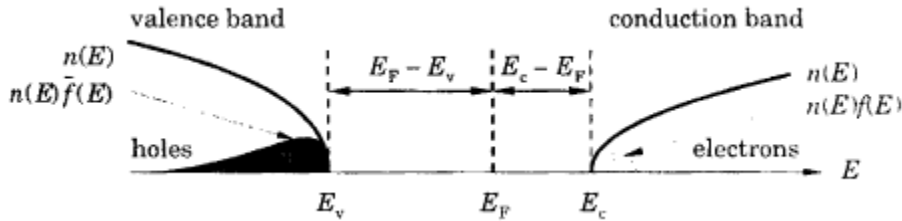
$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \quad 1.60$$

Ή

$$E_v - E_F = (k_B T) \ln(p/N_v) \quad 1.61$$

Όπου N_v η ενεργός πυκνότητα οπών

$$N_v = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad 1.62$$



Σχήμα 1.16 Ζώνη σθένους και ζώνη αγωγιμότητας για ελαφρά νοθευμένο ημιαγωγό. Απεικονίζονται το επίπεδο Fermi και η πυκνότητα ηλεκτρονίων και οπών. [7]

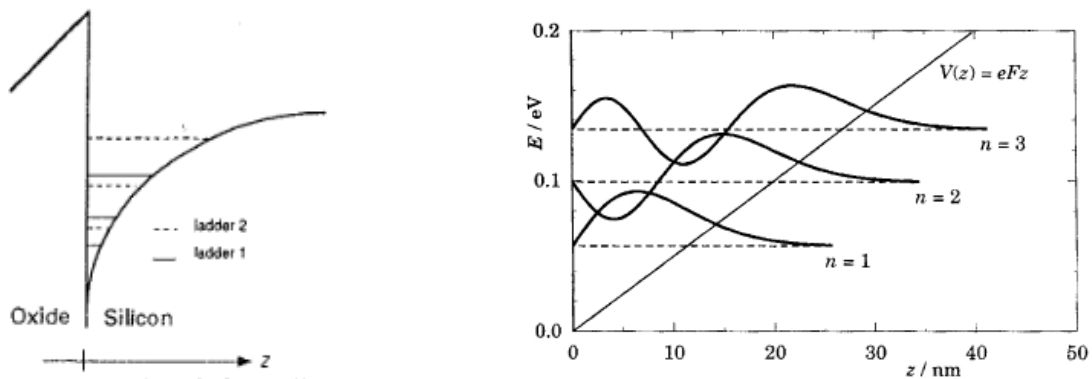
Για τους εκφυλισμένους ημιαγωγούς ισχύει η παρακάτω προσέγγιση [8]

$$E_F - E_c \approx (k_B T) \left[\ln\left(\frac{n}{N_c}\right) + 2^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{n}{N_c}\right) \right] \quad 1.63$$

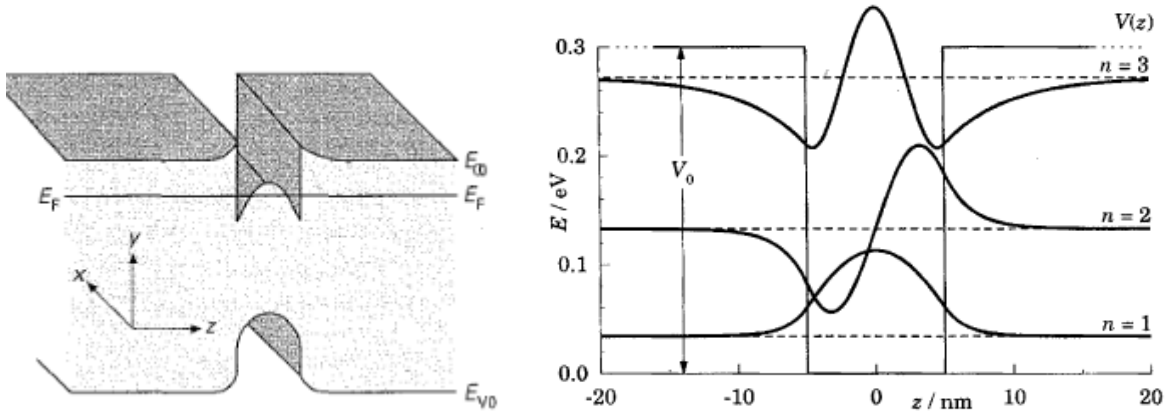
$$E_v - E_F \approx (k_B T) \left[\ln\left(\frac{p}{N_v}\right) + 2^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{p}{N_v}\right) \right] \quad 1.64$$

1.10 Χαμηλοδιάστατα φυσικά συστήματα (low dimensional systems)

Πρόκειται για συστήματα και διατάξεις στις οποίες η κίνηση των ηλεκτρονίων περιορίζεται στις 2 στη 1 ή και σε 0 διαστάσεις του πραγματικού χώρου. Αποκαλούνται επίσης κβαντικά πηγάδια (quantum wells), κβαντικά καλώδια (quantum wires), κβαντικές τελείες (quantum dots) στις περιπτώσεις όπου τα ηλεκτρόνια εγκλωβίζονται σε μία δύο ή τρεις διατάξεις αντίστοιχα. Αυτός ο εγκλωβισμός των ηλεκτρονίων μπορεί να προέρχεται είτε λόγω περιορισμού των φυσικών διαστάσεων ενός υλικού π.χ. πολύ λεπτά φύλλα ή καλώδια ημιαγωγίου υλικού, είτε να επιτυγχάνεται ηλεκτροστατικά όπως στην περίπτωση της περιοχής αντιστροφής στο MOSFET όπου το εφαρμοζόμενο από την πύλη ηλεκτρικό πεδίο δημιουργεί μία απότομη κλίση στις ενεργειακές ζώνες του ημιαγωγού κοντά στη διεπιφάνεια με το οξείδιο. Οι παραπάνω περιπτώσεις εγκλωβισμού των ηλεκτρονίων απεικονίζονται στα Σχ. 1.17, 1.18.



Σχήμα 1.17 Διεπιφάνεια Si-SiO₂. Τα ηλεκτρόνια είναι εγκλωβισμένα στη διάσταση z . Το δυναμικό στη διεύθυνση z μπορεί να προσεγγιστεί από ένα τριγωνικό πηγάδι δυναμικού, το οποίο έχει γνωστές λύσεις για τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας (Airy functions). Οι λύσεις που απεικονίζονται στο τριγωνικό πηγάδι αφορούν GaAs και ηλεκτρικό πεδίο 5 kV/mm. [7]



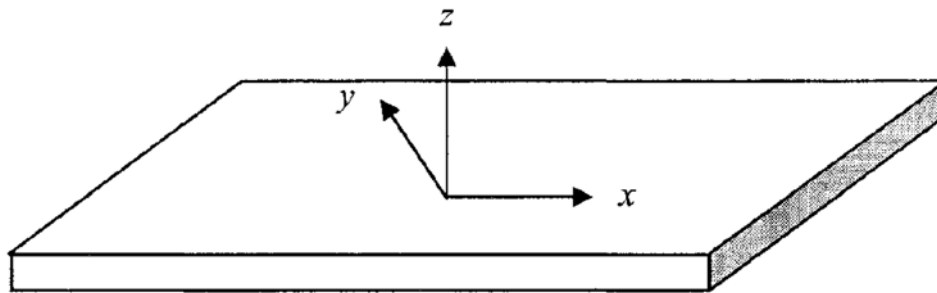
Σχήμα 1.18 Πηγάδι δυναμικού για GaAs μήκους 10nm, απεικονίζονται τρεις δέσμιες καταστάσεις. Το πηγάδι δυναμικού δημιουργείται λόγω της ασυνέχειας στη ζώνη αγωγιμότητας που παρουσιάζεται στις διεπιφάνειες διαφορετικών ημιαγώγιμων υλικών.

Κβαντικό πηγάδι (quantum well)

Για να προχωρήσουμε στη μαθηματική ανάλυση του προβλήματος του κβαντικού πηγαδιού θεωρούμε ένα λεπτό φύλλο ημιαγώγιμου υλικού όπως φαίνεται στο σχήμα 1.19. Τα ηλεκτρόνια είναι παγιδευμένα στη διεύθυνση z ενώ μπορούν να κινούνται ελεύθερα στις διευθύνσεις x,y. Οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων σε αυτή την περίπτωση μπορούν να βρεθούν από τη λύση της εξίσωσης Schrodinger με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Η Χαμιλτονιανή θα είναι $H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z)$ και οι λύσεις θα είναι της μορφής

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(z)\Psi(x, y) = \Phi(z) \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} e^{i(k_x x + k_y y)} = \Phi(z) \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \rho}, \quad k_i = n_i \frac{2\pi}{L_i}, \quad 1.65$$

$$i = x, y \text{ και } n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



Σχήμα 1.19 Λεπτό φύλλο ημιαγώγιμου υλικού, τα ηλεκτρόνια εγκλωβίζονται στη διάσταση z.

Όπου A εμβαδόν κανονικοποίησης και \mathbf{p} διάνυσμα στο επίπεδο x - y . Οι ιδιοτιμές της ενέργειας τώρα θα δίνονται από τη σχέση

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m^*}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 1.66$$

Όπου $\mathbf{k}_{\parallel} = \mathbf{k}_x + \mathbf{k}_y$, η κατεύθυνση της κίνησης και ε_n οι ιδιοτιμές του προβλήματος στη διεύθυνση του εγκλωβισμού

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Phi_n(z)}{\partial z^2} + V(z)\Phi_n(z) = \varepsilon_n \Phi_n(z) \quad 1.67$$

Στην ειδική περίπτωση όπου $V(z)$ είναι σταθερό κατά τη διεύθυνση z της διάταξης, θα έχουμε τη γνωστή λύση

$$\Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{L_z}} e^{ik_z z}, \quad k_z = n_z \frac{2\pi}{L_z}, \quad n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad 1.68$$

Οι συνοριακές συνθήκες τώρα θα διαφέρουν. Αν προσεγγίσουμε το πηγάδι με το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού τότε στα άκρα του πηγαδιού η κυματοσυνάρτηση θα μηδενίζεται και οι λύσεις θα είναι στάσιμα κύματα.

Από την (1.68) γίνεται φανερό ότι για μικρό μήκος L_z το πλέγμα των επιτρεπτών καταστάσεων στο χώρο των κυματαριθμών αραιώνει στη διεύθυνση k_z , όπως επίσης αραιώνουν και οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις στο χώρο των ενεργειών.

Όσον αφορά τη γενικότερη περίπτωση που το δυναμικό $V(z)$ μεταβάλλεται στη διεύθυνση z , για το τριγωνικό «πηγάδι» δυναμικού απεικονίζονται στο Σχ. 1.17 οι επιτρεπτές ιδιοκαταστάσεις και ιδιοενέργειες μέσα στην περιοχή του πηγαδιού, ενώ για ένα πηγάδι δυναμικού πεπερασμένου βάθους απεικονίζονται τα ίδια στοιχεία στο Σχ. 1.18.

Σε κάθε περίπτωση ο περιορισμός στη μία διάσταση καθιστά πιο «έντονη» την κβάντωση των ενεργειακών καταστάσεων στην αντίστοιχη διεύθυνση και η ενέργεια του ηλεκτρονίου δίνεται από τη σχέση διασποράς (1.66).

Ομοίως με την ανάλυση που κάναμε στην προηγούμενη ενότητα εξετάζουμε την πυκνότητα των επιτρεπτών καταστάσεων στο επίπεδο $k_x - k_y$ του χώρου των κυματαριθμών. Το εμβαδό της βασικής κυψελίδας στο επίπεδο $k_x - k_y$ θα είναι σε αυτήν την περίπτωση $\Omega_0 = (\Delta k_x)(\Delta k_y) = \frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y}$.

Όταν λοιπόν εξετάζουμε δισδιάστατα προβλήματα και θέλουμε να υπολογίσουμε αθροίσματα της μορφής

$$\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) = \sum_{k_z} \sum_{k_x, k_y} g(\mathbf{k}) \quad 1.69$$

Το εσωτερικό άθροισμα της (1.69) μπορεί να αντικατασταθεί με ολοκλήρωση

$$\sum_{k_z} \sum_{k_x, k_y} g(\mathbf{k}) = N_k^{2D} \sum_{k_z} \iint g(\mathbf{k}) dk_x dk_y \quad 1.70$$

Η πυκνότητα καταστάσεων στο χώρο της ενέργειας δίνεται ως γνωστόν από τη σχέση (1.48). Για να απλοποιήσουμε τον υπολογισμό της μελετάμε αρχικά την πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων σε μία υποζώνη. Θα έχουμε λοιπόν

$$g_c(E) = \frac{N(E)}{S} = \sum_i \delta(E - E_i) \quad 1.71$$

Όπου E_i όλες οι δυνατές διδιάστατες ενέργειες του συστήματός μας πάνω από το ελάχιστο μιας δοσμένης υποζώνης ε_n , δηλαδή $E_i = E - E_{c0} - \varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m^*}$. Άρα

$$g_{2D}^{sub}(E) = \sum_{k_{\parallel}} \delta\left(E - \varepsilon_n - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m^*}\right) = N_k^{2D} \int \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}'^2}{2m^*}\right) 2k_{\parallel}' dk_{\parallel}' \quad 1.72$$

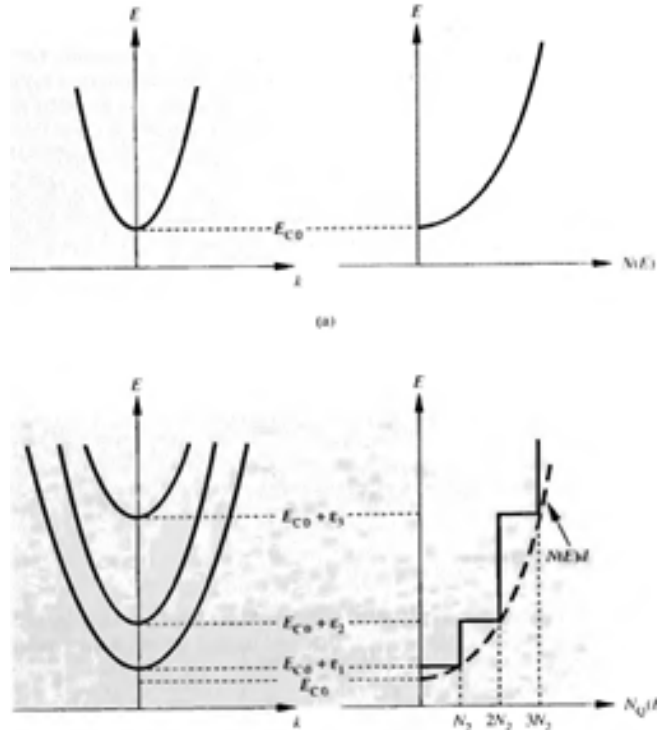
Κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $x = \mathbf{k}_{\parallel}^2$ προκύπτει ότι η πυκνότητα ηλεκτρονίων ανά μονάδα επιφάνειας για μία ενεργειακή υποζώνη είναι

$$g_{2D}^{sub} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad 1.73$$

Για κάθε υποζώνη που έχει τιμή μικρότερη από την ενέργεια E που μας ενδιαφέρει θα προστίθεται στην πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων ένας σταθερός όρος (1.73). Άρα θα έχουμε

$$g_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_n \theta(E - \varepsilon_n) \quad 1.74$$

Όπου $\theta(E - \varepsilon_n)$ η βηματική συνάρτηση. Στο Σχ. 1.20 φαίνεται η γραφική παράσταση της πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων ως προς την ενέργεια καθώς και η σύγκρισή της με την περίπτωση που δεν υπάρχει στο πρόβλημά μας κβαντικός περιορισμός.



Σχήμα 1.20 Οι ενεργειακές ζώνες για το δισδιάστατο και το τρισδιάστατο πρόβλημα και οι αντίστοιχες πυκνότητες ενεργειακών καταστάσεων..

Η πυκνότητα των ηλεκτρονίων σε μία υποζώνη θα είναι

$$\begin{aligned}
 n_j &= \int_{\varepsilon_j}^{\infty} g_{2D}^{sub} f(E, E_F) dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{\varepsilon_j}^{\infty} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{\varepsilon_j}^{\infty} \frac{\exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right)} dE \quad 1.75 \\
 &= \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{E_F - \varepsilon_j}{k_B T}\right)\right]
 \end{aligned}$$

Ενώ η συνολική πυκνότητα ηλεκτρονίων θα είναι

$$n_{2D} = \sum_j n_j = \sum_j \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln\left[1 + \exp\left(\frac{E_F - \varepsilon_j}{k_B T}\right)\right] \quad 1.76$$

Στο όριο των πολύ χαμηλών θερμοκρασιών ο λογαριθμικός όρος απλοποιείται σημαντικά λόγω της βηματικής μορφής της κατανομής Fermi στις αντίστοιχες θερμοκρασίες και τελικά παίρνουμε

$$n_{2D} = \sum_j n_j = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_j (E_F - \varepsilon_j) \theta(E_F - \varepsilon_j) \quad 1.77$$

Για να λάβουμε υπόψη τη χωρική εξάρτηση της πυκνότητας των ηλεκτρονίων πολλαπλασιάζουμε την (1.75) με την πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη θέση z του πηγαδιού. Έτσι θα έχουμε

$$n_j(z) = |\Phi_j(z)|^2 \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - \varepsilon_j}{k_B T} \right) \right] \quad 1.78$$

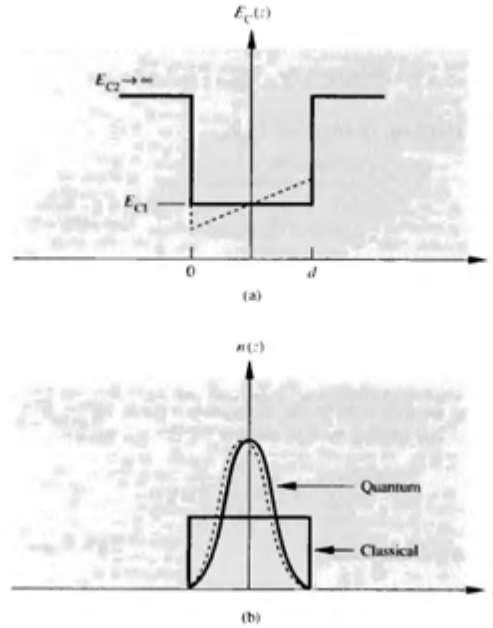
Όπου η $\Phi_j(z)$ ορίζεται μέσω της (1.79)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \Phi_j(z) = \varepsilon_j \Phi_j(z) \quad 1.79$$

Αντίστοιχα για την συνολική πυκνότητα ηλεκτρονίων η (1.76) γίνεται

$$n_{2D}(z) = \sum_j |\Phi_j(z)|^2 \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - \varepsilon_j}{k_B T} \right) \right] \quad 1.80$$

Στο Σχ. 1.21 φαίνεται η μορφή της πυκνότητας ηλεκτρονίων μέσα σε ένα κβαντικό πηγάδι. Αξίζει να σχολιάσουμε ότι στο πρόβλημα των ηλεκτρονίων με 3 βαθμούς ελευθερίας δε συζητήσαμε τη χωρική εξάρτηση του φορτίου καθώς για λύσεις της μορφής των οδεύοντων κυμάτων ο όρος $|\Psi|^2$ είναι σταθερός αφού τα εκθετικά αναιρούνται. Για το πρόβλημα του περιορισμού των ηλεκτρονίων στη μία διάσταση οι κυματοσυναρτήσεις για τα διάφορα πηγάδια δυναμικού θα δώσουν πιθανότητα $|\Psi|^2$ εξαρτώμενη από τη θέση z και επομένως χωρικά μεταβαλλόμενη πυκνότητα ηλεκτρονίων όπως γίνεται φανερό και παρακάτω.



Σχήμα 1.21 Πυκνότητα ηλεκτρονίων σε κβαντικό πηγάδι. (α) Προφίλ της ζώνης αγωγιμότητας (β) πυκνότητα ηλεκτρονίων κλασσικά και κβαντικά υπολογισμένη $n(z)$, υποθέτοντας απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού πλάτους 10 nm [3]

Κβαντικό καλώδιο (quantum wire)

Αν τώρα θεωρήσουμε ένα λεπτό καλώδιο ημιαγωγού όπως στο Σχ. 1.22 τότε τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα να κινούνται στη διεύθυνση του x , ενώ είναι παγιδευμένα στις διευθύνσεις y, z . Λύνοντας ξανά την εξίσωση Schrödinger με τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών θα έχουμε

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(y, z)\Psi(x) = \Phi(y, z) \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \quad 1.81$$

Ενώ οι ιδιοτιμές της ενέργειας μετρώντας από το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας θα είναι

$$E = \varepsilon_{i,j} + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 \quad 1.82$$

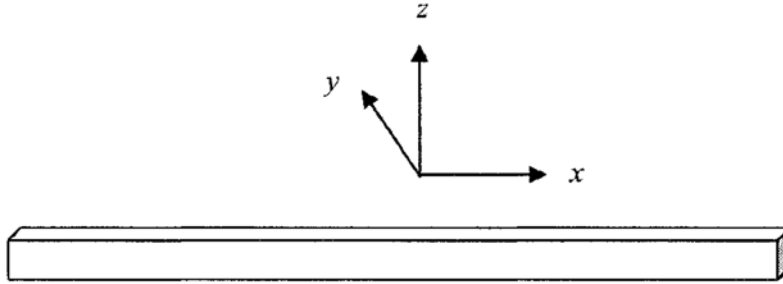
Όπου $\varepsilon_{i,j} = \varepsilon_i + \varepsilon_j$, με $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ να δίνεται από τη λύση της εξίσωσης ενεργούς μάζας στη μία διάσταση

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Phi_i(y) + V(y)\Phi_i(y) = \varepsilon_i \Phi_i(y) \quad 1.83a$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Phi_j(z) + V(z)\Phi_j(z) = \varepsilon_j \Phi_j(z) \quad 1.84b$$

Επίσης ορίζουμε

$$\Phi_{i,j}(y, z) = \Phi_i(y)\Phi_j(z) \quad 1.85$$



Σχήμα 1.22 Κβαντικό καλώδιο (quantum wire). Τα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα να κινούνται μόνο στη μία διεύθυνση.

Έστω Ω_0 το μήκος της βασικής κυψελίδας του μονοδιάστατου χώρου \mathbf{k} , τότε $\Omega_0 = \Delta k_x = \frac{2\pi}{L}$. Η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων για δοσμένη $\varepsilon_{i,j}$ θα είναι

$$\begin{aligned} g_{1D}^{sub}(E) &= \frac{N(E)}{L_x} = \sum_i \delta(E - E_i) = \sum_{k_x} \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}k_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*}k_x'^2\right) \\ &= N_k^{1D} \int \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}k_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*}k_x'^2\right) dk_x \end{aligned} \quad 1.86$$

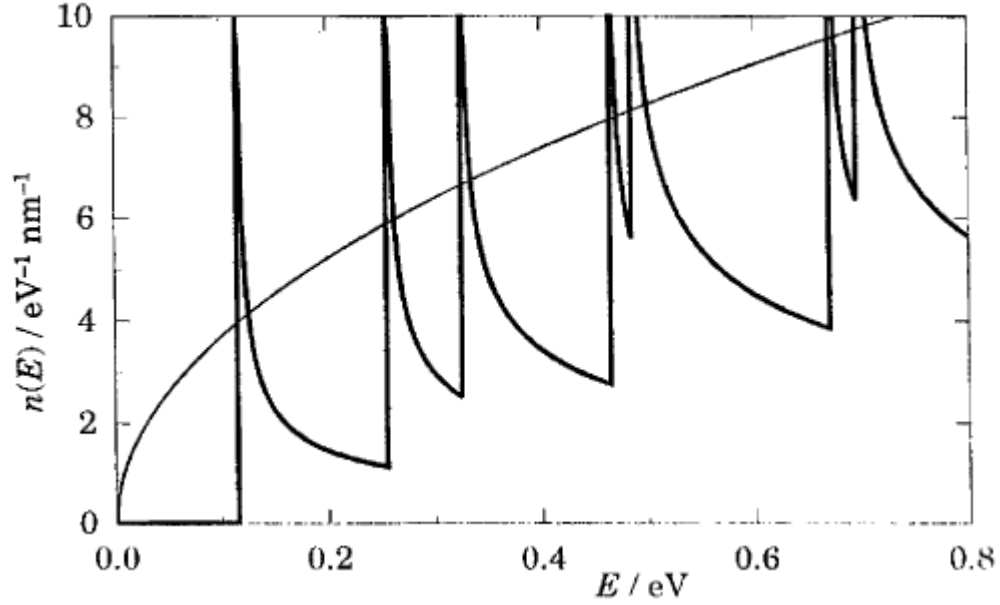
Κάνοντας αλλαγή μεταβλητής κατά τον ίδιο τρόπο όπως παραπάνω παίρνουμε τελικά

$$g_{1D}^{sub}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{E - \varepsilon_{i,j}}} \quad 1.87$$

Τελικά για την πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων παίρνουμε

$$g_{1D}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} (E - \varepsilon_{i,j})^{-1/2} \quad 1.88$$

Στο Σχ. 1.23 απεικονίζεται η μορφή της πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων ως προς την ενέργεια E σε σύγκριση με την τρισδιάστατη πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων.



Σχήμα 1.23 Πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων για ένα κβαντικό καλώδιο. Η καμπύλη έχει υπολογιστεί για ένα 9×11 nm κβαντικό απειρόβαθο πηγάδι για το GaAs. Η λεπτή γραμμή απεικονίζει την τρισδιάστατη πυκνότητα καταστάσεων

Η πυκνότητα των ηλεκτρονίων υπολογίζεται ομοίως με το πρόβλημα των δύο και των τριών διαστάσεων και δίνεται από τη σχέση (1.49).

$$\begin{aligned}
 n_{1D}(E) &= \int g_{1D}(E) f(E, E_F) dE = \int \left[\frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} (E - \varepsilon_{i,j})^{-1/2} \right] f(E, E_F) dE \\
 &= \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} \int_{\varepsilon_{i,j}}^{\infty} (E - \varepsilon_{i,j})^{-1/2} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} dE \\
 &= \frac{\sqrt{2m^* k_B T}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} F_{-1/2}\left(\frac{E_F - \varepsilon_{i,j}}{k_B T}\right)
 \end{aligned} \tag{1.89}$$

Ομοίως με την (1.56) η συνάρτηση $F_{-1/2}(\eta_F)$ ορίζεται ως

$$F_{-1/2}(\eta_F) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{-1/2}}{1 + \exp(\eta - \eta_F)} d\eta \tag{1.90}$$

Εισάγοντας την εξάρτηση της πυκνότητας ηλεκτρονίων ως προς τη θέση (y,z) παίρνουμε τελικά για τη μονοδιάστατη πυκνότητα ηλεκτρονίων

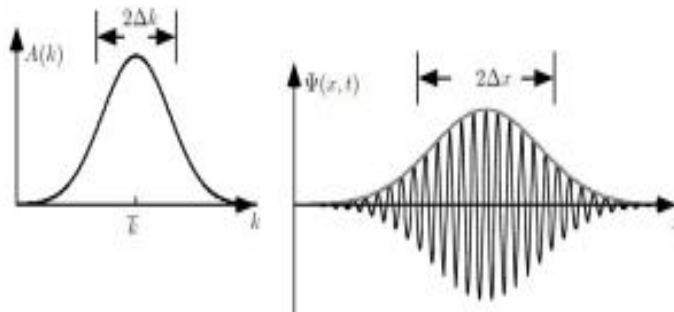
$$n_{1D}(E, y, z) = \frac{\sqrt{2m^* k_B T}}{\pi\hbar} \sum_{i,j} |\Phi_{i,j}(y, z)|^2 F_{-1/2}\left(\frac{E_F - \varepsilon_{i,j}}{k_B T}\right) \tag{1.91}$$

2 Φαινόμενα μεταφοράς φορέων στους ημιαγωγούς

Στην κβαντομηχανική ανάλυση της συμπεριφοράς των ηλεκτρονίων δεν μπορούμε να γνωρίζουμε κανένα μέγεθος με απόλυτη βεβαιότητα. Οι ιδιοσυναρτήσεις των τελεστών των φυσικών μεγεθών δεν μπορούν να χρησιμεύσουν για να περιγράψουν την κατάσταση του συστήματός μας παρά μόνο ως ένας γραμμικός συνδυασμός αυτών. Στην ημικλασική θεωρία της μεταφοράς φορέων το ηλεκτρόνιο-κυματοπακέτο αντιμετωπίζεται ως σωματίδιο. Θεωρούμε ότι η αβεβαιότητα στην ορμή είναι μικρή ώστε το ηλεκτρόνιο να είναι αρκετά εντοπισμένο στο χώρο των ενεργειών και υποθέτουμε ότι η αβεβαιότητα στη θέση του ηλεκτρονίου είναι μικρή σε σχέση με την απόσταση που τα εξωτερικά ή εσωτερικά δυναμικά μεταβάλλονται σημαντικά. Ένα τέτοιο κυματοπακέτο θα δίνεται από τη σχέση (2.1) ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοσυναρτήσεων της ορμής και απεικονίζεται στο χώρο των ορμών και των θέσεων στο Σχ. 2.1.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\mathbf{r}} e^{-\frac{iE(\mathbf{k})t}{\hbar}} \quad 2.1$$

Τα πλάτη των κυματοσυναρτήσεων $C(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ και οι κυματαριθμοί \mathbf{k} επιλέγονται κατάλληλα ώστε με ενισχυτική συμβολή σε μία περιορισμένη περιοχή του χώρου και με καταστροφική συμβολή όσο απομακρυνόμαστε από τη συγκεκριμένη περιοχή η κυματοσυνάρτηση Ψ να είναι περιορισμένη στο σημείο που μας ενδιαφέρει, με τις επιθυμητές αβεβαιότητες.



Σχήμα 2.1 Το κυματοπακέτο στο χώρο των ορμών και των θέσεων.

2.1 Ταχύτητα και δυναμική των κυματοπακέτων

Η ταχύτητα ενός ηλεκτρονίου ενέργειας $E(\mathbf{k}_0)$ (κυματοπακέτο εντοπισμένο στο χώρο των ορμών γύρω από το \mathbf{k}_0) δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}_0) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}_0} \quad 2.2$$

Για να αποδείξουμε την ορθότητα της (2.2) θα δείξουμε ότι με το χρόνο η πυκνότητα πιθανότητας μετατοπίζεται χωρικά κατά $\mathbf{v}t$, που σημαίνει ότι το κυματοπακέτο-ηλεκτρόνιο κινείται με ταχύτητα \mathbf{v} . Υποθέτουμε ότι οι συντελεστές $C(\mathbf{k})$ είναι μη μηδενικοί μόνο σε μια περιοχή γύρω από το $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Μπορούμε να αναπτύξουμε την $E(\mathbf{k})$ σε σειρά Taylor γύρω από το \mathbf{k}_0 κρατώντας τους όρους μέχρι την πρώτη παράγωγο.

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_0) + \left. \frac{\partial E}{\partial k_x} \right|_{k_{0x}} (k_x - k_{0x}) + \left. \frac{\partial E}{\partial k_y} \right|_{k_{0y}} (k_y - k_{0y}) + \left. \frac{\partial E}{\partial k_z} \right|_{k_{0z}} (k_z - k_{0z}) \quad 2.3$$

$$= E(\mathbf{k}_0) + \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$$

Αντικαθιστώντας στην (2.2) παίρνουμε

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-\frac{iE(\mathbf{k}_0)t}{\hbar}} e^{-i\mathbf{v}\mathbf{k}t} e^{i\mathbf{v}\mathbf{k}_0 t} = e^{-\frac{iE(\mathbf{k}_0)t}{\hbar}} e^{i\mathbf{v}\mathbf{k}_0 t} \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{v}\mathbf{k}t} \quad 2.4$$

$$= e^{-\frac{iE(\mathbf{k}_0)t}{\hbar}} e^{i\mathbf{v}\mathbf{k}_0 t} \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, 0)$$

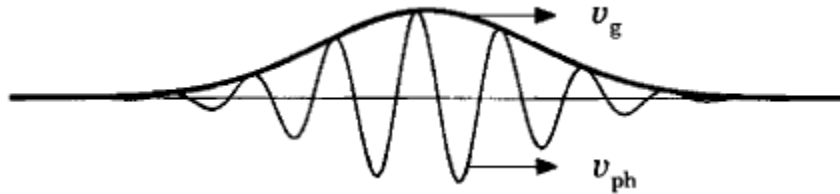
Άρα

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, 0)|^2 \quad 2.5$$

Αξίζει να σημειώσουμε ότι στο ανάπτυγμα Taylor της (2.3), αγνοήσαμε τους όρους 2^{ης} τάξης. Οι όροι αυτοί δημιουργούν spreading του κυματοπακέτου στο χώρο των ορμών ([9], κεφάλαιο 3.5), ωστόσο για τις αποστάσεις και τις ταχύτητες των ηλεκτρονίων στην ανάλυση των διατάξεων μπορούμε με καλή ακρίβεια να θεωρήσουμε ότι το κυματοπακέτο παραμένει άθικτο στο χώρο των ορμών. Για παραβολικές ενεργειακές ζώνες η (2.2) γίνεται

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}_c) = \frac{\hbar \mathbf{k}_c}{m^*} \quad 2.6$$

Στο Σχ. 2.2 απεικονίζεται ένα κυματοπακέτο του οποίου η περιβάλλουσα κινείται με την ταχύτητα της (2.6), ταχύτητα ομάδας του κυματοπακέτου, ενώ οι κυματικές συνιστώσες του πακέτου κινούνται η κάθε μία με τη δική της ταχύτητα φάσης $\frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*}$.



Σχήμα 2.2 Κυματοπακέτο όπου απεικονίζεται η περιβάλλουσα του κυματοπακέτου να κινείται με ταχύτητα v_g ενώ οι συνιστώσες του πακέτου κινούνται με τη φασική τους ταχύτητα v_{ph} .

Ας εξετάσουμε τώρα τη συμπεριφορά των ηλεκτρονίων του ημιαγωγού μέσα σε ένα εξωτερικό πεδίο. Έστω $F_{εξ}$ ασθενές ηλεκτρικό πεδίο που εφαρμόζεται εξωτερικά σε έναν ημιαγωγό. Χωρίς βλάβη της γενικότητας για την ανάλυσή μας μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο ημιαγωγός μας είναι τύπου n . Επίσης θεωρούμε ότι δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων. Τώρα αν ορίσουμε Φ το δυναμικό που σχετίζεται με το εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο η εξίσωση Schrödinger του προβλήματος γίνεται

$$(H_0 - e\Phi)\Psi_0(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad 2.7$$

Στην περίπτωση που το δυναμικό Φ είναι μικρό και δεν μεταβάλλεται γρήγορα στο χώρο η παραπάνω εξίσωση μπορεί να λυθεί με την προσέγγιση της εξίσωσης ενεργούς μάζας. Η χρονοανεξάρτητη μονοδιάστατη εξίσωση ενεργούς μάζας θα είναι τώρα

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2 \Psi - qV(z)\Psi = (E - E_{C0})\Psi \quad 2.8$$

Ή ισοδύναμα

$$-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2 \Psi = (E - E_{C0})\Psi + qV(z)\Psi = \{E - [E_{C0} - qV(z)]\}\Psi = [E - E_{C0}(z)]\Psi \quad 2.9$$

Όπου θεωρήσαμε $E_{C0}(z) = E_{C0} - qV(z)$. Γίνεται φανερό από την (2.9) ότι

$$\frac{dE_{C0}(z)}{dz} = -q \frac{dV(z)}{dz} = qF_{εξ} \quad 2.10$$

Είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι η κβαντομηχανική προβλέπει ότι αν οι αλλαγές του δυναμικού είναι απότομες τότε θα έχουμε σκεδάσεις στα αντίστοιχα σημεία, φαινόμενο το οποίο αδυνατεί να εξηγήσει η κλασική θεωρία. Αν όμως θεωρήσουμε ότι το δυναμικό μεταβάλλεται αργά τότε και η ορμή του σωματιδίου θα υπόκειται σε αργές και σταδιακές μεταβολές.

Η ενέργεια $E_c(z)$ είναι σταθερή ως προς τους άξονες x-y, επομένως υποθέτουμε λύσεις της μορφής

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \psi(z) \quad 2.11$$

Αντικαθιστώντας στην (2.9) παίρνουμε

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + k_z^2(z)\psi = 0 \quad 2.12$$

Όπου

$$k_z^2(z) = \frac{2m^*}{\hbar^2} \left[E - E_c(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \right] \quad 2.13$$

Παρακάτω θα προσπαθήσουμε να βρούμε μία προσεγγιστική αναλυτική έκφραση για την $\psi(z)$ με την υπόθεση ότι το δυναμικό $E_c(z)$ μεταβάλλεται αρκετά αργά. Η προσέγγιση στην οποία θα καταλήξουμε είναι αρκετά γνωστή και μελετημένη και ονομάζεται προσέγγιση WKB. Γράφουμε λοιπόν την $\psi(z)$ στη γενική μορφή

$$\psi(z) = A(z) \exp[i\varphi(z)] \quad 2.14$$

Και την εισάγουμε στην (2.12). Τότε

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + k_z^2(z)\psi = \exp[i\varphi(z)] \cdot \left[\frac{d^2 A}{dz^2} + i \frac{d^2 \varphi}{dz^2} A + 2i \frac{d\varphi}{dz} \frac{dA}{dz} - \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 A + k_z^2 A \right] = 0 \quad 2.15$$

Μηδενίζοντας φανταστικό και πραγματικό μέρος της (2.15) παίρνουμε

$$\frac{d^2 A}{dz^2} - A \left[\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 - k_z^2 \right] = 0 \quad 2.16a$$

$$A \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + 2 \frac{d\varphi}{dz} \frac{dA}{dz} = 0 \quad 2.17b$$

Όταν το A μεταβάλλεται αργά, μπορούμε να αγνοήσουμε τον όρο $\frac{d^2 A}{dz^2}$ από την (2.16a) και παίρνουμε

$$\frac{d\varphi}{dz} = k_z \quad 2.18$$

Ή ισοδύναμα

$$\varphi(z) = \int_0^z k_z(z') dz' \quad 2.19$$

Επίσης αντικαθιστώντας στην (2.16b) παίρνουμε

$$A \frac{dk_z}{dz} + 2k_z \frac{dA}{dz} = 0 \quad 2.20$$

Ισοδύναμα

$$\frac{d}{dz} \ln A(z) = \frac{d}{dz} \ln \frac{1}{\sqrt{k_z(z)}}$$

Τελικά

$$A(z) = A(0) \sqrt{k_z(0)/k_z(z)} \quad 2.21$$

Με την υπόθεση λοιπόν ότι το A(z) μεταβάλλεται αργά, ή αλλιώς με την υπόθεση ότι η δυναμική ενέργεια $E_c(z)$ μεταβάλλεται αργά ως προς z, η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου δίνεται από την (2.22)

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = C e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \sqrt{k_z(0)/k_z(z)} e^{i \int k_z(z') dz'} \quad 2.22$$

Όπου

$$E = E_c(z) + \frac{\hbar^2}{2m^*} [k_x^2 + k_y^2 + k_z^2(z)] \quad 2.23$$

Η σχέση (2.23) για την ενέργεια είναι ουσιαστικά επέκταση της σχέσης διασποράς (1.39) για το πρόβλημα χωρίς εξωτερικές δυνάμεις. Μπορούμε να πούμε ότι η σχέση διασποράς μεταβάλλεται συνεχόμενα με το z, όπως φαίνεται στο Σχ. 2.3. Από τη στιγμή που η συνολική ενέργεια είναι σταθερή,

το k_z πρέπει να μεταβάλλεται αργά με το z . Μπορούμε τώρα να αποδείξουμε το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα για τα ηλεκτρόνια-κυματοπακέτα.

Θεωρούμε ένα ηλεκτρόνιο που εισέρχεται στη διάταξη στο $z=0$ όπως φαίνεται στο σχήμα με ορμή $\hbar k_0$ (το αντίστοιχο κυματοπακέτο είναι επικεντρωμένο στο k_0). Το ηλεκτρόνιο θα κινηθεί προς τα δεξιά με ταχύτητα $\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z}$. Όμως καθώς το ηλεκτρόνιο κινείται προς τα δεξιά το k_z πρέπει να μεταβάλλεται για να παραμένει σταθερή η συνολική ενέργεια.

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial E}{\partial k_z} \frac{dk_z}{dt} + \frac{\partial E}{\partial z} \frac{dz}{dt} = 0 \quad 2.24$$

Αναγνωρίζοντας τον όρο της ταχύτητας στο παραπάνω άθροισμα καταλήγουμε στη σχέση

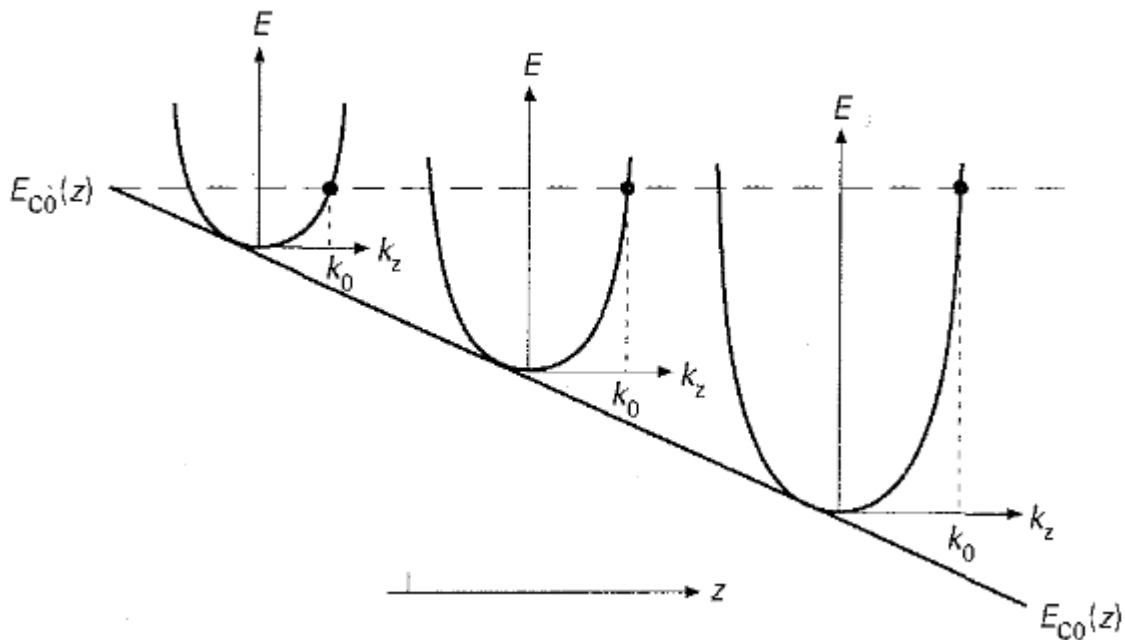
$$\hbar \frac{dk_z}{dt} = - \frac{\partial E}{\partial z} \quad 2.25$$

Από τη σχέση (2.25) και μόνο, αν θεωρήσουμε μικρή την παράγωγο ως προς z της κινητικής ενέργειας σε σχέση με τη δυναμική μπορούμε να καταλήξουμε στο νόμο του Νεύτωνα

$$\hbar \frac{dk_z}{dt} = - \frac{dE_c}{dz} \quad 2.26$$

Χρησιμοποιώντας το αποτέλεσμα της (2.23)

$$\frac{\partial E}{\partial z} = \frac{dE_c}{dz} + \frac{\hbar^2}{2m^*} 2k_z(z) \frac{dk_z(z)}{dz} \cong \frac{dE_c}{dz} \quad 2.27$$



Σχήμα 2.3 Κίνηση ηλεκτρονίου-κυματοπακέτου επικεντρωμένου γύρω από το k_0 κατά μήκος ενός αργά μεταβαλλόμενου δυναμικού. [4]

Η παραπάνω ανάλυση δείχνει ότι τα κυματοπακέτα ακολουθούν τις τροχιές των κλασικών σωματιδίων με την προϋπόθεση ότι ο κυματαριθμός γύρω από τον οποίο είναι επικεντρωμένα δεν υπόκειται απότομα σε μεταβολές συγκρίσιμες με τον εαυτό του.

2.2 Ημικλασσική θεωρία μεταφοράς φορέων

Στην ημικλασσική θεωρία μεταφοράς φορέων κεντρικό πρόβλημα είναι να προσδιορίσουμε τη στατιστική κατανομή των ηλεκτρονίων του ημιαγωγού εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας. Ορίζουμε την f ως μία κλασσική στατιστική κατανομή που δίνει την πιθανότητα τη χρονική στιγμή t ένα ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στη θέση \mathbf{r} με ορμή $\hbar\mathbf{k}$. Αυτή η προσέγγιση χαρακτηρίζεται ημικλασσική αφού θεωρούμε ότι για κάθε σωματίδιο είναι γνωστά τα μεγέθη της θέσης και της ορμής του, ωστόσο η ορμή του εξάγεται κβαντομηχανικά. Έτσι για ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν ενεργειακές στάθμες κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας με την προσέγγιση της ενεργούς μάζας υπολογίζουμε ότι έχουν καθορισμένη ορμή $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ και ταχύτητα $\frac{\hbar\mathbf{k}}{m^*}$. Η κατανομή f σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας θα μας δίνει τη γνωστή κατανομή Fermi, f_0 .

$$f_0 = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad 2.28$$

Αν καταφέρουμε να βρούμε την $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ τότε μπορούμε να προσδιορίσουμε και άλλα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν για τη μελέτη της μεταφοράς φορτίου σε έναν ημιαγωγό αφού για την πυκνότητα φορέων και για την πυκνότητα ρεύματος έχουμε

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3k \quad 2.29$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3k \quad 2.30$$

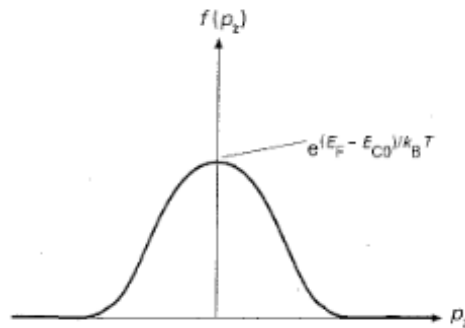
$$w = \langle E(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \int E(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{k} \quad 2.31$$

2.3 Στατιστική κατανομή ταχυτήτων στη θερμοδυναμική ισορροπία

Για την κατάσταση ισορροπίας εύκολα διαπιστώνει κανείς ότι για κάθε ηλεκτρόνιο ορμής $\hbar\mathbf{k}$ θα έχουμε και ένα ηλεκτρόνιο ορμής $-\hbar\mathbf{k}$ και επομένως το ρεύμα που ρέει στο εσωτερικό της διάταξης στην ισορροπία θα είναι μηδενικό όπως άλλωστε αναμενόταν. Υποθέτοντας μη εκφυλισμένο ημιαγωγό η (2.28) προσεγγίζεται από την κατανομή Boltzmann και θα έχουμε

$$f_0 = \exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{E_F - E_{c0} - (\hbar^2 k_x^2 / 2m_n^*)}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{E_F - E_{c0}}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_n^* k_B T}\right)$$

Άρα για κάθε σημείο του πραγματικού χώρου η κατανομή στο χώρο των ορμών είναι μία γκαουσιανή καμπάνα όπως απεικονίζεται και στο σχήμα



Σχήμα 2.4 Στατιστική κατανομή ορμών στη θερμοδυναμική ισορροπία. Για κάθε ηλεκτρόνιο ορμής $\hbar\mathbf{k}$ θα έχουμε και ένα ηλεκτρόνιο ορμής $-\hbar\mathbf{k}$ και επομένως το ρεύμα που ρέει στο εσωτερικό της διάταξης στην ισορροπία θα είναι μηδενικό [4]

2.4 Στατιστική κατανομή εκτός ισορροπίας

Έστω τώρα ότι στο σύστημά μας εφαρμόζεται κάποια εξωτερική δύναμη (ηλεκτρικό πεδίο) και η θερμοδυναμική κατάσταση ισορροπίας διαταράσσεται. Η εύρεση της νέας στατιστικής κατανομής είναι μία πολύ δύσκολη εργασία η οποία απαιτεί αρκετές υποθέσεις και προσεγγίσεις. Η γενική εξίσωση που διέπει ένα πρόβλημα εκτός ισορροπίας είναι η εξίσωση του ρυθμού μεταβολής της συνάρτησης κατανομής που δίνεται από τη σχέση (2.32). Η εξίσωση (2.32) ονομάζεται προσέγγιση Vlasov και αποτελεί μία μονοατομική προσέγγιση στην εξίσωση Liouville πολλών σωμάτων. Το θεώρημα Liouville επιβάλλει η συνάρτηση κατανομής πολλών σωμάτων να είναι σταθερή σε κάθε t . Ο όρος $\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll}$ εισάγεται στη μονοατομική εξίσωση για να προσομοιώσει τις μεταβάσεις του ενός ηλεκτρονίου στο χώρο των ορμών. Οι σκεδάσεις θεωρούνται ακαριαία γεγονότα που αλλάζουν τη θέση ενός σωματιδίου στο χώρο των ορμών αλλά όχι στον πραγματικό χώρο.

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{dt} = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{coll} \quad 2.32$$

Το πρώτο μέλος της (2.32) αναλύεται ως

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{field} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{diff} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad 2.33$$

Στην κατάσταση που η κατανομή δε μεταβάλλεται με το χρόνο παίρνουμε

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{field} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{diff} = \frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{coll} \quad 2.34$$

Η παραπάνω εξίσωση περιλαμβάνει την επίδραση στη στατιστική κατανομή του εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου, των βαθμίδων συγκέντρωσης καθώς και των σκεδάσεων των ηλεκτρονίων από φωνόνια, νοθεύσεις κλπ.

Ο πρώτος όρος του αριστερού μέλους της (2.34) ισούται με

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{field} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} F_{\varepsilon\xi} \nabla_{\mathbf{k}} f \quad 2.35$$

Ενώ ο δεύτερος

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{diff} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f \quad 2.36$$

Αντικαθιστώντας η (2.34) γράφεται ισοδύναμα

$$\frac{1}{\hbar} F_{\varepsilon\xi} \nabla_{\mathbf{k}} f + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \quad 2.37$$

Για κάθε κατανομή f μπορούμε να γράψουμε ότι $f = f_s + f_a$, όπου η f_s είναι μία άρτια συνάρτηση στο χώρο των ορμών και έχει μορφή παρόμοια με την κατανομή ισορροπίας ενώ η f_a είναι μία περιττή συνάρτηση. Με την προσέγγιση της διάχυσης (diffusion approximation) θεωρούμε ότι η f_s είναι πολύ μεγαλύτερη από την f_a , κάτι που δεν είναι παράλογο για μικρές διαταραχές της θερμοδυναμικής ισορροπίας. Είναι φανερό ότι η f_s λόγω της συμμετρίας της στο χώρο των ορμών δε θα συνεισφέρει ρεύμα στη διάταξη. Επίσης καθώς το σύστημά μας τείνει στη θερμοδυναμική ισορροπία θα ισχύει $f_s = f_0$ και $f_a = 0$.

2.5 Quasi-Fermi levels

Η συνάρτηση f_s ορίζει ένα πολύ χρήσιμο μέγεθος, τις ψευδοστάθμες Fermi (quasi Fermi levels) $F_n(\mathbf{r})$ μέσω της παρακάτω σχέσης:

$$f_s(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \frac{1}{1 + \exp(U)} \quad 2.38$$

Όπου

$$U = \frac{E - F_n}{k_B T} = \frac{E_{c0}(\mathbf{r}) + (\hbar^2 k^2 / 2m_n^*) - F_n(\mathbf{r})}{k_B T} \quad 2.39$$

Η $F_n(\mathbf{r})$ ορίζεται κατά τέτοιον τρόπο ώστε η μαθηματική έκφραση της $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ να είναι ίδια με την έκφραση για την στατιστική κατανομή σε κατάσταση ισορροπίας, με την αντικατάσταση $E_F \rightarrow F_n$. Για τον υπολογισμό της πυκνότητας ηλεκτρονίων εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας χρησιμοποιούμε την (2.28) και παίρνουμε

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3k = \frac{1}{4\pi^3} \int [f_s(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + f_a(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)] d^3k \quad 2.40$$

Αν αγνοήσουμε τον όρο f_a σύμφωνα με τη συζήτηση που έγινε στην τελευταία παράγραφο της προηγούμενης ενότητας και θεωρήσουμε μη εκφυλισμένο ημιαγωγό τότε

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int f_s(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3k = \frac{1}{4\pi^3} \int \exp\left(\frac{F_n - E(k)}{k_B T}\right) d^3k \quad 2.41$$

Ανατρέχοντας στο πρώτο κεφάλαιο (1.58) για τη συγκέντρωση ηλεκτρονίων στη θερμοδυναμική ισορροπία έχουμε

$$n_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int \exp\left(\frac{E_f - E(k)}{k_B T}\right) d^3k = N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{k_B T}\right) \quad 2.42$$

Άρα

$$n(\mathbf{r}, t) = n_0(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{F_n - E_f}{k_B T}\right) = N_c \exp\left(\frac{F_n - E_c}{k_B T}\right) \quad \text{ή} \quad F_n = E_c + k_B T \ln(n/N_c) \quad 2.43a$$

Ομοίως για τις σπές ορίζεται το quasi-Fermi level F_p και ισχύει

$$p(\mathbf{r}, t) = p_0(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{E_f - F_p}{k_B T}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - F_p}{k_B T}\right) \quad \text{ή} \quad F_p = E_v - k_B T \ln(p/n_i) \quad 2.44b$$

Η σχέση (2.43) αποτελεί έναν ισοδύναμο εναλλακτικό ορισμό των quasi-Fermi levels. Επίσης οι ψευδοστάθμες έχουν οριστεί με τέτοιο τρόπο, ώστε όταν ένα διαταραγμένο σύστημα επιστρέφει στην κατάσταση ισορροπίας του τότε $F_n, F_p \rightarrow E_F$ και η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων δίνεται από τις γνωστές σχέσεις για την ισορροπία.

2.6 Υπολογισμός ρεύματος χαμηλού ηλεκτρικού πεδίου από BTE

Κλείνοντας την παρένθεση που ανοίξαμε για να ορίσουμε τα Quasi-Fermi levels συνεχίζουμε την ανάλυση της ενότητας 2.4 για να εξάγουμε μία έκφραση για την πυκνότητα ρεύματος σε χαμηλά ηλεκτρικά πεδία. Από την (2.37) θα έχουμε

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{F}_{\varepsilon\xi} \nabla_{\mathbf{k}}(f_s + f_a) + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}(f_s + f_a) = \left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_{coll} + \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{coll} \quad 2.45$$

Στη θερμοδυναμική ισορροπία $f_s = f_0$ και ο όρος $\left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_{coll}$ μηδενίζεται. Για χαμηλή πεδιακή ένταση και για θερμοκρασία ίδια με τη θερμοκρασία ισορροπίας ο όρος $\left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_{coll}$ πάλι θα τείνει στο 0 καθώς έχει τη μορφή κατανομής σε θερμοδυναμική ισορροπία [4]. Για να προχωρήσουμε στην επίλυση της παραπάνω εξίσωσης κάνουμε μία σημαντική προσέγγιση για τον όρο που περιγράφει τις σκεδάσεις, την προσέγγιση του χρόνου χαλάρωσης. Θεωρούμε δηλαδή ότι

$$\left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.46$$

Η προσέγγιση του χρόνου χαλάρωσης μας δίνει αποτελέσματα κοντά στην πραγματικότητα για μικρά πεδία και για σκεδάσεις ισοτροπικές ή ελαστικές. Για ισοτροπικές σκεδάσεις η σταθερά χρόνου τ_f ισούται με το μέσο χρόνο ανάμεσα στις σκεδάσεις, ενώ για ελαστικές σκεδάσεις κάθε γεγονός σκέδασης χαρακτηρίζεται από μία γωνία σκέδασης α και συμβάλλει στον υπολογισμό του μέσου χρόνου με έναν παράγοντα βαρύτητας $(1 - \cos\alpha)$. Οι χρόνοι τ_f υπολογίζονται κβαντομηχανικά. [4]

Αντικαθιστώντας στην (2.45) παίρνουμε

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{F}_{\varepsilon\xi} \nabla_{\mathbf{k}}(f_s + f_a) + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}(f_s + f_a) = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.47$$

Για να απλοποιήσουμε περαιτέρω την (2.47) χρησιμοποιούμε την προσέγγιση της διάχυσης για τη στατιστική κατανομή, δηλαδή $f_s \gg f_a$. Επίσης χρειαζόμαστε να υποθέσουμε ότι $|\nabla_{\mathbf{k}}(f_s)| \gg |\nabla_{\mathbf{k}}(f_a)|$ και $|\nabla_{\mathbf{r}}(f_s)| \gg |\nabla_{\mathbf{r}}(f_a)|$, το οποίο είναι πιο δύσκολο να διαπιστωθεί αρχικά, ωστόσο δίνει αυτοσυνεπείς λύσεις. Με όλες τις παραπάνω υποθέσεις η εξίσωση (2.47) γίνεται

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{F}_{\varepsilon\xi} \nabla_{\mathbf{k}}(f_s) + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{r}}(f_s) = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.48$$

Εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{F}_{\varepsilon\xi} \frac{\partial f_s}{\partial U} \nabla_{\mathbf{k}} U + \mathbf{v} \frac{\partial f_s}{\partial U} \nabla_{\mathbf{r}} U = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.49$$

Θεωρώντας σταθερή τη θερμοκρασία του κρυστάλλου από την εξίσωση (2.39) παίρνουμε

$$\nabla_{\mathbf{r}} U = \frac{\nabla_{\mathbf{r}} E_{c0}(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} F_n(\mathbf{r})}{k_B T} \quad 2.50$$

$$\nabla_{\mathbf{k}} U = \frac{1}{k_B T} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m_n^*} \quad 2.51$$

Αντικαθιστούμε στην (2.49) παίρνουμε

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{F}_{\varepsilon\xi} \frac{\partial f_s}{\partial U} \frac{1}{k_B T} \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{m_n^*} + \mathbf{v} \frac{\partial f_s}{\partial U} \frac{\nabla_r E_{c0}(\mathbf{r}) - \nabla_r F_n(\mathbf{r})}{k_B T} = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.52$$

Για να παραμείνουν απλά τα μαθηματικά υποθέτουμε μη εκφυλισμένο ημιαγωγό οπότε

$$f_s = \exp(-U) \quad 2.53$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial U} = -f_s \quad 2.54$$

Ακόμα από την (2.26) έχουμε ότι

$$\mathbf{F}_{\varepsilon\xi} = -\nabla_r E_{c0}(\mathbf{r}) \quad 2.55$$

Η (2.52) μπορεί τώρα να γραφτεί

$$-\frac{f_a}{\tau_f} = -f_s \frac{1}{k_B T} \mathbf{v} (\mathbf{F}_{\varepsilon\xi} + \nabla_r E_{c0}(\mathbf{r}) - \nabla_r F_n(\mathbf{r})) \quad 2.56$$

Ή ισοδύναμα

$$f_a = -f_s \frac{\tau_f}{k_B T} \mathbf{v} \nabla_r F_n(\mathbf{r}) \quad 2.57$$

Ορίζουμε τη γενικευμένη δύναμη $\mathcal{F} = -\nabla_r F_n(\mathbf{r})$ και η (2.57) γίνεται

$$f_a = f_s \frac{\tau_f}{k_B T} \mathbf{v} \mathcal{F} \quad 2.58$$

Είμαστε τώρα έτοιμοι να εξάγουμε μία έκφραση για την πυκνότητα ρεύματος. Σύμφωνα με την εξίσωση (2.29)

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\frac{q}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f_a(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = -\frac{q}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v} f_s \frac{\tau_f(\mathbf{p})}{k_B T} \mathbf{v} \mathcal{F} = -\frac{q}{\Omega k_B T} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}(\mathbf{k}) f_s \tau_f(\mathbf{p}) \mathbf{v} \mathcal{F} \quad 2.59$$

Για να απλοποιήσουμε το πρόβλημα το λύνουμε στη μία διάσταση. Έτσι θα έχουμε

$$\begin{aligned} J_{nx} &= -\frac{q}{\Omega k_B T} \sum_{p_x} v_x f_s \tau_f(p_x) v_x \mathcal{F}_x = \frac{q}{m_n^* \Omega (k_B T / 2)} \sum_{p_x} \frac{m_n^* v_x^2}{2} f_s \tau_f(p_x) \frac{\partial F_n}{\partial x} \\ &= \frac{q^2}{m_n^* \Omega (k_B T / 2)} \sum_{p_x} \frac{m_n^* v_x^2}{2} f_s \tau_f(p_x) \partial_x \left(\frac{F_n}{q} \right) \end{aligned} \quad 2.60$$

Μπορούμε τώρα να γράψουμε

$$J_{nx} = \sigma \partial_x \left(\frac{F_n}{q} \right) \quad 2.61$$

Όπου

$$\sigma = \frac{q^2}{m_n^* \Omega (k_B T / 2)} \sum_{p_x} \frac{m_n^* v_x^2}{2} f_s \tau_f(p_x) \quad 2.62$$

Αναγνωρίζουμε το άθροισμα ως η φορές τη μέση τιμή του γινομένου $E(p) \tau_f(p)$ και $(k_B T / 2)$ είναι η μέση θερμική ενέργεια. Άρα

$$\sigma = nq \frac{q \ll \tau_f \gg}{m_n^*}$$

Με $\ll \tau_f \gg = \frac{\langle E(p) \tau_f(p) \rangle}{\langle E \rangle}$ και ορίζουμε την κινητικότητα για χαμηλή τιμή πεδίου $\mu_0 = \frac{q \ll \tau_f \gg}{m_n^*}$. Άρα για την πυκνότητα του ρεύματος θα έχουμε

$$J_{nx} = qn\mu_0 \partial_x \left(\frac{F_n}{q} \right) \quad 2.63$$

Η σχέση (2.63) καταδεικνύει τη σχέση ανάμεσα στο ρεύμα της διάταξης και την κλίση του quasi-Fermi επιπέδου. Αντίστοιχα για το ρεύμα που οφείλεται στις οπές θα έχουμε

$$J_{px} = qp\mu_0 \partial_x \left(\frac{F_p}{q} \right) \quad 2.64$$

Οι παραπάνω σχέσεις εύκολα γενικεύονται για το τρισδιάστατο πρόβλημα και τελικά για την πυκνότητα ρεύματος της διάταξης έχουμε

$$J = qn\mu_0 \nabla \left(\frac{F_n}{q} \right) + qp\mu_0 \nabla \left(\frac{F_p}{q} \right) \quad 2.65$$

Εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (2.43) η (2.63) γράφεται

$$J_x = qn\mu_0 \partial_x \left(\frac{F_n}{q} \right) = n\mu_0 \partial_x F_n = n\mu_0 \partial_x [E_c + k_B T \ln(n/N_c)] = n\mu_0 \partial_x E_c + n\mu_0 k_B T \frac{1}{n} \partial_x n \quad 2.66$$

$$= q\mu_n n F_{\varepsilon\xi} + \mu_0 k_B T \partial_x n$$

Η σχέση που καταλήξαμε είναι η γνωστή εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης. Παίρνοντας υπόψη ότι

$$\langle E \rangle = w = \frac{k_B T}{2}$$

Η (2.66) γράφεται

$$J_x = q\mu_n n F_{\varepsilon\xi} + q \frac{2\mu_0 w}{q} \partial_x n = q\mu_n n F_{\varepsilon\xi} + q D_n \partial_x n \quad 2.67$$

Όπου $D_n = \frac{2\mu_0 w}{q}$, ο συντελεστής διάχυσης που δίνεται από τη γνωστή φόρμουλα του Einstein.

Η εξαγωγή της (2.67) από την (2.63) δείχνει ότι μπορούμε να συμπεριλάβουμε σε έναν όρο τις συνεισφορές των φαινομένων της ολίσθησης και της διάχυσης. Αυτή η σχέση της πυκνότητας ρεύματος με τα quasi Fermi levels αποδεικνύεται στην πράξη πολύ χρήσιμη καθώς μας δίνει τη δυνατότητα εξετάζοντας ένα ενεργειακό διάγραμμα που περιλαμβάνει τις στάθμες αυτές να ανιχνεύσουμε τη ροή ρεύματος ανάλογα με την κλίση της quasi-Fermi στάθμης.

2.7 Εξίσωση ρεύματος για ετεροδιατάξεις

Από την εξίσωση (2.48) παίρνουμε

$$v_z \frac{\partial f}{\partial z} + \left[-q\varepsilon_z + \frac{d\chi}{dz} \right] \frac{\partial f}{\partial p_z} - \frac{p^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \right) \frac{\partial f}{\partial p_z} = -\frac{f_a}{\tau_f} \quad 2.68$$

Όπου αντικαταστήσαμε την $F_{\varepsilon\xi}$ από τη σχέση

$$F_{\varepsilon\xi} = -q\varepsilon_z + \frac{d\chi}{dz} - \frac{p^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \right) \quad 2.69$$

Για μικρές διαταραχές της θερμοδυναμικής ισορροπίας προσεγγίζουμε τη συνάρτηση κατανομής στο αριστερό μέλος με την f_s όπως παραπάνω και για την f_a θα έχουμε

$$f_a = q\tau_f \left[\varepsilon_z - \frac{d}{dz} \left(\frac{\chi}{q} \right) \right] \frac{\partial f_s}{\partial p_z} - \tau_f v_z \frac{\partial f_s}{\partial z} + \frac{p^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*} \right) \frac{\partial f_s}{\partial p_z} \quad 2.70$$

Έχοντας υποθέσει συνθήκες κοντά στη θερμοδυναμική ισορροπία και μη εκφυλισμένο ημιαγωγό

$$f_s = \exp[-(E_{C0} + p^2/2m_n^* - F_n)/k_B T] \quad 2.71$$

Αντικαθιστούμε στην (2.70) και προκύπτει

$$f_a = \frac{\tau_f}{k_B T} f_s v_z \frac{dF_n}{dz} \quad 2.72$$

Η οποία είναι όμοια με την (2.57) και τελικά θα πάρουμε ίδια φόρμουλα για την πυκνότητα ρεύματος της διάταξης

$$J_{nx} = qn\mu_0 \partial_x \left(\frac{F_n}{q} \right) \quad 2.73$$

Χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.43) για τα quasi-Fermi levels

$$\partial_z F_n = \frac{dE_{C0}}{dz} + k_B T \left[\frac{1}{n} \frac{dn}{dz} - \frac{1}{N_C} \frac{dN_C}{dz} \right] \quad 2.74$$

Και εισάγοντάς την στη (2.73) παίρνουμε

$$J_{nx} = n\mu_0 \left[\frac{dE_{C0}}{dz} - \frac{k_B T}{N_C} \frac{dN_C}{dz} \right] + k_B T \mu_0 \frac{dn}{dz} \quad 2.75$$

Για να ολοκληρώσουμε τη διαδικασία εξαγωγής της φόρμουλας για το ρεύμα των ετεροδιατάξεων χρειάζεται να εκφράσουμε την κλίση της ζώνης αγωγιμότητας συναρτήσει του εξωτερικού πεδίου και παραμέτρων των εμπλεκόμενων υλικών. Έτσι χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα της σχετικής ανάλυσης που έγινε παραπάνω και καταλήγουμε

$$J_{nx} = -nq\mu_0 \left[\frac{dV(z)}{dz} + \frac{d}{dz} \left(\frac{\chi}{q} \right) + \frac{k_B T}{q} \frac{1}{N_C} \frac{dN_C}{dz} \right] + qD_n \frac{dn}{dz} \quad 2.76$$

Εξετάζοντας την εξίσωση ρεύματος για τις ετεροδιατάξεις (2.76) βλέπουμε ότι παρουσιάζονται επιπλέον όροι σε σχέση με την εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης. Στις ετεροδιατάξεις συνυπολογίζουμε στο ηλεκτρικό πεδίο και ένα ψευδο-πεδίο που δημιουργεί η μεταβολή της ηλεκτρονικής συγγένειας (electron affinity) στο χώρο. Επίσης πέρα από το γνωστό όρο της διάχυσης έχουμε και έναν όρο ο οποίος περιγράφει την επίδραση των μεταβολών στην effective πυκνότητα καταστάσεων, που όμως δεν μπορεί να χαρακτηριστεί ξεκάθαρα ούτε ως όρος ολίσθησης (αφού είναι ανάλογος της πυκνότητας ηλεκτρονίων) ούτε ως όρος διάχυσης (αφού περιέχει βαθμίδα). Από φυσικής σκοπιάς αυτός ο όρος περιγράφει την τάση των ηλεκτρονίων να διαχέονται στην κατεύθυνση που αυξάνεται η πυκνότητα καταστάσεων καθώς εκεί υπάρχουν περισσότερες καταστάσεις διαθέσιμες για μία οποιαδήποτε κίνηση. Πρακτικά όμως η επίδραση του ψευδο-πεδίου στον όρο της ολίσθησης είναι ο πιο ουσιαστικός επιπρόσθετος παράγοντας, ενώ ο παράγοντας της βαθμίδας των διαθέσιμων καταστάσεων είναι αρκετά μικρός. [4]

2.8 Ρεύμα υψηλής πεδιακής έντασης

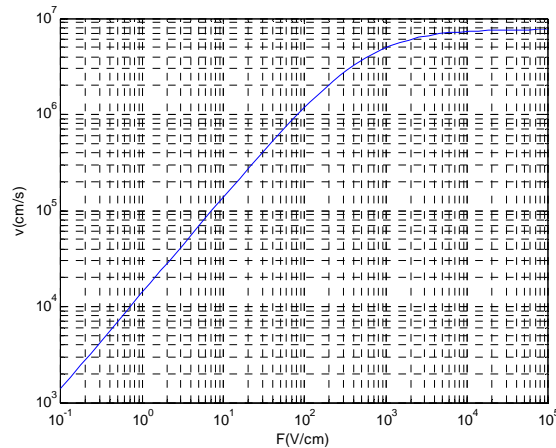
Χρησιμοποιώντας εμπειρικές φόρμουλες για την κινητικότητα και το συντελεστή διάχυσης επεκτείνουμε την ισχύ της εξίσωσης ολίσθησης-διάχυσης για πιο ισχυρές πεδιακές εντάσεις. Ορίζουμε το συντελεστή $\mu(\mathbf{F})$ που περιγράφει την εξάρτηση της κινητικότητας από το ηλεκτρικό πεδίο. Για ημιαγωγούς της 4^{ης} στήλης του περιοδικού πίνακα (Si, Ge) η κινητικότητα περιγράφεται από τη σχέση

$$\mu_n(\mathbf{F}) = \frac{\mu_{n0}}{1 + \frac{|\mathbf{F}|}{F_c}} \quad 2.77$$

Όπου $\mu_{n0} = \frac{e\tau}{m_n^*}$ η κινητικότητα σε συνθήκες χαμηλής έντασης πεδίου. Εισάγαμε επίσης την παράμετρο F_c η οποία είναι χαρακτηριστική του κάθε υλικού. Με βάση τα παραπάνω η ταχύτητα ολίσθησης συναρτήση του εξωτερικού πεδίου θα είναι

$$v(F) = \frac{\mu_{n0} F}{1 + \frac{|F|}{F_c}} \quad 2.78$$

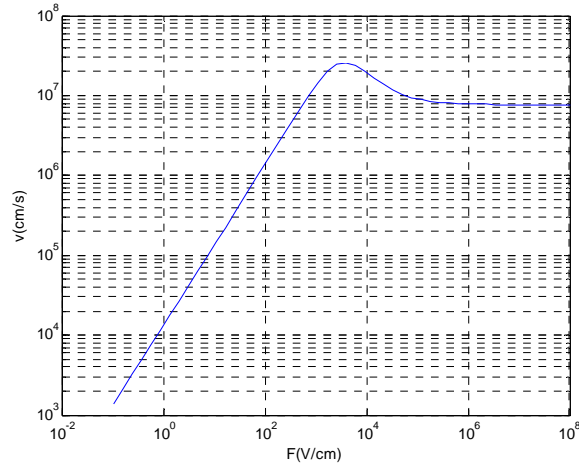
Παρατηρούμε ότι η ταχύτητα ολίσθησης μετά από μία τιμή του ηλεκτρικού πεδίου οδηγείται σε κορεσμό, γεγονός που οφείλεται στις σκεδάσεις ηλεκτρονίων φωνονίων.



Σχήμα 2.5 Γραφική παράσταση της ταχύτητας ολίσθησης συναρτήση του ηλεκτρικού πεδίου για ημιαγωγούς της 4^{ης} στήλης.

Για ημιαγωγούς III-V η σχέση που περιγράφει την εξάρτηση της κινητικότητας από το ηλεκτρικό πεδίο δίνεται από το μοντέλο της αρνητικής διαφορικής αγωγιμότητας (2.79)

$$\mu_n(F) = \frac{\mu_{n0} + \frac{v_{satn}}{|F|} \left(\frac{F}{F_c}\right)^\gamma}{1 + \left(\frac{F}{F_c}\right)^\gamma} \quad 2.79$$



Σχήμα 2.6 Ταχύτητα ολίσθησης των φορέων συναρτήσεσι του ηλεκτρικού πεδίου σε ημιαγωγούς III-V.

Παρατηρούμε από το Σχ. 2.6 ότι η ταχύτητα ολίσθησης οδηγείται στον κορεσμό σε τιμή μικρότερη από τη μέγιστη ταχύτητα ολίσθησης. Αυτό συμβαίνει λόγω της σκέδασης ηλεκτρονίων σε κοιλάδα μικρότερης ενεργούς μάζας.

2.9 Περιορισμοί στη χρήση της BTE

Η BTE είναι προσεγγιστική μέθοδος γιατί θεωρεί ότι τα ηλεκτρόνια είναι κλασσικά σωματίδια. Η κβαντομηχανική υπεισέρχεται μόνο στον υπολογισμό των μεγεθών που αφορούν τις σκεδάσεις και στον προσδιορισμό της ταχύτητας των ηλεκτρονίων. Για αυτό είναι σημαντικό να εξετάσουμε τα όρια εγκυρότητας αυτής της προσεγγιστικής μεθόδου. Σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \hbar \quad 2.80$$

Αν θεωρήσουμε ότι η αβεβαιότητα στην ενέργεια είναι $k_B T$ τότε για την αβεβαιότητα στην ορμή έχουμε

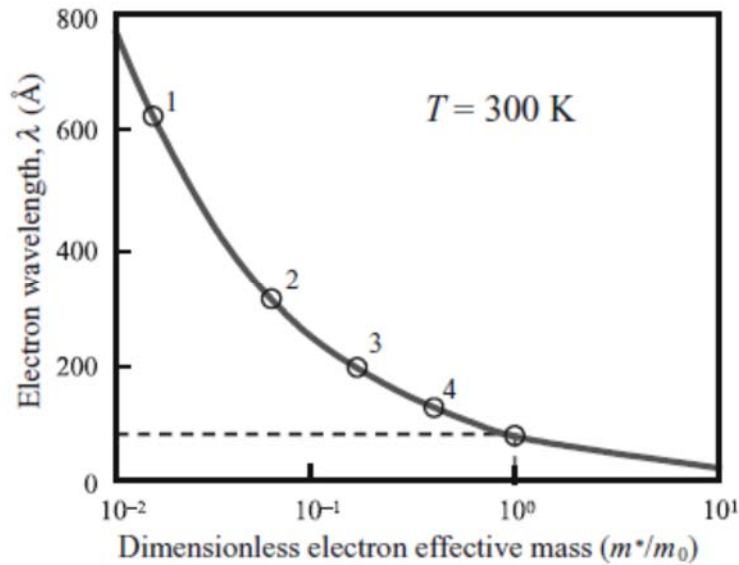
$$(\Delta p) \approx \sqrt{2m^*k_B T} \quad 2.81$$

και συνακόλουθα

$$(\Delta x) \geq \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*k_B T}} \quad 2.82$$

Αν λάβουμε υπόψη μας ότι το μήκος κύματος ενός ηλεκτρονίου με τη μέση θερμική ενέργεια είναι $\lambda_B = \hbar/\sqrt{2m^*k_B T}$ τότε καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι όταν αντιμετωπίζουμε ένα ηλεκτρόνιο ως σωματίδιο η αβεβαιότητα στη θέση του είναι της τάξης του μήκους κύματος Boltzmann. Είμαστε υποχρεωμένοι να συμβιβαστούμε με μία τέτοια αβεβαιότητα στη θέση του ηλεκτρονίου αν θέλουμε να το εντοπίζουμε επαρκώς στο χώρο των ορμών. Επομένως το δυναμικό της διάταξης θα πρέπει να μη

μεταβάλλεται πολύ απότομα σε σχέση με το λ_B . Στο Σχ. 2.7 απεικονίζεται το λ_B ως προς την ενεργό μάζα του ηλεκτρονίου. Για ενεργό μάζα ηλεκτρονίου στο εύρος $(0,01 - 1)m_0$ το μήκος κύματος κυμαίνεται στην περιοχή $730 - 73\text{\AA}$.



Σχήμα 2.7 Γραφική αναπαράσταση του θερμικού μήκους κύματος ηλεκτρονίου συναρτήσει της αδιάστατης ποσότητας m^*/m_0 . [10]

Ένας δεύτερος περιορισμός στη χρήση της ΒΤΕ προκύπτει από τη δεύτερη σχέση αβεβαιότητας

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \hbar \quad 2.83$$

Η (2.83) επιβάλλει ότι ένας φορέας πρέπει να μένει σε μία κατάσταση για αρκετό χρονικό διάστημα για να έχει καλά ορισμένη ενέργεια. Αν πάρουμε ότι $\Delta t = \tau$ όπου τ ο μέσος χρόνος μεταξύ των σκεδάσεων και υποθέσουμε ότι $\Delta E = k_B T$ τότε θα πρέπει

$$\tau \gg \frac{\hbar}{k_B T} \quad 2.84$$

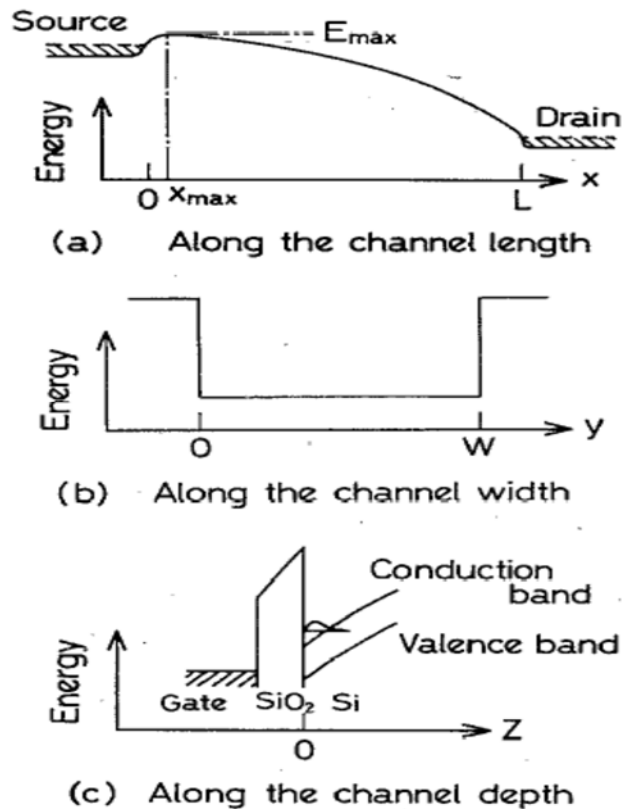
Πολλαπλασιάζοντας την (2.84) με τη θερμική ταχύτητα παίρνουμε ότι

$$l \gg \lambda_B \quad 2.85$$

Όπου l η μέση απόσταση μεταξύ των σκεδάσεων.

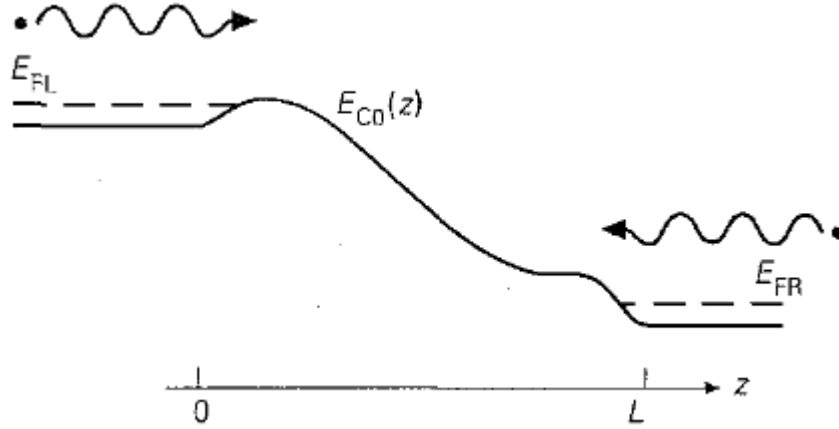
2.10 Landauer Formula

Όταν οι παραπάνω προϋποθέσεις δεν τηρούνται πρέπει να λυθεί μία κυματική εξίσωση για να μάθουμε πώς διαδίδεται η κυματοσυνάρτηση μέσα στη διάταξη. Θεωρούμε τη διάταξη του Σχ. 2.8. Υποθέτουμε ότι οι επαφές της διάταξης είναι θερμοδυναμικά reservoirs έτσι ώστε να παραμένουν σε θερμοδυναμική ισορροπία ακόμα και κάτω από συνθήκες εξωτερικής πόλωσης. Έστω τώρα E_F η ενέργεια Fermi των ηλεκτρονίων στα ηλεκτρόδια απουσία εξωτερικής πόλωσης. Όταν εφαρμόσουμε μία τάση V_D στο σύστημά μας, αν θεωρήσουμε το επίπεδο Fermi στο ένα ηλεκτρόδιο π.χ. στην πηγή ως σημείο αναφοράς τότε η στάθμη Fermi στην πηγή θα είναι ϕ_{FS} ενώ στην υποδοχή θα είναι $\phi_{FD} = \phi_{FS} - qV_D$.



Σχήμα 2.8 Κατανομή της δυναμικής ενέργειας σε ένα MOSFET: (a) το δυναμικό κατά μήκος του καναλιού (b) Το δυναμικό κατά το πλάτος της διάταξης (c) Το δυναμικό κατά το βάθος της διάταξης [11]

Η κυματοσυνάρτηση για το δυναμικό του σχήματος 2.8 θα δίνεται από τη σχέση (2.22). Το ρεύμα μπορεί να υπολογιστεί με τη μέθοδο που προτείνεται από τη φόρμουλα Landauer [11]. Κάθε ηλεκτρόδιο εγχέει και απορροφάει ηλεκτρόνια όπως απεικονίζεται στο Σχ. 2.9.



Σχήμα 2.9 Κάθε επαφή, με την υπόθεση ότι είναι σε θερμοδυναμική ισορροπία, εγχέει και απορροφά ηλεκτρόνια.

Το ρεύμα θα είναι ένα άθροισμα συνιστωσών που κάθε μία εκφράζει το ρεύμα που οφείλεται σε κάθε ένα ξεχωριστό υποκανάλι (subchannel). Κάθε συνιστώσα του ρεύματος θα ισούται με το γινόμενο του φορτίου του ηλεκτρονίου q , του πλήθους των φορέων που εισρέουν στο κανάλι ανά μονάδα χρόνου, του συντελεστή διάδοσης του καναλιού (transmission coefficient) και της πιθανότητας η κατάσταση στην οποία κατευθύνεται το ηλεκτρόνιο να μην είναι κατειλημμένη. Το πλήθος των φορέων που εισρέουν στο κανάλι είναι με τη σειρά του το γινόμενο της ταχύτητας των ηλεκτρονίων που εισέρχονται στο κανάλι, της μονοδιάστατης πυκνότητας καταστάσεων και της πιθανότητας κατάληψης της συγκεκριμένης κατάστασης.

Πρέπει να υπολογιστούν και οι δύο κατευθύνσεις ροής των ηλεκτρονίων, τόσο από την πηγή στην υποδοχή όσο και το αντίστροφο. Αποδεικνύεται σχετικά εύκολα ότι ο συντελεστής διάδοσης της διάταξης $T(E_x)$ είναι ίδιος και για τις δύο φορές της κίνησης [12]. Επίσης εξαρτάται μόνο από την κινητική ενέργεια στη διεύθυνση που είναι παράλληλη στο φράγμα δυναμικού. Θα έχουμε λοιπόν

$$I = q \sum_{n_y} \sum_{n_z} \int \{ v_x D(E_x) f(\phi_{FS}, E) [1 - f(\phi_{FD}, E)] - v_x D(E_x) f(\phi_{FD}, E) [1 - f(\phi_{FS}, E)] T(E_x) dE_x \quad 2.86$$

Το γινόμενο $v_x D(E_x)$ απλοποιείται σε $(\pi\hbar)^{-1}$ σύμφωνα με τις σχέσεις (1.87), (2.6). Άρα θα έχουμε

$$I = \frac{q}{\pi\hbar} \sum_{n_y} \sum_{n_z} \int [f(\phi_{FS}, E) - f(\phi_{FD}, E)] T(E_x) dE_x \quad 2.87$$

Σε αυτό το σημείο θα προχωρήσουμε την ανάλυσή μας λίγα βήματα παρακάτω για να βγάλουμε κάποια χρήσιμα συμπεράσματα σχετικά με τη λειτουργία των τρανζίστορ στη βαλλιστική περιοχή μεταφοράς. Στη βαλλιστική περιοχή μεταφοράς η μέση απόσταση μεταξύ των σκεδάσεων είναι μεγαλύτερη από τη διαδρομή που διανύει ένα ηλεκτρόνιο μέσα στο κανάλι. Στον πίνακα καταγράφονται προσεγγιστικά οι μέσες αποστάσεις σκεδάσεων για το πυρίτιο και για άλλα δύο υλικά που είναι υποψήφια να αντικαταστήσουν το υλικό του καναλιού, το InGaAs και το InAs.

Υλικό	Μέση ελεύθερη διαδρομή (nm)
Si	6
InGaAs	50
InAs	120

Η έννοια της κινητικότητας πλέον δεν υφίσταται αφού δεν υπάρχουν γεγονότα σκέδασης. Επίσης ο συντελεστής διάδοσης στο φορμαλισμό του Landauer ισούται με μονάδα, $T(E)=1$. Αν επίσης υποθέσουμε ότι στη διεύθυνση του πλάτους η διάταξή μας είναι αρκετά μεγάλη ώστε η άθροιση $\sum_{n_y}()$ να μπορεί να υπολογιστεί με ολοκλήρωση όπως ήδη έχουμε αναλύσει στην παράγραφο (1.6) τότε η (2.87) μπορεί να γραφεί

$$I = W \frac{\sqrt{2m^*} q (k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \sum_{n_z} \left[F_{1/2} \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{k_B T} \right) - F_{1/2} \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max}) - qV_D}{k_B T} \right) \right] \quad 2.88$$

Όπου $F_{1/2}(u) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{1 + \exp(y-u)} dy$ η συνάρτηση Fermi-Dirac. Όπως φαίνεται και στο Σχ. 2.8 x_{max} είναι το σημείο του καναλιού που το δυναμικό είναι μέγιστο. Η πυκνότητα φορτίου γύρω από το x_{max} μπορεί να υπολογιστεί παρομοίως χρησιμοποιώντας τη σχέση (1.76) για τη δισδιάστατη πυκνότητα ηλεκτρονίων

$$|Q| = \frac{qm^*k_B T}{2\pi\hbar^2} \sum_{n_z} \ln \left\{ \left[1 + \exp \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{k_B T} \right) \right] \left[1 + \exp \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max}) - qV_D}{k_B T} \right) \right] \right\} \quad 2.89$$

Με μαθηματική επεξεργασία μπορούμε ύστερα από αρκετές απλοποιήσεις να φτάσουμε σε σχέση για τη χωρητικότητα του καναλιού στο σημείο x_{max} .

$$C_{eff} = \frac{d|Q|}{dV_G} \quad 2.90$$

Αποδεικνύεται χρησιμοποιώντας την εξίσωση Poisson γύρω από το x_{max} [11] ότι η C_{eff} παραμένει σχεδόν σταθερή για μεγάλες τιμές του V_G , επομένως

$$|Q| = C_{eff}(V_G - V_t) \quad 2.91$$

Αν για παράδειγμα υποθέσουμε τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού τότε η τιμή της C_{eff} θα είναι

$$C_{eff} = \left[\frac{t_{ox}}{\varepsilon_{ox}} + \frac{t_{ch}}{\varepsilon_{ch}} \left(\frac{1}{3} + \frac{5}{8\pi^2} \right) \right]^{-1} \quad 2.92$$

Η σχέση (2.88) για το ρεύμα μπορεί να απλοποιηθεί σημαντικά κάνοντας την παρακάτω υπόθεση για τις κατελιημμένες ενεργειακές καταστάσεις. Όταν είναι κατελιημμένη μόνο μία υποζώνη n_z , η άθροιση

εξαλείφεται ενώ ακόμα και αν είναι ελαφρώς κατειλημμένες κάποιες ανώτερες υποζώνες, η άθροιση μπορεί να αντικατασταθεί από έναν πολλαπλασιαστή M έτσι ώστε

$$\sum_{n_z} [] = M \times (\text{συνεισφορά χαμηλότερου επιπέδου}) \quad 2.93$$

Στον κορεσμό στο ρεύμα συνεισφέρει ουσιαστικά μόνο η ροή από την πηγή στην υποδοχή και όχι το αντίστροφο. Επομένως για το ρεύμα κορεσμού μπορούμε να γράψουμε

$$I_{sat} = W \frac{\sqrt{2m^*}q(k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} M F_{1/2} \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{k_B T} \right) = W I_0 F_{1/2}(u) \quad 2.94$$

Όπου

$$u = \frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{k_B T} \quad 2.95$$

$$I_0 = M \frac{\sqrt{2m^*}q(k_B T)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \quad 2.96$$

Αντίστοιχα για την πυκνότητα φορτίου

$$|Q| = M \frac{qm^*k_B T}{2\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\phi_{FS} - E_{n_z}(x_{max})}{k_B T} \right) \right] \quad 2.97$$

Ορίζοντας μια νέα μεταβλητή

$$\rho = \frac{2\pi \hbar^2 |Q|}{qm^*k_B T M} \quad 2.98$$

Και χρησιμοποιώντας τις (2.94), (2.97) καταλήγουμε στην (2.99).

$$I_{sat} = W I_0 F_{1/2}[\ln(e^\rho - 1)] \quad 2.99$$

Για τιμές $\rho \gg 1$ η (2.99) προσεγγίζεται από τη σχέση

$$I_{sat} = W I_0 F_{1/2}(\rho) \quad 2.100$$

Αν υποθέσουμε εκφυλισμένο ημιαγωγό τότε η $F_{1/2}(\rho)$ προσεγγίζεται από την $(2/3)\rho^{3/2}$ και η έκφραση για το ρεύμα στον κορεσμό θα είναι

$$I_{sat} = W \frac{8\hbar |Q|^{3/2}}{3m^* \sqrt{q\pi M}} = W \frac{8\hbar [C_{eff}(V_G - V_t)]^{3/2}}{3m^* \sqrt{q\pi M}} \quad 2.101$$

Οι μόνες παράμετροι που περιέχει η έκφραση αυτή για το ρεύμα, πέρα από την τάση στην πύλη, είναι η C_{eff} και το πλάτος της διάταξης W . Επίσης σε αντίθεση με το συμβατικό MOSFET το ρεύμα κορεσμού εξαρτάται από το $(V_G - V_t)^{3/2}$ και όχι από το $(V_G - V_t)^2$.

Στις κλασικές διατάξεις MOSFET, το ρεύμα υποδοχής εξαρτάται από την ταχύτητα των φορέων στο κανάλι. Αυτή η ταχύτητα των φορέων εκφράζεται ως το γινόμενο του παράλληλου ηλεκτρικού πεδίου και της κινητικότητας. Όταν βέβαια η τιμή του πεδίου είναι αρκετά υψηλή η ταχύτητα των φορέων φτάνει στον κορεσμό, σε μία τιμή γύρω στα 10^7 cm/s , γεγονός που οφείλεται στις σκεδάσεις φωνονίων. Στη βαλλιστική μεταφορά φορέων δεν έχουμε σκεδάσεις στο κανάλι και όλα τα ηλεκτρόνια που κατευθύνονται προς την υποδοχή και διέρχονται από το σημείο x_{max} φτάνουν στην υποδοχή χωρίς να σκεδάζονται πίσω προς την πηγή. Το ρεύμα του καναλιού ελέγχεται από τη ροή φορέων προς την υποδοχή στο σημείο x_{max} . Αν ορίσουμε τη μέση ταχύτητα φορέων πάνω από το x_{max} ως

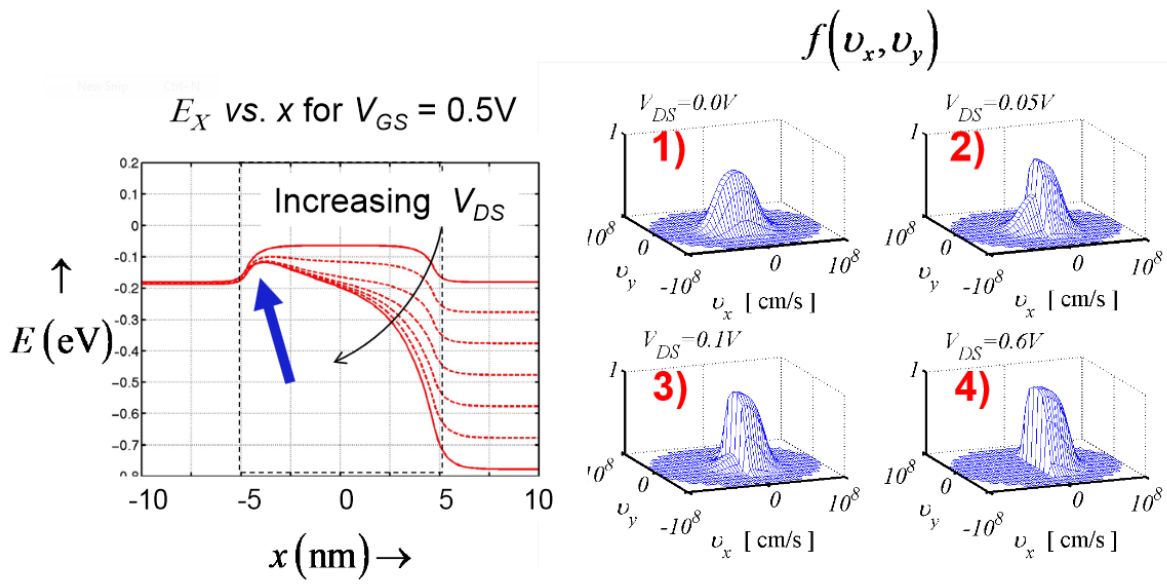
$$v_{inj} = \frac{I_{sat}}{W|Q|} = \frac{I_{sat}}{WC_{eff}(V_G - V_t)} \quad 2.102$$

Τότε χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.101)

$$v_{inj} = \frac{8\hbar\sqrt{|Q|}}{3m^*\sqrt{q\pi M}} = \frac{8\hbar\sqrt{C_{eff}(V_G - V_t)}}{3m^*\sqrt{q\pi M}} \quad 2.103$$

Η ταχύτητα v_{inj} δεν εξαρτάται από το μήκος της διάταξης L_G , ελέγχεται απόλυτα από την τάση V_G . Το γινόμενο $|Q|v_{inj}$ μπορεί να χρησιμεύσει ως δείκτης για την επίδοση διαφορετικών transistor στην λειτουργία κορεσμού καθώς οι διατάξεις οδηγούνται όλο και πιο κοντά στο όριο της βαλλιστικής μεταφοράς.

Από την εξίσωση (2.94) γίνεται φανερό ότι το ρεύμα κορεσμού εξαρτάται μόνο από την ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στο επίπεδο Fermi της πηγής και στην πρώτη ενεργειακή υποζώνη στο σημείο που η δυναμική ενέργεια του καναλιού είναι μέγιστη. Επίσης αξίζει να σημειωθεί ότι για αρκετά μεγάλα μήκη πύλης L_G , το δυναμικό κάτω από την πύλη παραμένει σταθερό κατά μήκος του καναλιού, όπως επίσης σταθερά παραμένουν η ταχύτητα των φορέων και η συγκέντρωση των ηλεκτρονίων. Ουσιαστικά η αντίσταση του καναλιού τείνει στο μηδέν και οι απώλειες ισχύος της διάταξης εντοπίζονται στις διεπαφές των θερμοδυναμικών reservoir με το κανάλι. Στην περίπτωση των νανοσκοπικών βαλλιστικών διατάξεων μία κατανομή δυναμικού όπως στο σχ. 2.10 είναι πιο κοντά στην πραγματικότητα από την παραπάνω εξιδανικευμένη περίπτωση. Επίσης στο σχ. 2.10 παρουσιάζεται η δισδιάστατη κατανομή ταχυτήτων στο σημείο x_{max} του καναλιού και γίνεται φανερός ο μηχανισμός κορεσμού της ταχύτητας καθώς αυξάνεται η τάση υποδοχής.



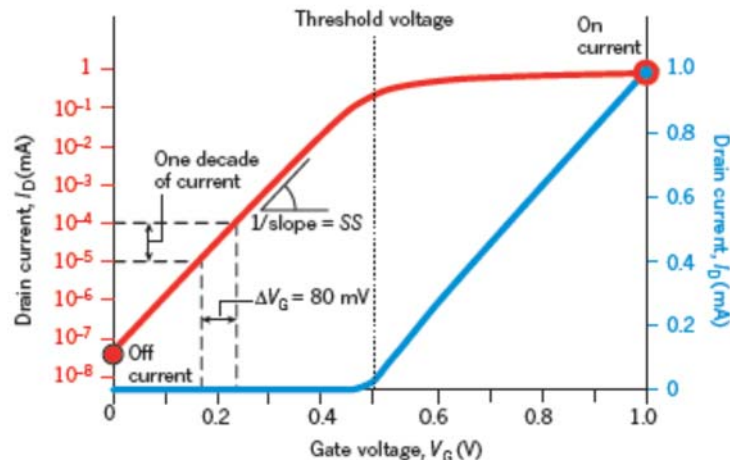
Σχήμα 2.10 Αριθμητική προσομοίωση ενός DG Si MOSFET, $L_G = 10nm$. [13]

3 Αποτελέσματα προσομοίωσης QW-FET με κανάλι ημιαγωγών III-V.

3.1 Αναζητώντας τον τέλειο διακόπτη

Τα τελευταία 50 χρόνια η εκθετική αύξηση της απόδοσης των ηλεκτρονικών έχει βασιστεί στη συνεχή συρρίκνωση των διαστάσεων των CMOS τρανζίστορ. Η μείωση των διαστάσεων αυξάνει την πυκνότητα των διακοπτικών στοιχείων σε ένα chip καθιστώντας το κύκλωμα πιο λειτουργικό, αλλά κυρίως βελτιώνει τα χαρακτηριστικά των CMOS τρανζίστορ που είναι απαραίτητα για τις ψηφιακές εφαρμογές. Χαρακτηριστικά, ένας σύγχρονος μικροεπεξεργαστής περιέχει περισσότερα από δύο δισεκατομμύρια MOSFETs και μία κάρτα μνήμης 32GB με βάρος μόλις 0,5g περιέχει 256 δισεκατομμύρια τρανζίστορ, αριθμός συγκρίσιμος με το πλήθος των άστρων στο Γαλαξία μας.

Σε λογικά μικροκυκλώματα τα MOSFETs χρησιμοποιούνται ως διακόπτες. Ένας ιδανικός διακόπτης εμποδίζει τη διέλευση οποιουδήποτε ρεύματος όταν είναι ανοιχτός (OFF) ενώ επιδεικνύει μηδενική αντίσταση όταν είναι κλειστός (ON) και τέλος είναι ικανός να μεταβαίνει ακαριαία από τη μία κατάσταση στην άλλη. Για τα MOSFETs η πραγματικότητα απέχει από τα ιδανικά αυτά χαρακτηριστικά καθώς το ρεύμα διαρροής δεν είναι μηδενικό, στην κατάσταση ON το ρεύμα διέλευσης είναι περιορισμένο, ενώ και η μετάβαση μεταξύ των δύο καταστάσεων απαιτεί κάποιο χρόνο. Επίσης η μετάβαση δε συμβαίνει σε μία συγκεκριμένη τιμή της τάσης στην πύλη, αλλά γίνεται βαθμιαία καθώς η τάση στην πύλη σαρώνει ένα εύρος τιμών.



Σχήμα 3.1 Οι δύο καμπύλες απεικονίζουν ακριβώς τα ίδια στοιχεία τα οποία έχουν σχεδιαστεί σε γραμμική (μπλε) και σε λογαριθμική κλίμακα (κόκκινο). Πάνω από την τάση κατωφλίου το ρεύμα αυξάνει γραμμικά, ενώ κάτω από την τάση κατωφλίου μειώνεται εκθετικά. [14]

Στο σχήμα 3.1 φαίνεται η καμπύλη $I_D - V_G$ για ένα MOSFET, στον αριστερό κάθετο άξονα η κλίμακα του ρεύματος είναι λογαριθμική ενώ στο δεξιό είναι γραμμική. Βλέπουμε ότι το ρεύμα διαρροής είναι 50pA και το ρεύμα στην κατάσταση ON είναι 1mA. Όταν το ρεύμα σχεδιάζεται σε γραμμική κλίμακα παρατηρούμε ότι από μία τιμή και κάτω, την τάση κατωφλίου V_t , (0.5V στο παράδειγμά μας)

μηδενίζεται. Για τάσεις μεγαλύτερες από την τιμή κατωφλίου το ρεύμα μεταβάλλεται σχεδόν γραμμικά με την τάση. Στη λογαριθμική κλίμακα το ρεύμα κάτω από την τάση κατωφλίου μεταβάλλεται εκθετικά με τη V_G . Ο ρυθμός αύξησης του ρεύματος κάτω από την τάση κατωφλίου χαρακτηρίζεται από την παράμετρο SS (Subthreshold Slope) που ορίζεται από τη σχέση

$$SS = \frac{dV_G}{d(\log(I_D))} \quad 3.1$$

Με μονάδες [mV/(decade of current)]. Μια τυπική τιμή για την SS στα σύγχρονα MOSFETs είναι 80mV/decade, που σημαίνει ότι 80mV αύξηση της V_G έχει ως αποτέλεσμα τον δεκαπλασιασμό του ρεύματος. Έτσι παρατηρώντας το σχήμα για να μεταβούμε από το OFF ρεύμα (50pA) σε ON ρεύμα (100μA) στην τάση κατωφλίου απαιτείται τάση

$$80mV \times \log \frac{100\mu A}{50pA} = 0.5V$$

Επίσης μπορεί να δειχθεί [14] ότι

$$SS = n \frac{k_B T}{q} \ln 10 \quad 3.2$$

Όπου n ο συντελεστής σώματος (body factor) ο οποίος εκφράζει τη μη αποδοτικότητα με την οποία η τάση στην πύλη ελέγχει ηλεκτροστατικά την περιοχή του καναλιού και ορίζεται ως

$$n = \frac{dV_G}{d\Phi_{CH}} \quad 3.3$$

Στην ιδανική περίπτωση $n = 1$ και $\frac{k_B T}{q} \ln 10 = 59.6 \text{ mV/decade}$ σε θερμοκρασία $T = 300K$. Πρακτικά ο συντελεστής n δεν μπορεί να γίνει ποτέ ίσος με μονάδα εξαιτίας της ηλεκτροστατικής σύζευξης του καναλιού με το υπόστρωμα μέσω της περιοχής απογύμνωσης. Έτσι ο συντελεστής n παίρνει τιμές από 1.2 έως 1.5 για τις γνωστές τοπολογίες MOSFET, με αποτέλεσμα η SS να παίρνει τιμές 70-90 mV/decade. Είναι αδύνατον από τους νόμους της θερμοδυναμικής να μειωθεί η τιμή της SS κάτω από 59.6 mV/decade για κλασσικές διατάξεις MOSFET, το καλύτερο που μπορεί να γίνει είναι να προσεγγίσουμε αυτό το όριο με βελτίωση του ηλεκτροστατικού ελέγχου του καναλιού. Το γεγονός ότι η SS δεν μπορεί να μειωθεί κάτω από το παραπάνω όριο είναι θεμελιώδες και για αυτό συχνά αναφέρεται ως "the Boltzmann tyranny".

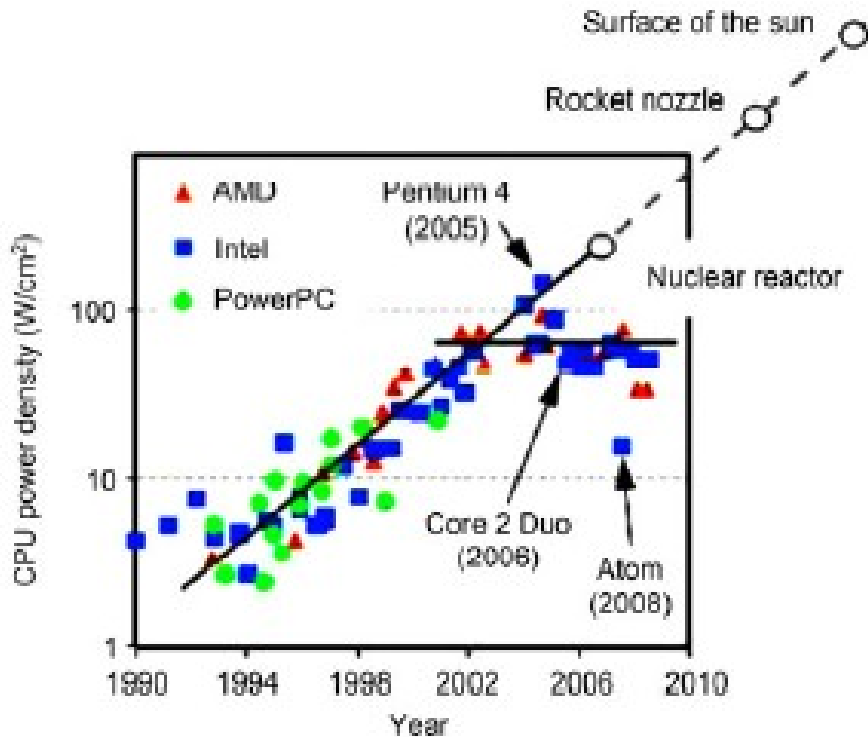
Στο Σχ. 3.2 αναφέρονται τα πλεονεκτήματα στη λειτουργία των MOSFETs που προκύπτουν από τη σμίκρυνσή του. Με τη σμίκρυνση σταθερού ηλεκτρικού πεδίου είναι εφικτή η αύξηση των κυκλωματικών στοιχείων πάνω στο chip, η αύξηση της συχνότητας λειτουργίας και η σταθερή καταναλισκόμενη ισχύς ανά μονάδα επιφάνειας του chip. Στη στρατηγική σμίκρυνσης με σταθερό πεδίο όλες οι φυσικές διαστάσεις μειώνονται κατά ένα παράγοντα λ , όπως επίσης και όλες οι φυσικές διαστάσεις της διάταξης. Ωστόσο η συνεχής μείωση του V_t οδηγεί σε αύξηση του ρεύματος διαρροής κατά την OFF λειτουργία της διάταξης, αν λάβουμε υπόψη μας ότι τα περιθώρια μείωσης της SS είναι φυσικά πεπερασμένα. Έτσι από το 2005 περίπου και ύστερα ακολουθήθηκε η στρατηγική μείωσης του μήκους του καναλιού κρατώντας σταθερή την τάση τροφοδοσίας. Όπως φαίνεται και από τον πίνακα στο σχ. () ακολουθήθηκαν διάφορες εναλλακτικές οι οποίες όμως έχουν ένα βασικό πρόβλημα:

αυξάνουν την καταναλισκόμενη ισχύ ανά μονάδα επιφάνειας σε επίπεδα που ένα σύστημα ψύξης γίνεται πολύ ακριβό είτε διατηρούν την υπολογιστική ικανότητα του συστήματός μας στάσιμη.

	const. Field	const. V			
		max f	const f	const f, N_{tran}	multi core
L_{gate}	λ	λ	λ	λ	λ
W, L_{wire}	λ	λ	λ	1	λ
V	λ	1	1	1	1
C	λ	λ	λ	1	λ
$U_{stor} = \frac{1}{2}CV^2$	λ^3	λ	λ	1	λ
f	$1/\lambda$	$1/\lambda$	1	1	1
$N_{tran}/core$	$1/\lambda^2$	$1/\lambda^2$	$1/\lambda^2$	1	1
N_{core}/A	1	1	1	1	$1/\lambda$
P_{clk}	λ^2	1	λ	1	λ
P/A	1	$1/\lambda^2$	$1/\lambda$	1	1
$f N_{tran} N_{core}$	$1/\lambda^3$	$1/\lambda^3$	$1/\lambda^2$	1	$1/\lambda$

Σχήμα 3.2 Στρατηγικές σμίκρυνσης του MOSFET και οι αντίστοιχες επιπτώσεις στη λειτουργία της διάταξης. [15]

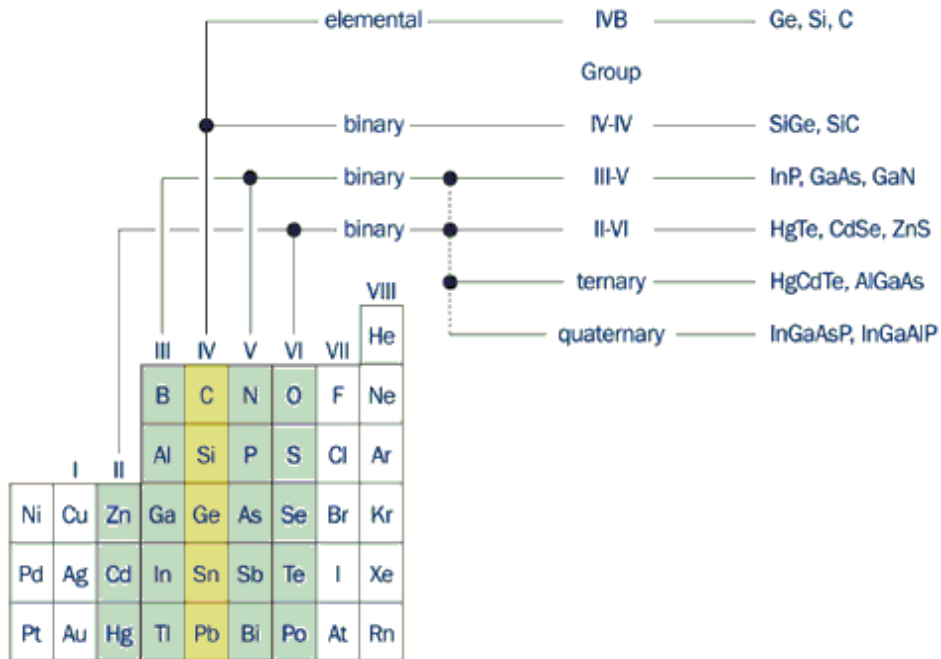
Ο νόμος σμίκρυνσης του Dennard ακολουθήθηκε από τη βιομηχανία των ημιαγωγών μέχρι περίπου το 2005. Πλέον η σμίκρυνση των CMOS τρανζίστορ για ολοκληρωμένα κυκλώματα περιορίζεται εξαιτίας της πολύ υψηλής πυκνότητας καταναλισκόμενης ισχύος ανά μονάδα επιφάνειας πάνω σε ένα chip. Στο Σχ. 3.3 απεικονίζεται η ολοένα αυξανόμενη επιφανειακή πυκνότητα ισχύος. Είναι πλέον αδύνατον να συνεχιστεί η ίδια συνταγή για τη βελτίωση των χαρακτηριστικών των MOSFETs. Περαιτέρω αύξηση της πυκνότητας των τρανζίστορ απαιτεί τη μείωση της τάσης υποδοχής V_{DD} . Ωστόσο μείωση της τάσης V_{DD} επιβάλλει και μείωση της τάσης κατωφλίου V_t κατά τον ίδιο παράγοντα αν θέλουμε να διατηρήσουμε υψηλό λόγο I_{ON}/I_{OFF} . Λόγω του θεμελιώδους κατώτατου ορίου που μπορεί να φτάσει η SS, όμως, μείωση της V_t , συνεπάγεται και αύξηση του ρεύματος διαρροής στην OFF κατάσταση. Έτσι την τελευταία δεκαετία η βιομηχανία των ημιαγωγών στον αγώνα δρόμου που κάνει για όλο και πιο αποδοτικά κυκλώματα έχει φτάσει σε ένα αδιέξοδο. Ένα αδιέξοδο που προσωρινά πήρε παράταση με τη σχεδίαση επεξεργαστών πολλών πυρήνων. Σε ερευνητικό επίπεδο εξετάζονται πολλές εναλλακτικές για τις επόμενες γενιές ηλεκτρονικών υψηλής απόδοσης. Άλλες από αυτές προτείνουν βελτιώσεις στις CMOS διατάξεις και άλλες εισάγουν εντελώς νέες ιδέες.



Σχήμα 3.3 Η εξέλιξη της επιφανειακής πυκνότητας ισχύος στους επεξεργαστές των τελευταίων δεκαετιών.

3.2 Ημιαγωγικές διατάξεις III-V, QW-FETs

Καθώς η εποχή της σμίκρυνσης των διατάξεων από πυρίτιο φτάνει στο τέλος της η προσοχή επικεντρώνεται σε μία οικογένεια υλικών η οποία έχει προδιαγραφές για να αποτελέσει την καρδιά της επόμενης γενιάς των CMOS, στους ημιαγωγούς ενώσεων από στοιχεία των στηλών III-V του περιοδικού πίνακα. Οι III-V ημιαγωγοί όπως οι GaAs, AlAs, InAs, InP και τα ternary και quaternary κράματά τους συνδυάζουν στοιχεία της III και V στήλης. Κάποια από αυτά τα υλικά, κυρίως τα GaAs, InAs και InGaAs επιδεικνύουν εξαιρετικές ιδιότητες μεταφοράς ηλεκτρονίων. Τρανζίστορ από αυτά τα υλικά χρησιμοποιούνται ήδη σε πολλές ηλεκτρονικές εφαρμογές υψηλών ταχυτήτων. Ανάμεσα στα πλεονεκτήματα αυτής της τεχνολογίας είναι το γεγονός ότι υπάρχει ήδη μία ώριμη κατασκευαστική βιομηχανία η οποία κατασκευάζει ολοκληρωμένα κυκλώματα από III-V ημιαγωγούς για ποικίλες εφαρμογές όπως smartphones, radar, δορυφορικές επικοινωνίες, ραδιοαστρονομία και στρατιωτικές εφαρμογές. [16]



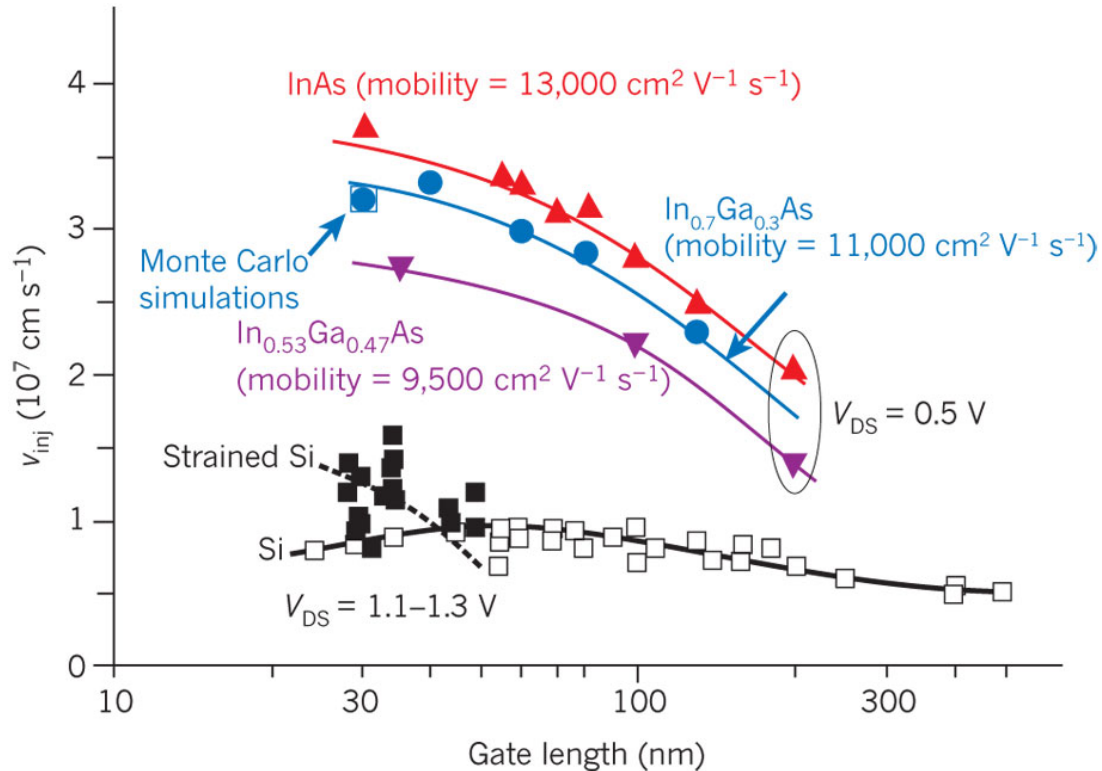
Σχήμα 3.4 Ημιαγωγοί ενώσεων στοιχείων που ανήκουν σε στήλες αριστερά και δεξιά συμμετρικά της IV στήλης.

Σημαντικό χαρακτηριστικό αυτών των υλικών είναι η κινητικότητα των ηλεκτρονίων κάποιων III-V ημιαγωγών. Στο InGaAs και στο InAs η κινητικότητα των ηλεκτρονίων είναι περισσότερο από 10 φορές μεγαλύτερη από την κινητικότητα των ηλεκτρονίων στο πυρίτιο. Σε αυτό το σημείο πρέπει να επισημάνουμε ότι τα III-V QW-FETs καλούνται να αντικαταστήσουν την τεχνολογία πυριτίου σε μία εποχή που μήκη καναλιών της τάξης των 10-20nm θεωρούνται τεχνολογικά εφικτά, επομένως η απόδοσή τους πρέπει να αποτιμηθεί στην περιοχή της βαλλιστικής περιοχής μεταφοράς και να γίνουν οι αντίστοιχες συγκρίσεις με τις διατάξεις πυριτίου. Η μέση ελεύθερη διαδρομή στις πραγματικές διατάξεις είναι διαφορετική από αυτή που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα, καθώς η γειτνίαση των υλικών καναλιού με άλλους ημιαγωγούς επηρεάζει τη δομή των ενεργειακών ζωνών. Πιο συγκεκριμένα αυξάνεται η ενεργός μάζα και υποβαθμίζεται η κινητικότητα. Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται κάποιες πειραματικές τιμές [17] για την κινητικότητα και τη συγκέντρωση φορτίου σε κανάλι InGaAs, για διαφορετικά υλικά στο Barrier layer (InAlAs, AlSbAs) και διαφορετικά βάθη του κβαντικού πηγαδιού (5, 10nm).

Πάχος Πηγαδιού (nm)	Barrier layer	N_s , 300K (10^{12} cm^{-2})	μ , 300K (cm^2/Vs)
10	InAlAs	2.28	9530
10	AlAsSb	2.4	9541
5	InAlAs	2.28	6785
5	AlAsSb	2.13	4777

Στο σχήμα 3.5 καταγράφονται πειραματικές τιμές για την v_{inj} . Για κανάλι InAs η v_{inj} προσεγγίζει την τιμή $4 \times 10^7 \text{ cm/s}$ για τάση $V_{DS} = 0.5V$. Αυτή η τιμή της τάσης έχει επιλεγεί ως σημείο σύγκρισης για διαφορετικές μελλοντικές τεχνολογίες καθώς εξασφαλίζει μία αξιοσημείωτη μείωση στην κατανάλωση ισχύος σε σχέση με τις σημερινές τιμές του 1V. Παρατηρούμε ότι η v_{inj} είναι περισσότερο από δύο

φορές μεγαλύτερη από την αντίστοιχη τιμή για MOSFET πυριτίου, στη μισή μάλιστα τάση V_{DS} . Επίσης από το γράφημα γίνεται φανερό ότι για διατάξεις μικρότερες από 50nm η v_{inj} γίνεται ανεξάρτητη από το μήκος της πύλης, που σημαίνει ότι έχουμε βαλλιστική μεταφορά. Η v_{inj} σε αυτή την περίπτωση, όπως έχουμε αναφέρει και παραπάνω, εξαρτάται μόνο από την ηλεκτρονική δομή του υλικού του καναλιού και πιο συγκεκριμένα από την ενεργό μάζα. Παρατηρούμε επίσης ότι η v_{inj} αυξάνει καθώς αυξάνει η περιεκτικότητα του καναλιού σε InAs, λόγω της μικρότερης ενεργούς μάζας.



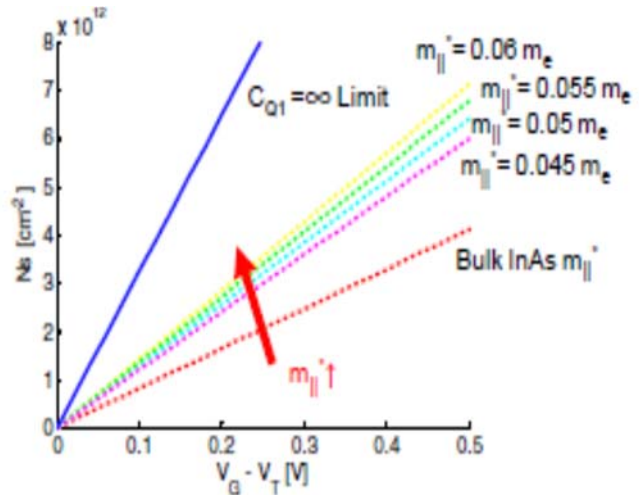
Σχήμα 3.5 Ταχύτητα έγχυσης ηλεκτρονίων, v_{inj} , για κανάλι InAs, InGaAs και Si, ως συνάρτηση του μήκους της πύλης. [16]

Για τα ψηφιακά ηλεκτρονικά υψηλής απόδοσης κυρίαρχο χαρακτηριστικό είναι η v_{inj} αφού σχετίζεται με τον ενδογενή διακοπτικό χρόνο καθυστέρησης (intrinsic switching delay time) σύμφωνα με τη σχέση [18]

$$\tau = \frac{V_{DD} - V_t + (C_f V_{DD} / C_{ox\ inv} L_G)}{[(3 - \delta) / 4] V_{DD} - V_t} \frac{L_G}{v_{inj}} \quad 3.4$$

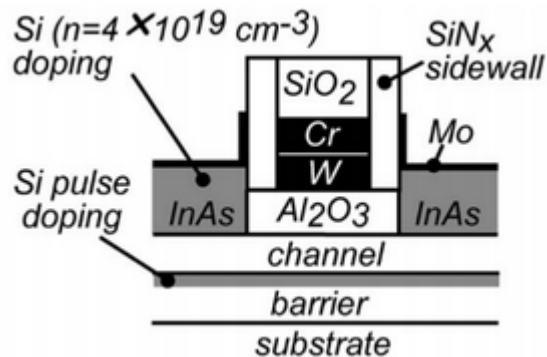
Η επιφανειακή πυκνότητα φορτίου επίσης επηρεάζει το ρεύμα κορεσμού. Έχουν εκφραστεί ανησυχίες ότι λόγω της χαμηλής πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων στους ημιαγωγούς III-V το όφελος της μικρής ενεργούς μάζας εξανεμίζεται [19]. Ωστόσο υπάρχουν αρκετά πειραματικά δεδομένα όπως επίσης και θεωρητικά μοντέλα [20] που φανερώνουν ότι η ενεργός μάζα είναι σημαντικά μεγαλύτερη όταν μετράται στο κβαντικό πηγάδι της ημιαγωγίμης διάταξης σε σχέση με την bulk τιμή της (Σχήμα 3.6).

Ο συνδυασμός υψηλής v_{inj} και ικανοποιητικής πυκνότητας φορτίου στο κανάλι προσδίδει στα InAs, InGaAs QW-FETs το πλεονέκτημα να επιτυγχάνουν εξαιρετικές τιμές στο ρεύμα κορεσμού σε χαμηλές τάσεις τροφοδοσίας, χαρακτηριστικό απαραίτητο για τις επόμενες γενιές CMOS transistors.

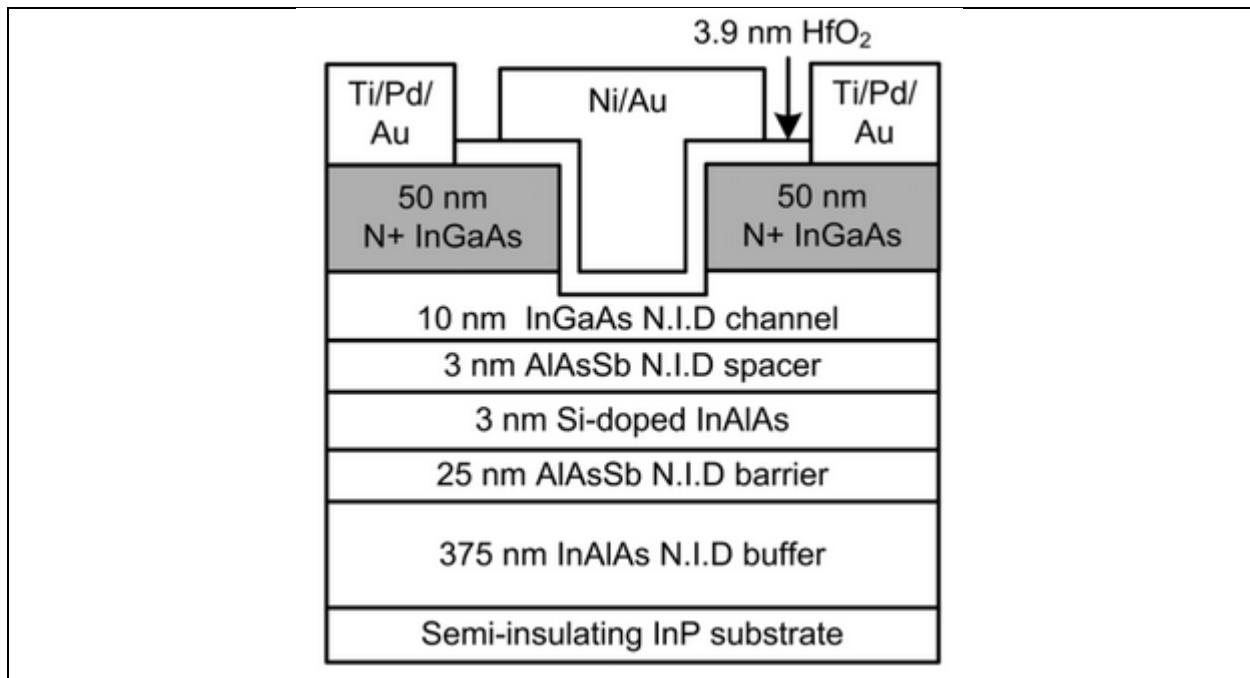


Σχήμα 3.6 Συγκέντρωση φορέων N_S συναρτήσει της τάσης ($V_G - V_t$) για διάταξη με $L_G = 10\text{nm}$ και $t_{ch} = 3\text{nm}$, $t_{ins} = 2.6\text{nm}$, $\epsilon_{oxide} = 25\epsilon_0$. Η αύξηση της ενεργούς μάζας λόγω φαινομένων κβάντωσης και παραμόρφωσης του κρυσταλλικού πλέγματος μπορεί να επιφέρει ικανοποιητική συγκέντρωση επιφανειακού φορτίου. [20]

Παρακάτω παρατίθενται κάποιες από τις προτεινόμενες διατάξεις οι οποίες έχουν κατασκευαστεί από το πειραματικό ερευνητικό group του UCSB [21], [17]. Η αρχιτεκτονική των διατάξεων περιλαμβάνει ισχυρά νοθευμένες επαφές Source-Drain, ένα λεπτό στρώμα ενδογενούς ημιαγωγού III-V που συνιστά το κανάλι του MOSFET και κάτω από το κανάλι μία στρώση νοθευμένου υλικού. Το ηλεκτρικό πεδίο της πύλης ελέγχει τον πληθυσμό των φορέων μέσα στο κανάλι. Η νόθευση κάτω από το κανάλι βοηθάει να παραμένει η διαδρομή των φορέων όσο το δυνατόν πιο καθαρή από κέντρα σκέδασης. Το υλικό που επιλέγεται κάτω από το κανάλι είναι αρκετά μεγαλύτερου ενεργειακού διακένου, έτσι ώστε τα ηλεκτρόνια του καναλιού να εγκλωβίζονται στην κάθετη διεύθυνση της διάταξης (confining layer).



Σχήμα 3.7 Πειραματική διάταξη QW-FET με κανάλι InGaAs. [21]



Σχήμα 3.8 Πειραματική διάταξη με τροποποιημένο *confining layer*. [17]

3.3 Συστήματα εξισώσεων προσομοίωσης ημιαγωγικών διατάξεων.

Για τη μοντελοποίηση μιας ηλεκτρονικής διάταξης επιλέγουμε ένα σύνολο εξισώσεων τα οποία περιγράφουν τα φυσικά φαινόμενα που μας ενδιαφέρουν. Το σύστημα των εξισώσεων που καταρτίζουμε δίνει αυτοσυνεπή λύση για το σύνολο των μεταβλητών που μας ενδιαφέρουν μετά από αριθμητική επίλυσή του.

Σύνολο εξισώσεων Shockley

Το σύνολο εξισώσεων Shockley είναι το πιο απλό σύνολο εξισώσεων. Περιλαμβάνει την εξίσωση Poisson η οποία περιγράφει τη σχέση ανάμεσα στο δυναμικό της διάταξης και την πυκνότητα φορτίου. Ξεκινώντας από το νόμο του Gauss

$$\nabla(\epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}) = \rho \quad 3.5$$

Για ϵ_r μεταβλητό στο χώρο η (3.5) γίνεται

$$\epsilon_0 \epsilon_r \nabla \mathbf{E} + \mathbf{E} \nabla(\epsilon_0 \epsilon_r) = \rho \quad 3.6$$

Αντικαθιστώντας το ηλεκτρικό πεδίο με την παράγωγο του ηλεκτροστατικού δυναμικού και την πυκνότητα φορτίου με τη συγκέντρωση ηλεκτρονίων, οπών και προσμίξεων καταλήγουμε

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (N_D^+ - n + p - N_A^-) - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \nabla(\epsilon_0 \epsilon_r) \nabla \Phi \quad 3.7$$

Ο δεύτερος όρος της (3.7) είναι μηδενικός για ομοιογενείς διατάξεις γίνεται όμως σημαντικός σε διατάξεις που περιλαμβάνουν ετεροεπαφές.

Η εξίσωση συνεχείας (continuity equation) εκφράζει τη διατήρηση του αριθμού των φορέων. Είναι αποτέλεσμα των εξισώσεων του Maxwell. Παίρνουμε την απόκλιση της περιστροφής του μαγνητικού πεδίου και έχουμε από το νόμο του Ampere με την τροποποίηση Maxwell έχουμε

$$\nabla(\nabla \times B) = \nabla \left(\mu_0 J + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial E}{\partial t} \right) = \mu_0 \nabla J + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} [\nabla(\epsilon_0 E)] \quad 3.8$$

Το αριστερό μέλος είναι μηδέν ως απόκλιση περιστροφής και $\nabla(\epsilon_0 E) = \rho$ οπότε

$$\nabla J = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad 3.9$$

Στην εξίσωση (3.9) για τους ημιαγωγούς πρέπει να συμπεριλάβουμε τον ρυθμό δημιουργίας και επανασύνδεσης φορέων οπότε τελικά παίρνουμε τις εξισώσεις

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla J_n + U_n \quad 3.10$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla J_p + U_p \quad 3.11$$

Όπου $U_n = G_n - R_n$ και $U_p = G_p - R_p$ οι όροι δημιουργίας και επανασύνδεσης ηλεκτρονίων και οπών αντίστοιχα. Σε πολλές περιπτώσεις ο όρος δημιουργίας επανασύνδεσης είναι αμελητέος και μπορούμε να τον παραλείψουμε. Στις διατάξεις που ενδιαφέρουν την παρούσα εργασία οι όροι δημιουργίας επανασύνδεσης είναι αμελητέοι και δεν περιλαμβάνονται στην εξίσωση συνεχείας.

Η τρίτη εξίσωση του συστήματος είναι η εξίσωση ολίσθησης-διάχυσης για τον υπολογισμό του ρεύματος που δίνεται από την (2.67) και την ισοδύναμη μορφή της που χρησιμοποιεί τα Quasi-Fermi levels (2.65). Είμαστε τώρα σε θέση να γράψουμε ένα επιλύσιμο σύστημα για τη steady-state κατάσταση.

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (N_D^+ - n + p - N_A^-) - \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \nabla(\epsilon_0 \epsilon_r) \nabla \Phi \quad 3.12a$$

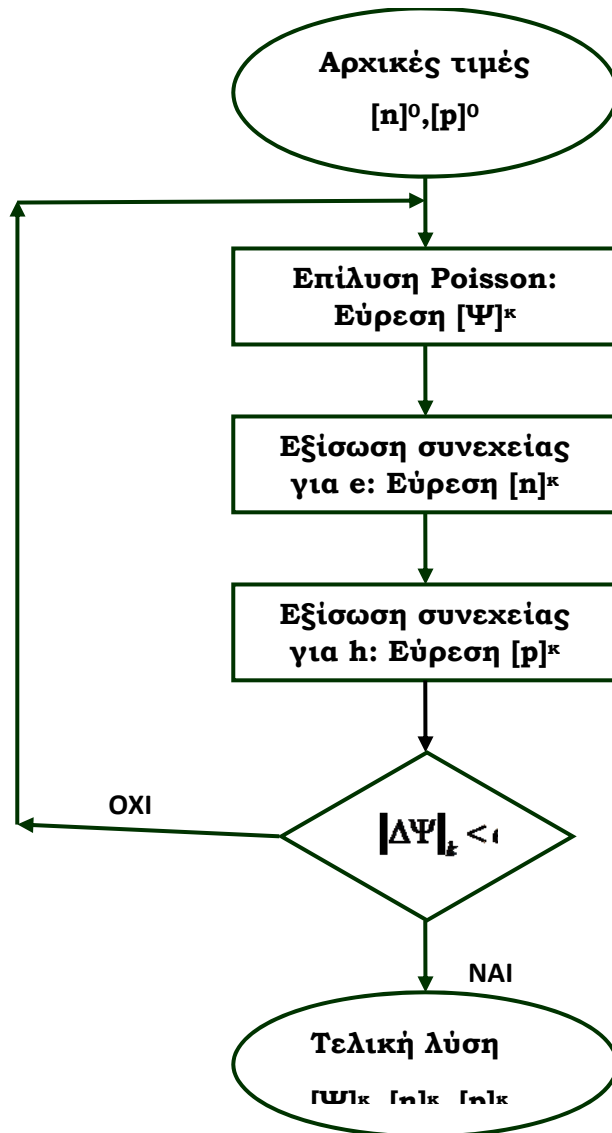
$$\nabla J_n = 0 \quad 3.13b$$

$$\nabla J_p = 0 \quad 3.14c$$

$$J_p = e\mu_p p \nabla \Phi + e p \nabla \rho \quad 3.15d$$

$$J_n = -e\mu_n n \nabla \Phi + e D_n \nabla n \quad 3.16e$$

Το Σχ. 21 απεικονίζει την επαναληπτική διαδικασία της αριθμητικής επίλυσης του παραπάνω συστήματος εξισώσεων. Η κατανομή του δυναμικού της διάταξης υπολογίζεται σύμφωνα με την (3.12a) με βάση μία αρχική εκτίμηση της κατανομής φορτίου. Στη συνέχεια υπολογίζονται τα Quasi-Fermi levels. Με βάση τα Quasi-Fermi levels και την κατανομή δυναμικού επανυπολογίζεται η πυκνότητα φορτίου και περνάει ως είσοδος στην επόμενη επανάληψη. Ως συνθήκη τερματισμού του βρόχου μπορεί να χρησιμοποιηθεί το σχετικό σφάλμα δύο διαδοχικών επαναλήψεων οποιασδήποτε μεταβλητής του συστήματος εξισώσεων.

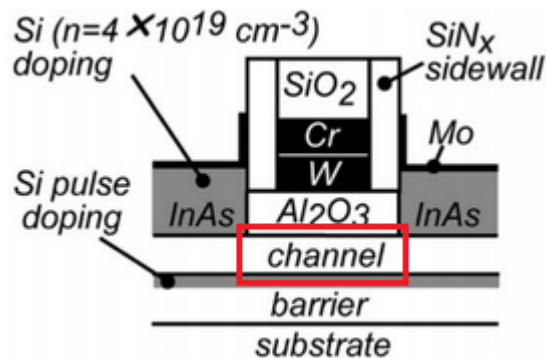


Σχήμα 3.9 Επαναληπτικός βρόχος του συστήματος εξισώσεων Shockley. [22]

Το κλασικό σετ εξισώσεων φτάνει στα όριά του όταν έχουμε να αντιμετωπίσουμε διατάξεις νανοσκοπικών διαστάσεων. Δε λαμβάνει υπόψη κβαντομηχανικά φαινόμενα που αφορούν τη συγκέντρωση φορέων στο χώρο.

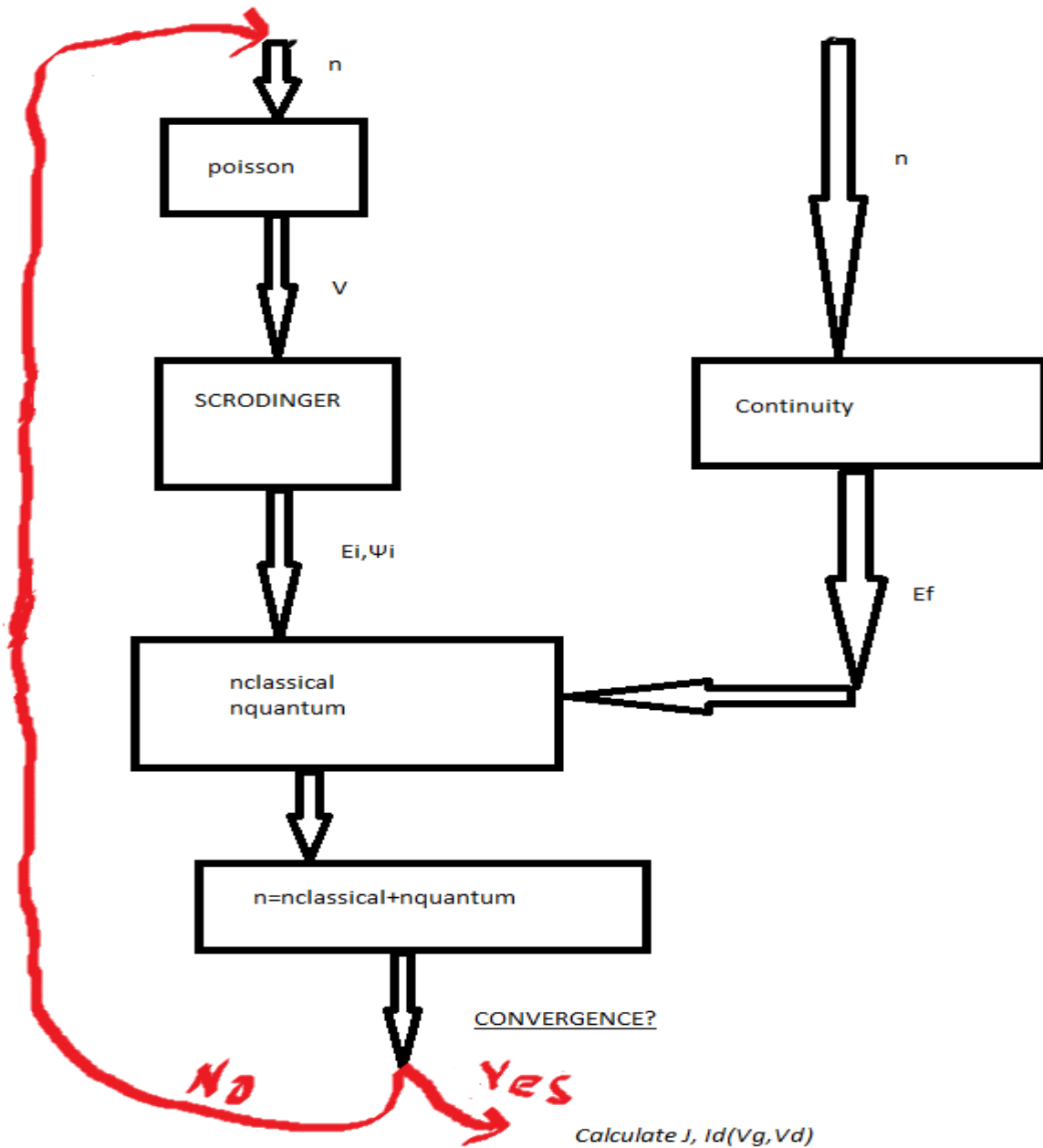
Ημικλασικό σετ εξισώσεων

Το ημικλασικό σετ εξισώσεων περιγράφει τα φαινόμενα κβάντωσης των καταστάσεων των ηλεκτρονίων μέσα στο κβαντικό πηγάδι των QW-FETs. Σε αυτό το σύνολο εξισώσεων τα φαινόμενα μεταφοράς φορέων συνεχίζουν να προσομοιώνονται από την ημικλασική θεωρία που αναπτύχθηκε στην αρχή του δεύτερου κεφαλαίου. Η διάταξη χωρίζεται σε δύο περιοχές. Η μία περιοχή είναι το QW. Το κλασικό σύνολο τροποποιείται ώστε να περιγράφονται τα κβαντομηχανικά φαινόμενα. Η υπόλοιπη περιοχή της διάταξης περιγράφεται ικανοποιητικά χωρίς την εισαγωγή νόμων της κβαντομηχανικής και επιλύεται με το κλασικό σύνολο εξισώσεων. Οι δύο περιοχές της διάταξης απεικονίζονται στο Σχ. 3.10 για την πειραματική διάταξη [21].



Σχήμα 3.10 Το κβαντικό πηγάδι της διάταξης [21].

Η αριθμητική επίλυση της διάταξης στην περιοχή του κβαντικού πηγαδιού ακολουθεί την επαναληπτική διαδικασία που απεικονίζεται στο Σχ. 3.11. Η κατανομή του δυναμικού προσδιορίζεται από την εξίσωση Poisson με βάση την αρχική τιμή της πυκνότητας φορτίου. Επίσης με βάση το αρχικό φορτίο υπολογίζονται τα Quasi-Fermi levels από την continuity. Το δυναμικό που υπολογίστηκε εισάγεται στην εξίσωση Schrödinger και υπολογίζονται οι δέσμιες ιδιοκαταστάσεις και ιδιοενέργειες του κβαντικού πηγαδιού. Χρησιμοποιώντας τα Quasi-Fermi levels υπολογίζεται η πυκνότητα των φορέων που εγκλωβίζονται στις δέσμιες καταστάσεις του πηγαδιού (n_{quantum}) από τη σχέση (1.80) και η πυκνότητα των φορέων που βρίσκονται σε μη δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις (n_{classical}) από τη σχέση (2.43).



Σχήμα 3.11 Η επαναληπτική διαδικασία επίλυσης του ημικλασικού σει εξισώσεων στην περιοχή του κβαντικού πηγαδιού της διάταξης.

Η μέθοδος Bohm Quantum Potential (BQP)

Υπάρχουν αρκετές διαφορετικές τροποποιήσεις στο κλασσικό σύστημα εξισώσεων για να μπορούμε να συμπεριλάβουμε κβαντομηχανικά φαινόμενα χωρίς να επιλύουμε την εξίσωση Schrödinger. Η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger είναι από υπολογιστικής άποψης μία βαριά εργασία. Για αυτό για λόγους αποδοτικότητας των αλγορίθμων προσομοίωσης χρησιμοποιούνται τροποποιήσεις των κλασσικών εξισώσεων όταν θέλουμε να εκτιμήσουμε κβαντικές επιδράσεις στις διατάξεις ([23], Κεφ. 13). Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζουμε τα βασικά σημεία μίας εξ αυτών των τροποποιήσεων, της Bohm Quantum Potential (BQP). Η μέθοδος αυτή έχει χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή αποτελεσμάτων της επόμενης ενότητας με χρήση των αλγορίθμων του εμπορικού πακέτου προσομοίωσης ημιαγωγικών διατάξεων Silvaco Atlas. Θεωρούμε την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad 3.17$$

Η κυματοσυνάρτηση στη γενική περίπτωση είναι μία μιγαδική συνάρτηση και μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = R(\mathbf{r}, t) \exp(iS(\mathbf{r}, t)/\hbar) \quad 3.18$$

Όπου R το μέτρο της κυματοσυνάρτησης με φυσικές μονάδες $m^{-\frac{d}{2}}$, d οι διαστάσεις του προβλήματος, και S/\hbar η φάση. Η συνάρτηση S έχει μονάδες ίδιες με τη σταθερά του Planck [Js]. Εισάγοντας την έκφραση (3.18) στην (3.17) και εξισώνοντας πραγματικά και φανταστικά μέρη των δύο μελών της εξίσωσης (3.17) παίρνουμε [23]

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{1}{2m} [R\nabla^2 S + 2(\nabla R)(\nabla S)] \quad 3.19$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\left[\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \right] \quad 3.20$$

Είναι βολικό να γράψουμε $P(x) = R^2(x)$ ή ισοδύναμα $R(x) = P^{\frac{1}{2}}(x)$ όπου $P(x) = |\Psi(x)|^2$ η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας. Τότε οι εξισώσεις (3.19), (3.20) γράφονται

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \left(P \frac{\nabla S}{m} \right) = 0 \quad 3.21$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\nabla^2 P}{P} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla P)^2}{P^2} \right] = 0 \quad 3.22$$

Στο κλασσικό όριο $\hbar = 0$ η εξίσωση (3.22) είναι μία εξίσωση Hamilton Jacobi και η συνάρτηση S είναι μία λύση της. Είναι γνωστό από την αναλυτική μηχανική ότι σε αυτή την περίπτωση η ταχύτητα του σωματιδίου που βρίσκεται στο πεδίο του συστήματός μας είναι $\nabla S/m$. Η εξίσωση (3.21) μπορεί τότε να γραφτεί $\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla(Pv) = 0$ η οποία είναι μία εξίσωση διατήρησης της πιθανότητας. Όταν

απομακρυνόμαστε από το κλασικό όριο μπορούμε να υποθέσουμε ότι το ηλεκτρόνιο υπόκειται σε ένα δυναμικό το οποίο εκτός από τον όρο $V(x)$ που οφείλεται στο ηλεκτρικό πεδίο περιέχει και ένα «κβαντομηχανικό δυναμικό»

$$U(x) = -\frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\nabla^2 P}{P} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla P)^2}{P^2} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R}{R} \quad 3.23$$

Τότε η εξίσωση (3.22) παραμένει μία εξίσωση Hamilton Jacobi, θα ισχύει επίσης $\mathbf{v} = \frac{\nabla S}{m}$ και η εξίσωση (3.21) θα συνεχίζει να είναι μία εξίσωση διατήρησης της πιθανότητας. Ολοκληρώνοντας τη συνάρτηση της ταχύτητας μπορούμε να βρούμε ένα σύνολο δυνατών τροχιών. Η θεωρία του Bohm δίνει μία διαφορετική ερμηνεία στην κβαντομηχανική. Τα σωματίδια έχουν καθορισμένες τροχιές και ο πιθανοκρατικός χαρακτήρας της κβαντομηχανικής δεν είναι εγγενής. Σκοπός αυτής της εργασίας δεν είναι να μπούμε σε μία πιο λεπτομερειακή συζήτηση των θεμελίων της κβαντομηχανικής. Είναι γενικά παραδεκτό ότι η θεωρία του Bohm δίνει αποτελέσματα συνεπή με τις προβλέψεις της καθιερωμένης κβαντομηχανικής θεωρίας, αν και εν μέρει αμφισβητείται η ερμηνεία που προτείνει για τον πιθανοκρατικό χαρακτήρα της κβαντομηχανικής, και το γεγονός αυτό χρησιμοποιούμε στη μέθοδο προσομοίωσης BQP.

Έτσι τα κβαντομηχανικά φαινόμενα μπορούν να ληφθούν υπόψη από τις κλασικές εξισώσεις αν στη δύναμη που δέχονται τα ηλεκτρόνια συμπεριλάβουμε και τη δύναμη που οφείλεται στο κβαντομηχανικό δυναμικό. Για παράδειγμα η εξίσωση ολίσθησης διάχυσης τροποποιείται στην (3.24)

$$J_n = -e\mu_n n \nabla(\Phi + U) + eD_n \nabla n \quad 3.24$$

Η εξίσωση (3.24) μπορεί να λυθεί αυτοσυνεπώς μαζί με τις υπόλοιπες εξισώσεις του κλασικού συστήματος αν στο κβαντομηχανικό δυναμικό η συνάρτηση $R(x) = P^{\frac{1}{2}}(x)$ αντικατασταθεί από μία συνάρτηση της πυκνότητας ηλεκτρονίων. Ορίζουμε το δυναμικό

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2} \gamma \frac{\nabla[M^{-1}\nabla(n^\alpha)]}{n^\alpha} \quad 3.25$$

Όπου γ και α παράμετροι. Οι παράμετροι γ και α δίνονται από τις αναλυτικές εκφράσεις (3.26), (3.27) [24]. Στους αλγορίθμους Silvano οι παράμετροι αυτές προσδιορίζονται από το χρήστη μετά από μία διαδικασία συνταιριάσματος της πυκνότητας ηλεκτρονίων στη διάταξη, όπως αυτή προκύπτει από το σύστημα εξισώσεων Schrödinger Poisson και από το τροποποιημένο κλασικό σύστημα εξισώσεων.

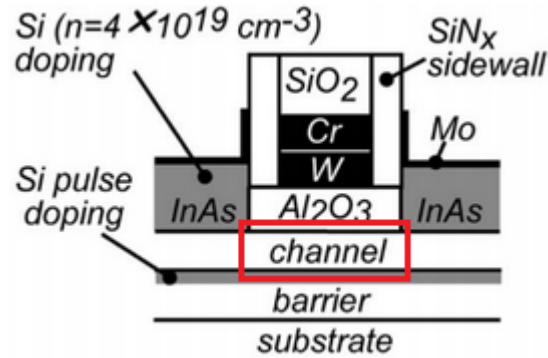
$$\alpha \equiv 1 - \frac{1}{2} \frac{\sum_i f_i R_i^2}{\sum_i f_i \nabla R_i^2 \cdot \sum_i f_i \nabla [M^{-1}(R_i^2)]} \sum_i \frac{f_i \nabla(R_i^2) M^{-1} \nabla(R_i^2)}{R_i^2} \quad 3.26$$

$$\gamma \equiv \frac{\sum_i \nabla [M^{-1} \nabla (f_i R_i^2)]}{\nabla [M^{-1} \nabla (\sum_i f_i R_i^2)]} \quad 3.27$$

Όπου έχουμε χρησιμοποιήσει ότι $n = \sum_i f_i R_i^2$ (1.80). Ωστόσο οι (3.26) και (3.27) δεν υπεισέρχονται στην αριθμητική προσομοίωση καθώς το νόημα των μεθόδων τροποποίησης των κλασικών εξισώσεων είναι να μην επιλυθεί η εξίσωση Schrödinger. Η διαδικασία του συνταιριάσματος (fitting) μας απαλλάσσει από την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger. Ωστόσο οι διαδικασίες συνταιριάσματος γραφικών παραστάσεων αφενός περιέχουν ανθρώπινα σφάλματα, αφετέρου είναι επίσης κοπιαστικές και χρονοβόρες.

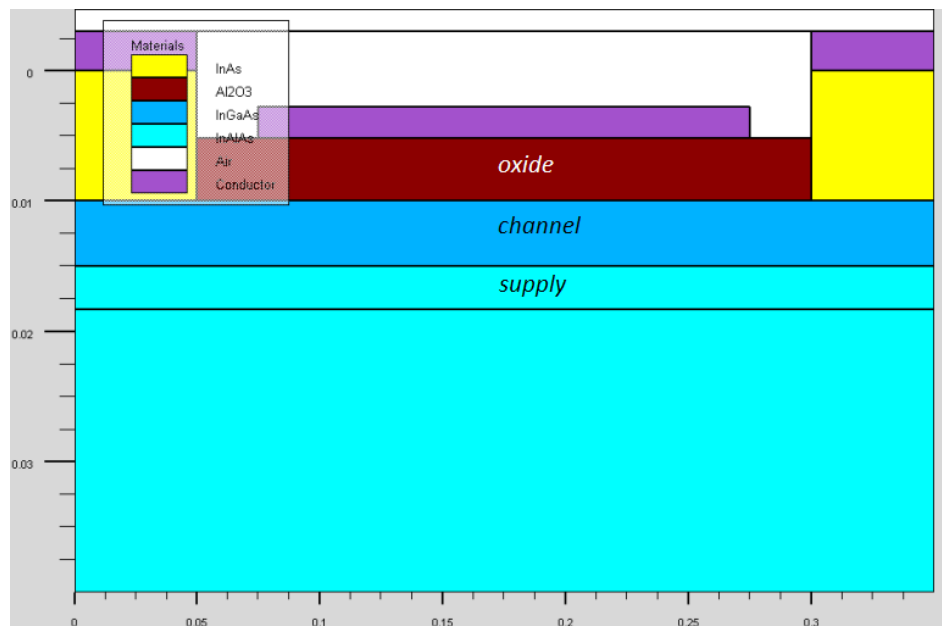
3.4 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Η υπό εξέταση διάταξη είναι αυτή που απεικονίζεται στο Σχ. 3.12. Η νόθευση των Source/Drain είναι $N_D = 4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Το μήκος της πύλης είναι $L_G = 200 \text{ nm}$, ενώ τα μήκη των επαφών είναι 50 nm . Το βάθος του καναλιού είναι 5 nm και ακολουθείται από ένα πολύ λεπτό υπερνοθευμένο στρώμα (supply layer) 3.3 nm , $N_D = 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Το υλικό των επαφών της διάταξης είναι InAs, το κανάλι είναι από InGaAs και κάτω από το κανάλι έχουμε InAlAs. Το πάχος του οξειδίου Al_2O_3 είναι $t_{\text{ox}} = 5.3 \text{ nm}$.

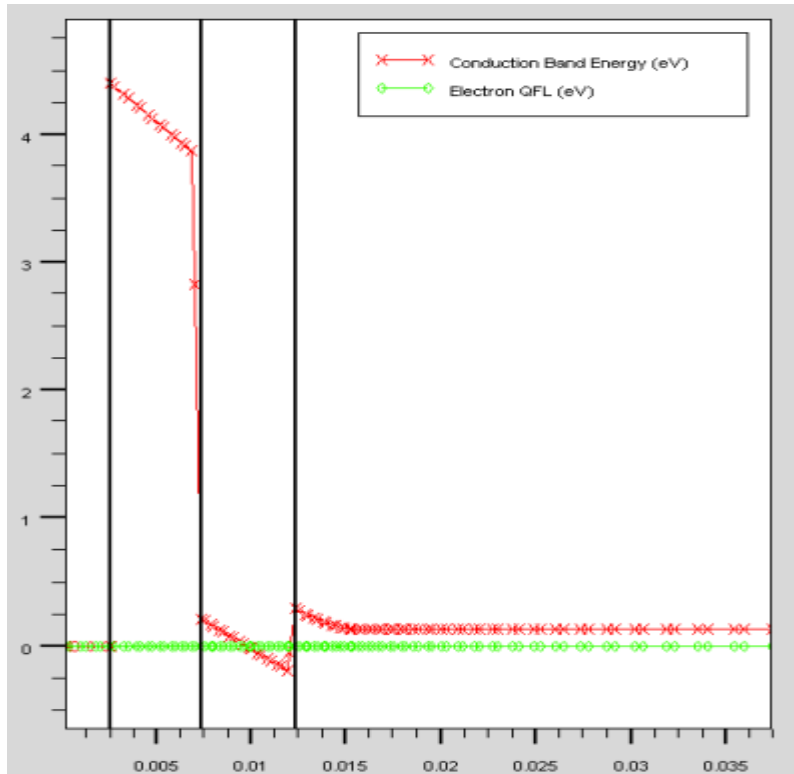


Σχήμα 3.12 Πειραματική διάταξη του ερευνητικού group του UCSB. [21]

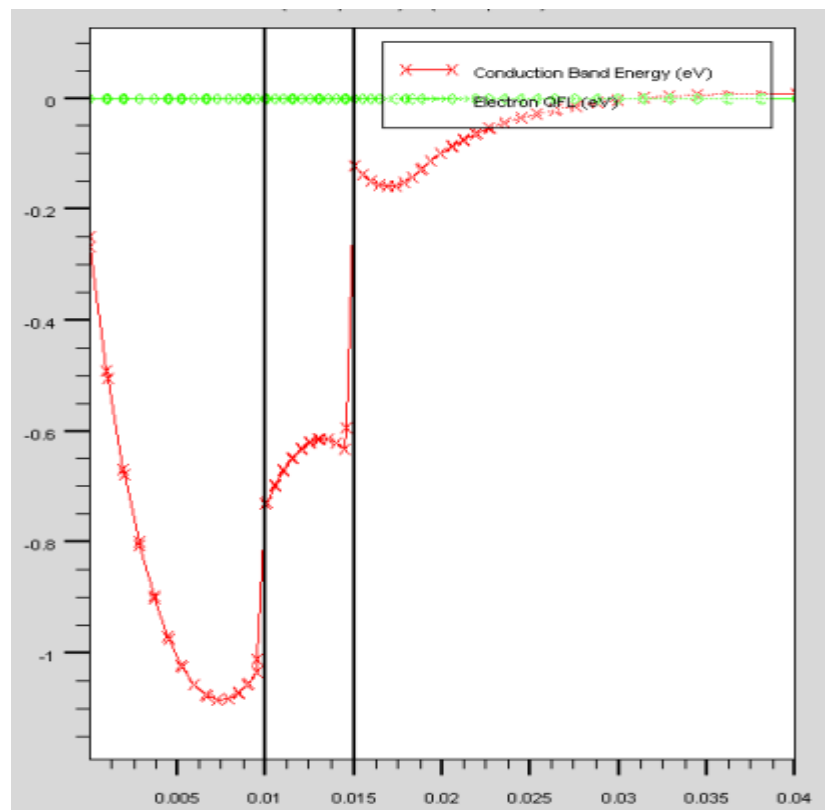
Η διάταξη προσομοιώθηκε τόσο με αλγορίθμους προσομοίωσης που αναπτύχθηκαν κατά τη διδακτορική διατριβή του Γρηγόρη Κροκίδη [22] και προσαρμόστηκαν από την υποψήφια διδάκτορα Αργυρώ Γκύλη και το συγγραφέα της διπλωματικής εργασίας (στο εξής θα αναφέρεται ως εργαστηριακό πρόγραμμα προσομοίωσης), όσο και με αλγορίθμους του εμπορικού πακέτου Silvaco Atlas. Στο σχήμα 3.13 φαίνεται η διάταξή μας. Τα σχήματα 3.14 και 3.15 απεικονίζουν την κατανομή του δυναμικού και το επίπεδο Fermi στη διεύθυνση του βάθους της διάταξης στη μέση της πύλης και της πηγής σε συνθήκες μηδενικής εξωτερικής πόλωσης της διάταξης.



Σχήμα 3.13 Η διάταξη της προσομοίωσης.

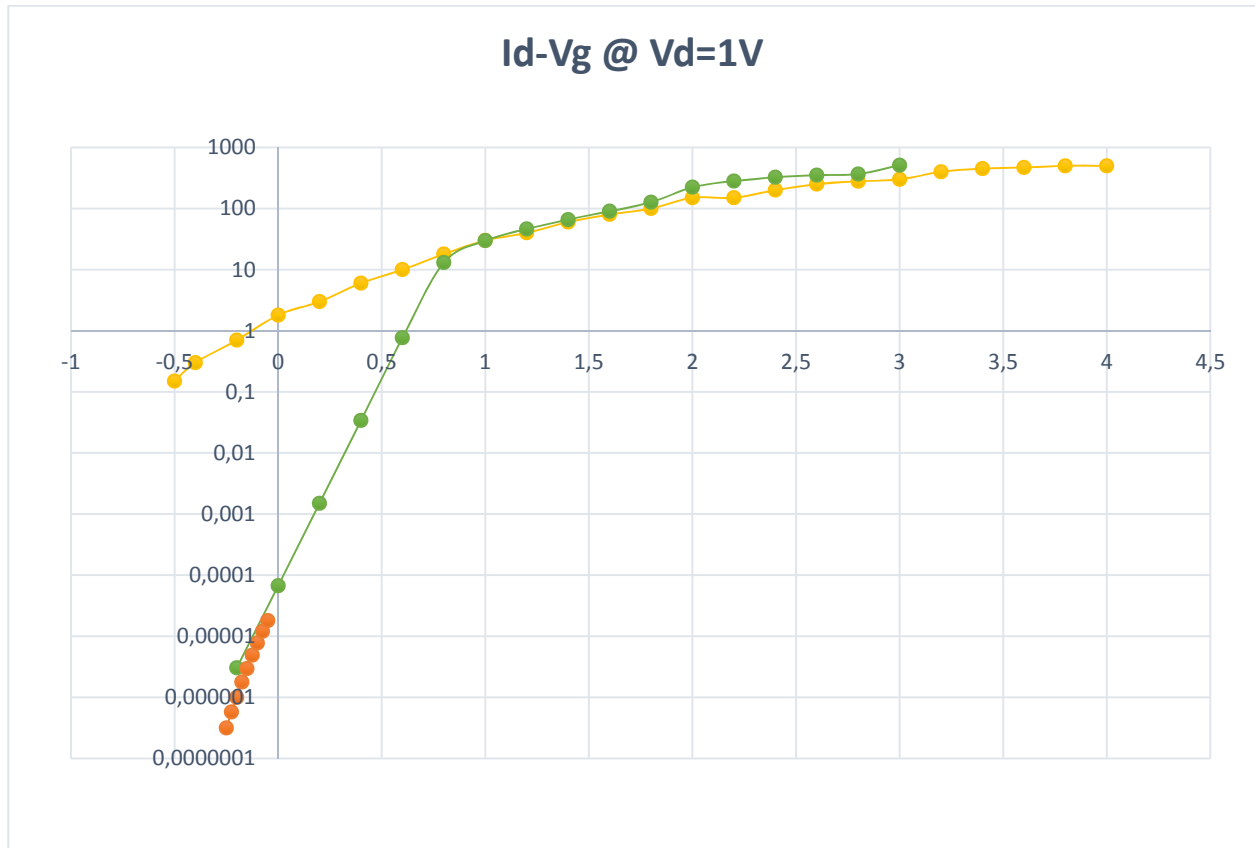


Σχήμα 3.14 Η κατανομή δυναμικού κατά βάθος στη μέση της πύλης (κόκκινο), η στάθμη E_f (πράσινο).



Σχήμα 3.15 Η κατανομή δυναμικού κατά βάθος στη μέση της πηγής (κόκκινο), η στάθμη E_f (πράσινο).

Σκοπός των προγραμμάτων προσομοίωσης είναι να μπορούν να προβλέψουν την ακριβή συμπεριφορά της διάταξης. Στο Σχ. 3.16 παρουσιάζεται η καμπύλη I_d-V_g για $V_d=1V$. Η κλίση υποκατωφλίου είναι $500mV/dec$ σύμφωνα με τα πειραματικά δεδομένα, $137mV/dec$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα της Silvaco $147mV/dec$ σύμφωνα με τα αποτελέσματα του εργαστηριακού προγράμματος. Η πειραματική τιμή της SS αποτελεί μία πολύ κακή επίδοση για τρανζιστορ που προορίζεται για λογικές εφαρμογές. Έτσι αναζητήσαμε μέσω των προγραμμάτων προσομοίωσης τις αιτίες ενός τόσο μεγάλου OFF ρεύματος.

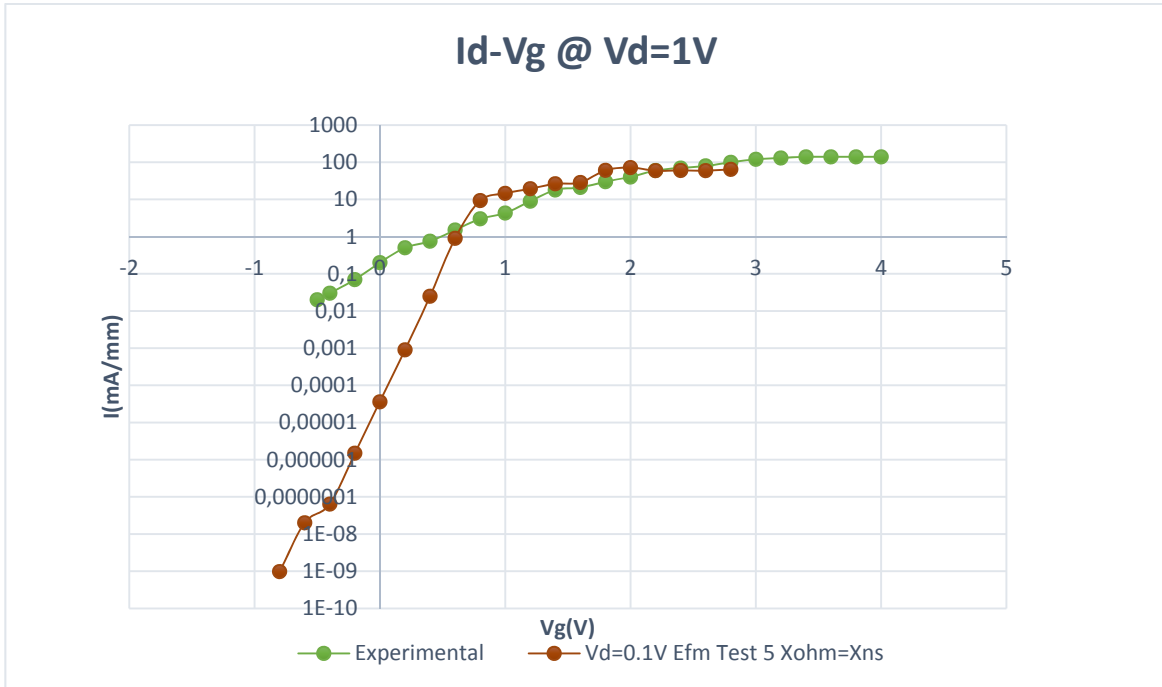


Σχήμα 3.16 Καμπύλη I_d-V_g για $V_d=1V$. Η πειραματική καμπύλη είναι το κίτρινο, η καμπύλη της εργαστηριακής προσομοίωσης είναι το πράσινο και η καμπύλη BQP είναι το πορτοκαλί.

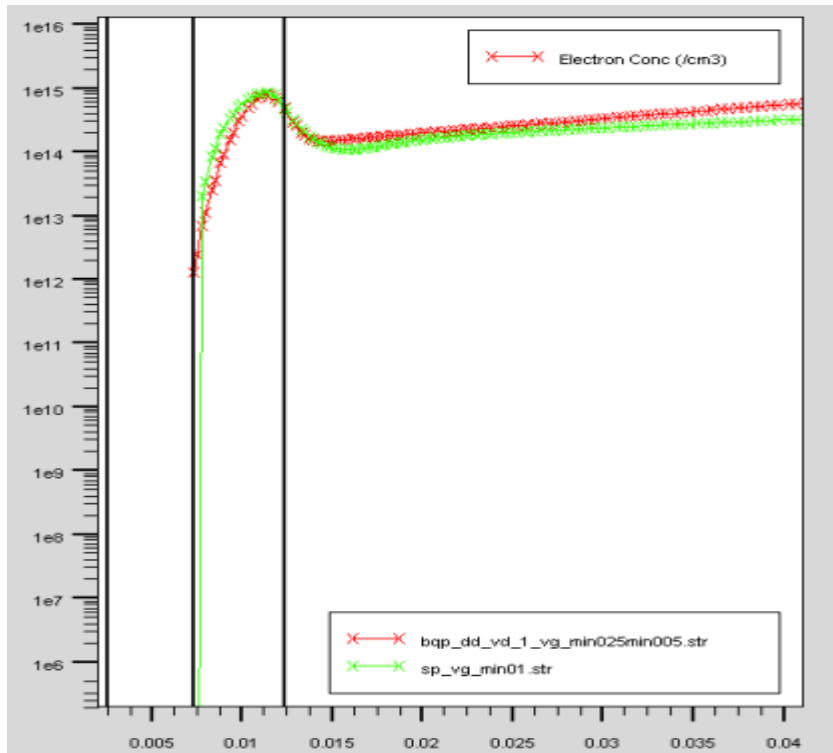
Bqp SS	137mV/dec
Εργαστηριακή SS	147mV/dec
Experimental SS	500mV/dec

Στα σχήματα 3.18, 3.19 φαίνεται η ακρίβεια με την οποία έγινε το fitting της πυκνότητας ηλεκτρονίων που προκύπτει με τη μέθοδο BQP και με την επίλυση της Schrödinger-Poisson. Η διαδικασία fitting έγινε για τάσεις πύλης στην περιοχή του $-0.1V$. Οι σύμφωνες τιμές της εργαστηριακής και της BQP προσομοίωσης οδηγούν στο συμπέρασμα ότι είτε κάποιο φυσικό φαινόμενο δεν έχει μοντελοποιηθεί είτε κάποια λεπτομέρεια της διάταξης έχει παραλειφθεί. Για μεγάλες τιμές της τάσης πύλης τα αποτελέσματα της εργαστηριακής προσομοίωσης συγκλίνουν με ικανοποιητική ακρίβεια με τα

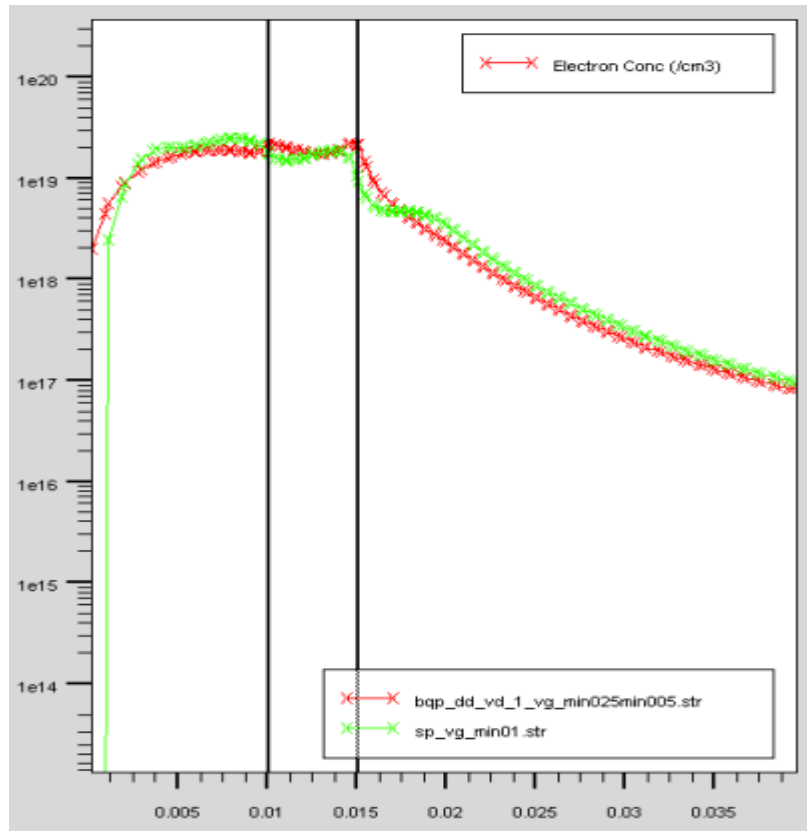
πειραματικά δεδομένα. Το ρεύμα κορεσμού που επιτυγχάνεται είναι 490mA/mm. Για διαφορετικές τιμές της τάσης πύλης η διαδικασία fitting που απαιτείται για τις προσομοιώσεις BQP πρέπει να γίνεται εκ νέου. Όπως ήδη αναφέραμε πρόκειται για μία πολύ χρονοβόρα διαδικασία που δεν κρίθηκε σκόπιμο να γίνει παρά μόνο για την περιοχή υποκατωφλίου.



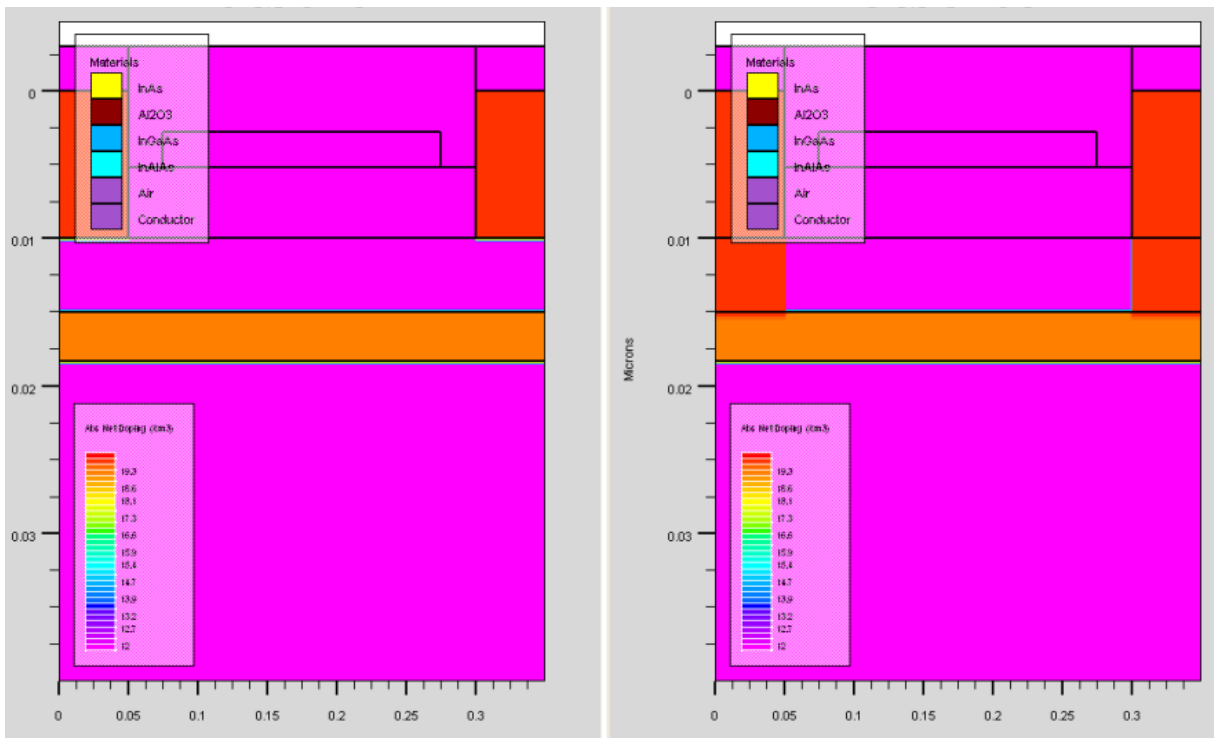
Σχήμα 3.17 Καμπύλη I_d-V_g για $V_d=0.1V$. Η πειραματική καμπύλη είναι η πράσινη, η εργαστηριακή προσομοίωση είναι η καφέ.



Σχήμα 3.18 Η πράσινη καμπύλη παριστάνει την πυκνότητα φορτίου ως αποτέλεσμα επίλυσης της Schrödinger Poisson, η κόκκινη καμπύλη παριστάνει την πυκνότητα φορτίου ως αποτέλεσμα των κλασικών εξισώσεων με την τροποποίηση BQP. Αυτή η πυκνότητα φορτίου είναι κατά το βάθος της διάταξης στο μέσο της.



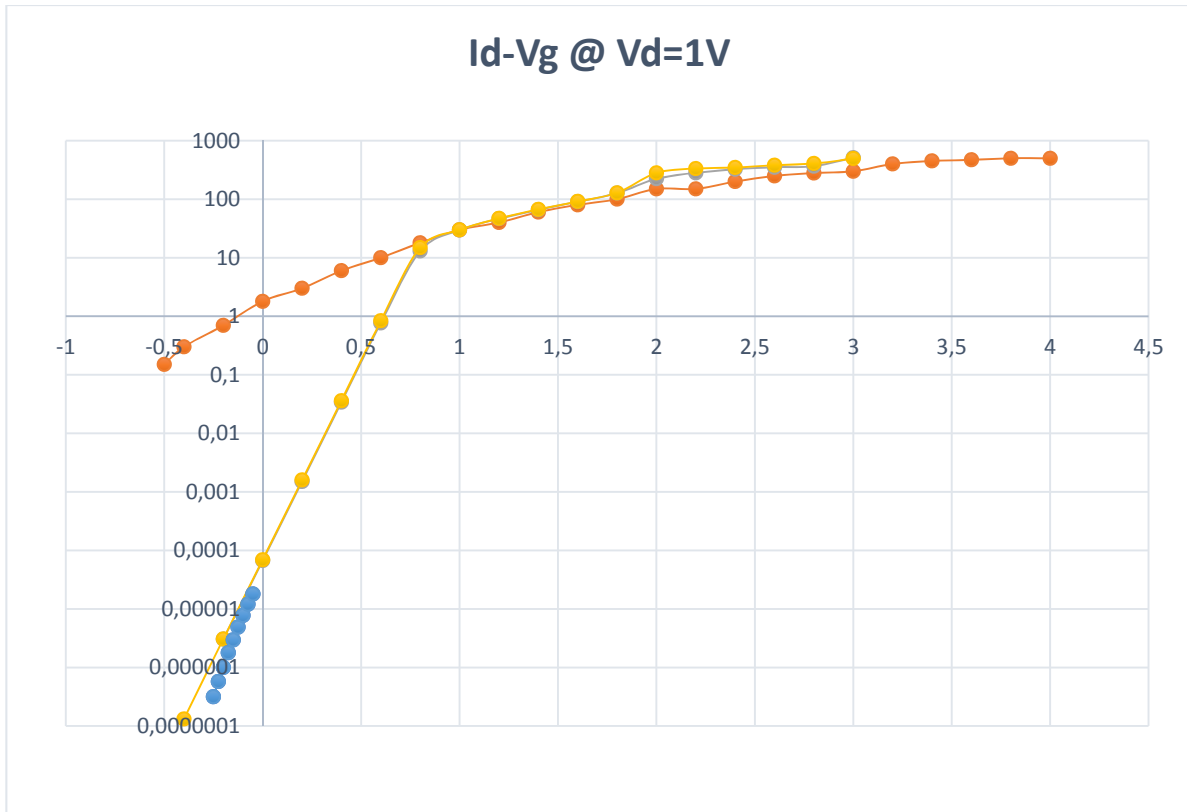
Σχήμα 3.19 Η πράσινη καμπύλη παριστάνει την πυκνότητα φορτίου ως αποτέλεσμα επίλυσης της *Schrödinger Poisson*, η κόκκινη καμπύλη παριστάνει την πυκνότητα φορτίου ως αποτέλεσμα των κλασικών εξισώσεων με την τροποποίηση *BQP*. Αυτή η πυκνότητα φορτίου είναι κατά το βάθος της διάταξης στο μέσο της πηγής.



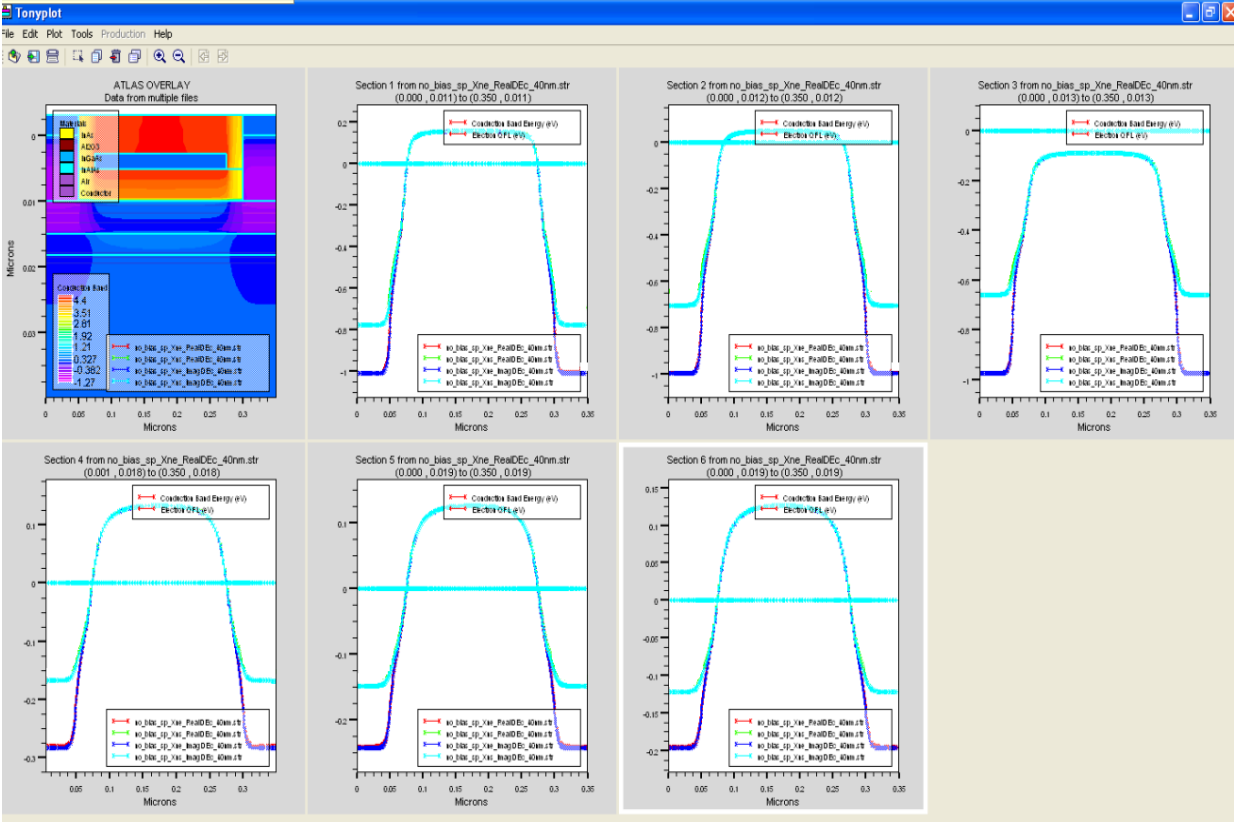
Σχήμα 3.20 Οι διαβαθμίσεις του χρώματος παριστάνουν το μέγεθος της νόθευσης. Οι δύο εικόνες δείχνουν τη διάταξη που προσομοιώθηκε αρχικά και την τροποποιημένη.

Η πειραματική διάταξη περιλάμβανε κάποιες ατέλειες που αφορούν τον έλεγχο του βάθους του Doping Profile [21]. Προσομοιώσαμε λοιπόν τη διάταξη με την τροποποίηση οι δότες στην πηγή και στην υποδοχή να φτάνουν μέχρι το τέλος του καναλιού Σχ. 3.20.

Τα αποτελέσματα της δεύτερης προσομοίωσης Σχ. 3.21 δείχνουν ότι οι γραφικές I_d - V_g παραμένουν αναλλοίωτες. Το αποτέλεσμα αυτό εξηγείται καθώς η σχετική θέση του QFL και του μέγιστου της ζώνης αγωγιμότητας παραμένει σταθερή σε όλα τα βάρη της διάταξης Σχ. 3.22.



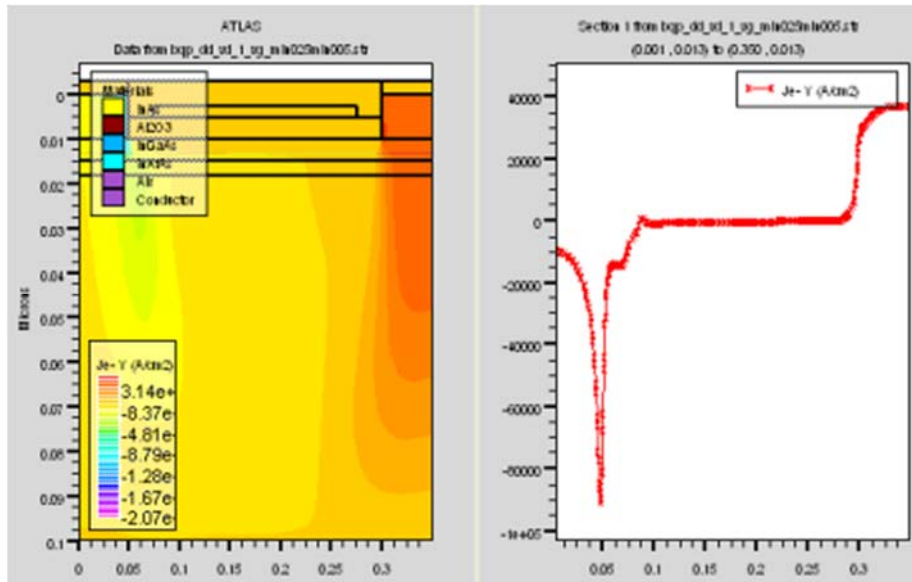
Σχήμα 3.21 Στο σχήμα απεικονίζονται 5 καμπύλες. Η πορτοκαλί είναι η πειραματική. Η κίτρινη είναι η εργαστηριακή προσομοίωση η οποία είναι ίδια για προφίλ νόθευσης μέχρι την αρχή του καναλιού και για προφίλ νόθευσης μέχρι το τέλος του καναλιού. Ομοίως η γαλάζια είναι η προσομοίωση BQP για τις δύο περιπτώσεις.



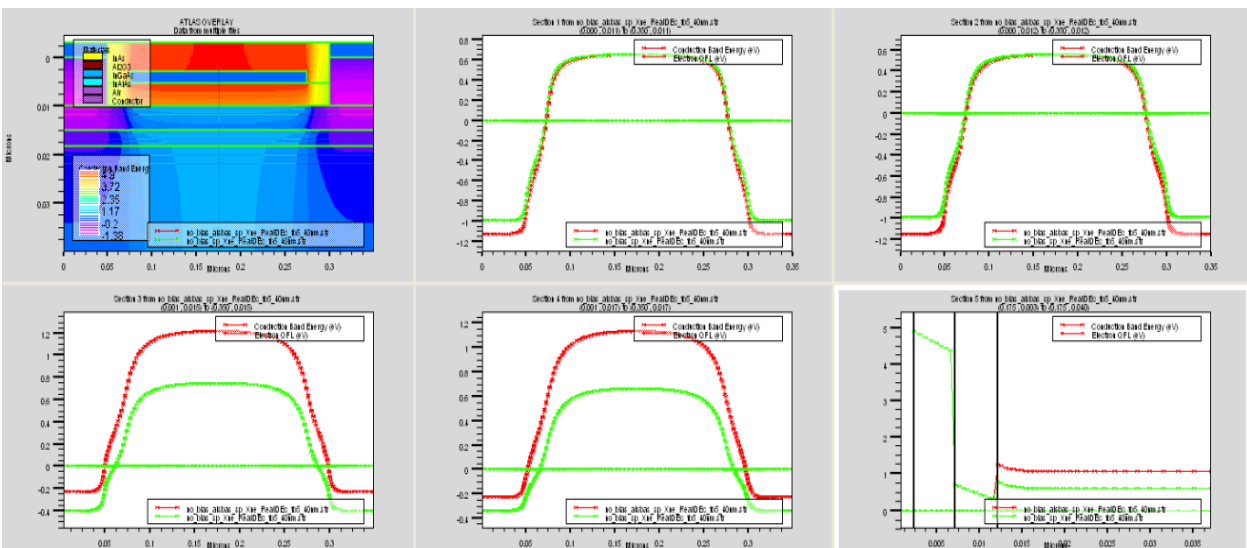
Σχήμα 3.22 Ζώνη αγωγιμότητας και στάθμη Fermi για διαφορετικά βάθη της διάταξης. Η γαλάζια γραμμή απεικονίζει την κατανομή δυναμικού για την αρχική διάταξη ενώ η μπλε για τη διάταξη με τροποποιημένο το Doping profile.

Στο σχήμα 3.23 απεικονίζεται η πυκνότητα ρεύματος στην κάθετη διεύθυνση ως αποτέλεσμα επίλυσης της BQP. Στο γράφημα της διάταξης η διαβάθμιση του χρώματος υποδεικνύει τις μεταβολές στην πυκνότητα του ρεύματος. Η διπλανή γραφική παράσταση δείχνει την πυκνότητα ρεύματος στη διεύθυνση του βάθους κατά μήκος του καναλιού. Από αυτή τη γραφική παράσταση φαίνεται ότι υπάρχει διαρροή ρεύματος προς το supply layer της διάταξης στην περιοχή κάτω από την πηγή.

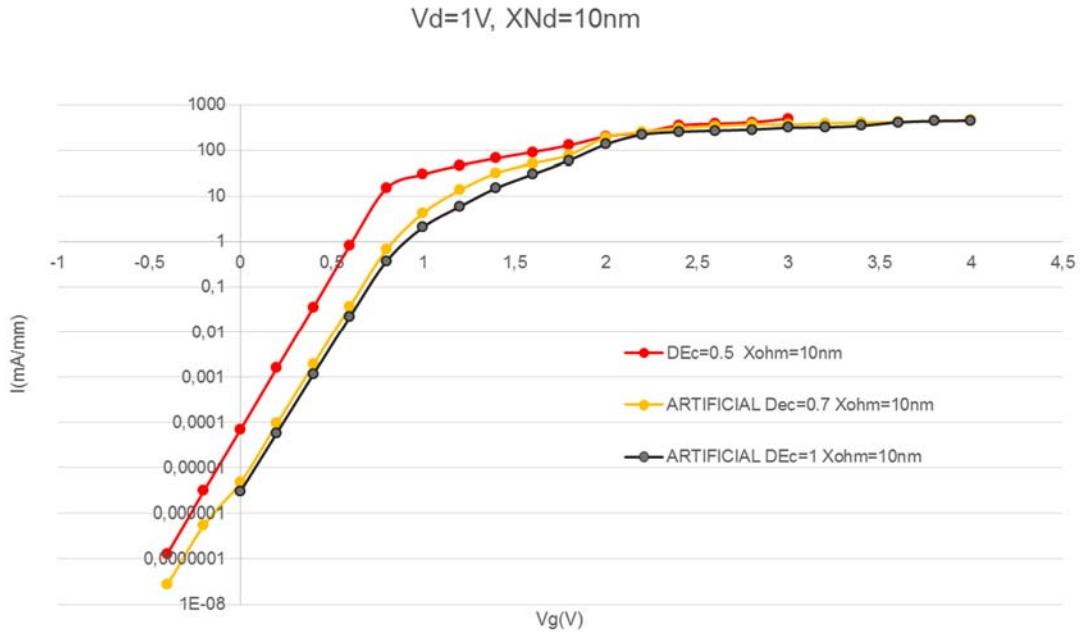
Από το πειραματικό group που κατασκεύασε τη διάταξη προτάθηκε η διάταξη που φαίνεται στο σχήμα 3.8 για να περιοριστούν τα ρεύματα διαρροής. Η διάταξη αυτή διαφέρει από την αρχική στο ότι κάτω από το κανάλι το υλικό είναι AlSbAs. Η ζώνη αγωγιμότητας του AlSbAs είναι περίπου 0.5eV ψηλότερα σε σχέση με τη ζώνη αγωγιμότητας του InAlAs και βοηθάει στον περιορισμό της ροής φορέων στην κάθετη διεύθυνση Σχ. 3.24. Επίσης στο ίδιο σχήμα φαίνεται ότι με αυτή την αλλαγή δημιουργείται και ένα μεγαλύτερο φράγμα δυναμικού για την οριζόντια κίνηση των ηλεκτρονίων στις περιοχές κάτω από το κανάλι. Πειραματικά η ιδέα επιβεβαιώνεται ότι είναι σωστή. Για να την προσομοιώσουμε δεν κατασκευάσαμε εκ νέου μία διάταξη αλλά τροποποιήσαμε την υπάρχουσα ορίζοντας τη νέα διαφορά στη ζώνη αγωγιμότητας των υλικών του καναλιού και του confining layer. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης επιβεβαιώνουν ότι με αυτή τη διάταξη μειώνονται τα ρεύματα διαρροής Σχ. 3.25.



Σχήμα 3.23 Πυκνότητα ρεύματος στη διεύθυνση του βάθους για όλη την περιοχή της διάταξης (αριστερά) και κατά μήκος μιας ευθείας μέσα στο κανάλι.

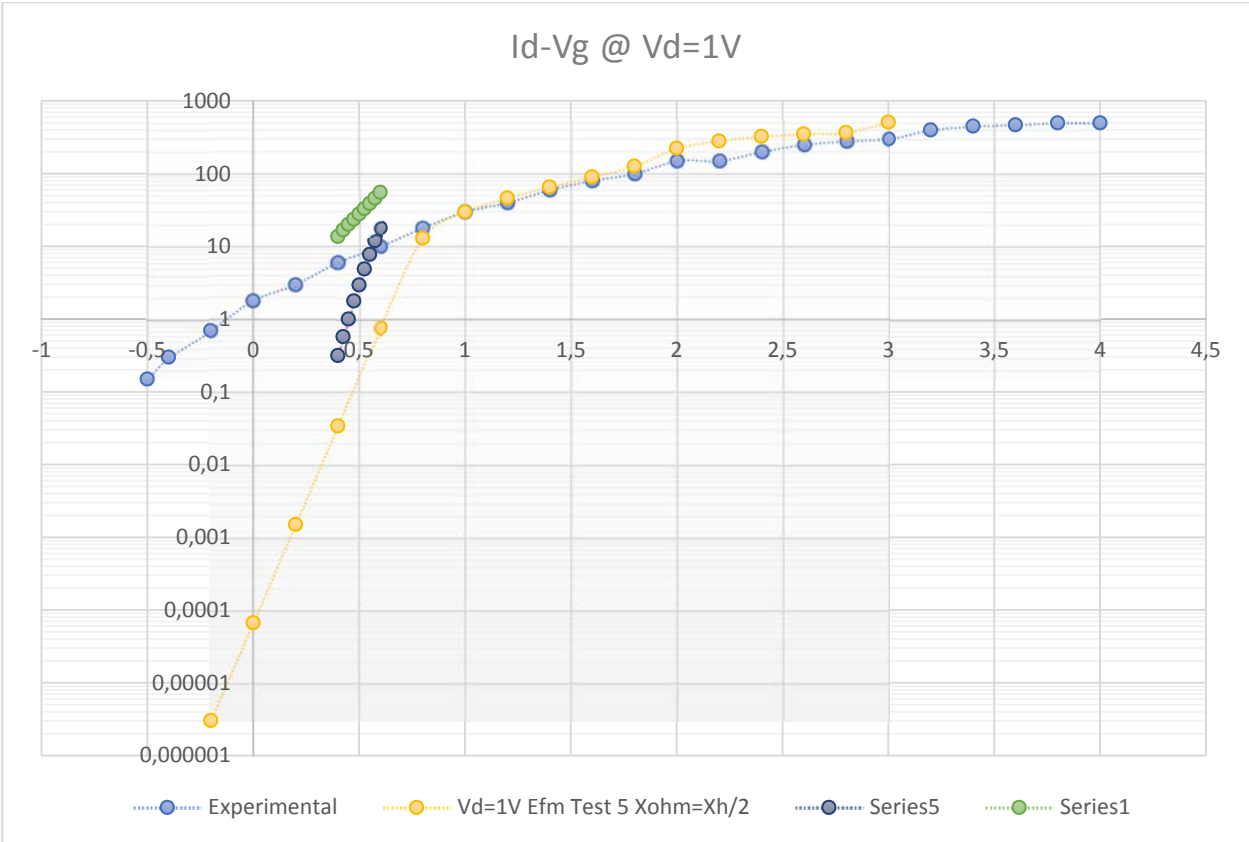


Σχήμα 3.24 Ζώνη αγωγιμότητας και στάθμη Fermi για την αρχική διάταξη (πράσινο) και για την τροποποιημένη διάταξη (κόκκινο).

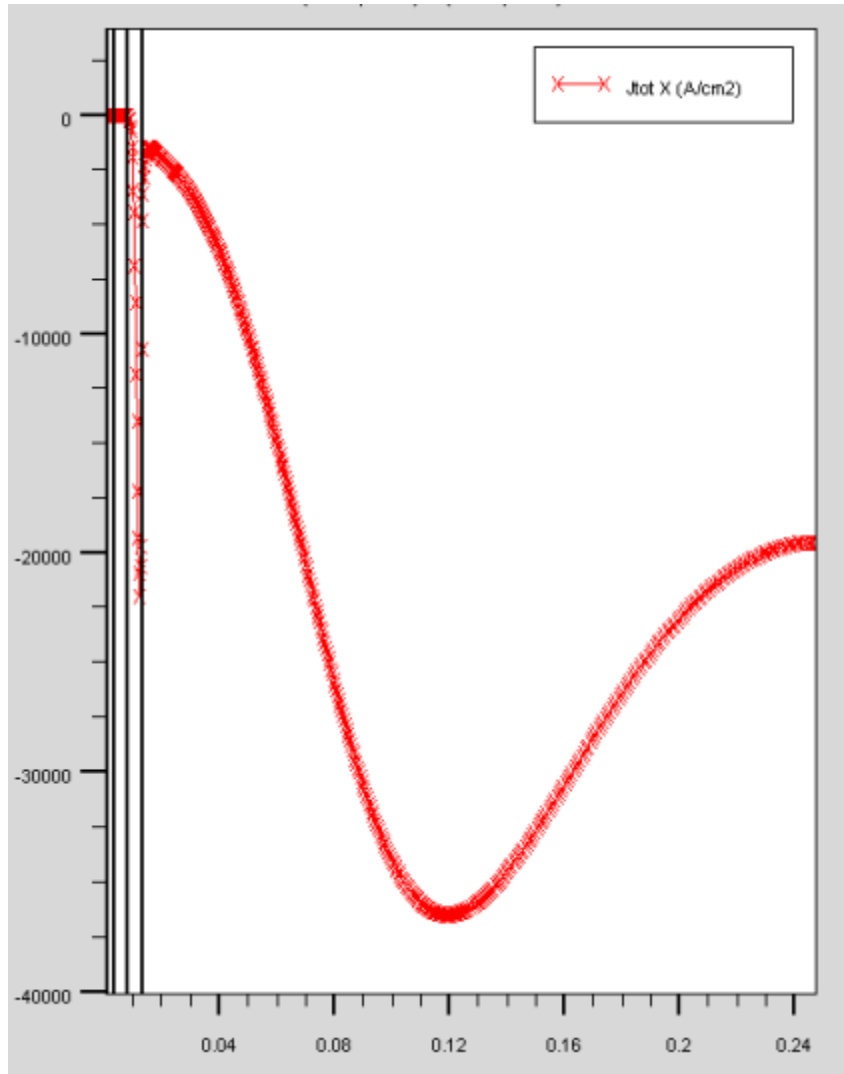


Σχήμα 3.25 Προσομοίωση αρχικής διάταξης (κόκκινο) και τροποποιημένης διάταξης. Η κίτρινη γραμμή παριστάνει *confining layer* κατά 0.2eV ψηλότερα από το InAlAs, ενώ η μαύρη κατά 0.5eV ψηλότερα από το InAlAs.

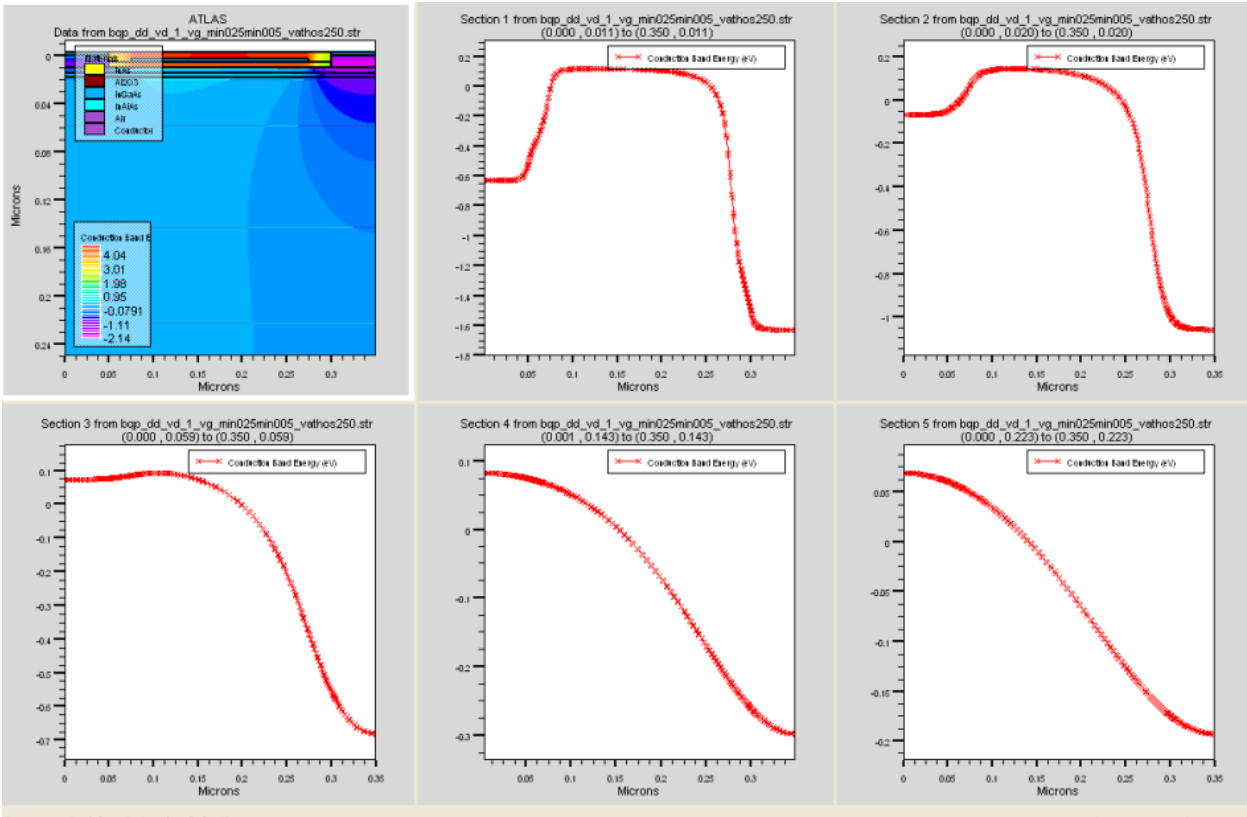
Αυξάνοντας το βάθος της διάταξης προσομοίωσης τα ρεύματα διαρροής κυμαίνονται στην ίδια τάξη μεγέθους με τα πειραματικά δεδομένα. Στο Σχ. 3.26 φαίνονται οι καμπύλες για την κάθε περίπτωση. Με τη μέθοδο BQP για βάθος προσομοίωσης 250nm παίρνουμε ρεύμα διαρροής με κλίση $SS=350\text{mV/dec}$. Στο σχήμα 3.27 απεικονίζεται η πυκνότητα του ρεύματος στην οριζόντια διεύθυνση κατά το βάθος της διάταξης. Γίνεται φανερό ότι σε αυτή την περίπτωση υπάρχει ένα σημαντικό ρεύμα διαρροής βαθιά στο *confining layer* (60-220nm). Στο Σχ. 3.28 απεικονίζονται οι μεταβολές της ζώνης αγωγιμότητας σε διάφορες περιοχές της διάταξης. Μπορεί να διακρίνει κανείς ότι η πύλη δημιουργεί φράγμα δυναμικού στην οριζόντια κίνηση των ηλεκτρονίων μόνο μέχρι περίπου τα 60-70nm. Επίσης λόγω της μεγάλης πυκνότητας ηλεκτρονίων στα άκρα της διάταξης η εφαρμοζόμενη τάση V_{ds} δημιουργεί οριζόντιο πεδίο σε αρκετό βάθος και σε περιοχές όπου δεν υπάρχει φράγμα δυναμικού στην οριζόντια κίνηση. Επομένως δημιουργείται ένα παρασιτικό ρεύμα αρκετά βαθιά στη διάταξη. Σε αυτό το σημείο πρέπει να επισημάνουμε ότι η κατασκευαστική περιγραφή της διάταξης δεν αποσαφηνίζει το βάθος του InAlAs στρώματος.



Σχήμα 3.26 Πειραματική (συνεχόμενη μπλε), εργαστηριακή προσομοίωση (κίτρινη), BQP βάθος 100nm (μπλε σημεία), BQP βάθος 250nm (πράσινα σημεία).



Σχήμα 3.27 Πυκνότητα ρεύματος στην οριζόντια διεύθυνση, κατά το βάθος της διάταξης 250nm.



Σχήμα 3.28 Από αριστερά προς τα δεξιά, η κατανομή του δυναμικού σε ολόκληρη τη διάταξη, οριζόντια τομή σε βάθος 13nm, οριζόντια τομή σε βάθος 22nm, οριζόντια τομή σε βάθος 60nm, οριζόντια τομή σε βάθος 140nm, οριζόντια τομή σε βάθος 220nm.

Συμπεράσματα

Το κάθετο ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργεί η πύλη ασκεί καλό ηλεκτροστατικό έλεγχο στο κβαντικό πηγάδι ωστόσο υπάρχουν ρεύματα διαρροής που διαρρέουν τη διάταξη σε μεγαλύτερα βάθη. Ο περιορισμός των ηλεκτρονίων του supply layer γύρω από την αρχική τους περιοχή με κάποιο barrier στην κάθετη διεύθυνση μπορεί να βοηθήσει στον περιορισμό της πυκνότητας φορτίων και άρα της πυκνότητας ρεύματος σε μεγάλα βάθη. Οι αλγόριθμοι του εργαστηρίου δεν περιέχουν κάποιο σφάλμα αφού τα αποτελέσματά τους έρχονται σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του εμπορικού πακέτου Silvaco Atlas όταν οι προσομοιώσεις γίνονται υπό τις ίδιες συνθήκες. Απομένει να δοκιμαστεί η προσομοίωση της διάταξης με μεγαλύτερο βάθος με τα εργαστηριακά προγράμματα. Στη βιβλιογραφία συχνά αναφέρεται ως σημαντική αιτία ρεύματος διαρροής διατάξεων από υλικά ημιαγωγών III-V το Band to Band Tunneling λόγω του μικρού ενεργειακού διακένου αυτών των υλικών. Το Band to Band tunneling ρεύμα είναι φαινόμενο μεταφοράς φορέων που η ημικλασική θεωρία μεταφοράς δε λαμβάνει υπόψη. Σχετικές αναφορές υπάρχουν και από το πειραματικό group που κατασκεύασε την υπό εξέταση διάταξη. Ο συνυπολογισμός ρευμάτων που οφείλονται σε κβαντομηχανικά φαινόμενα ως επιπρόσθετη αιτία διαροής απαιτεί την αριθμητική επίλυση κατάλληλων συστημάτων εξισώσεων. Η εξέταση των φαινομένων αυτών αφήνεται για μελλοντική εργασία.

4 References

- [1] P. Yu και M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, Fourth Edition, Springer, 2010.
- [2] R. F. Pierret, *Advanced Semiconductor Fundamentals*, Second Edition.
- [3] S. Datta, *Quantum Phenomena*, Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- [4] M. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, 2nd Edition, Cambridge University Press, 2000.
- [5] «NSM Archive - Physical Properties of Semiconductors,» IOFFE, [Ηλεκτρονικό]. Available: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>. [Πρόσβαση 10 July 2014].
- [6] Y. A. Goldberg και N. M. Schmidt, *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, London: World Scientific, 1999.
- [7] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors*, Cambridge University Press, 1998.
- [8] K. K. Ng και S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, 2006.
- [9] D. Bohm, *Quantum Theory*, New York: Dover Publications, 1989.
- [10] V. V. Mitin, V. A. Kochelap and M. A. Stroscio, *Introduction to nanoelectronics*, Cambridge University Press, 2008.
- [11] K. Natori, «Ballistic metaloxide semiconductor field effect transistor,» *Journal of Applied Physics*, αρ. 76, pp. 4879-4890, 1994.
- [12] V. Mitin και V. Kochelap, «Quantum Electron Transport: Landauer Formula,» σε *Quantum Heterostructures Microelectronics and Optoelectronics*, Cambridge University Press, 1999, pp. 55-58.
- [13] J. Rhew και M. Lundstrom, *Solid State Electronics*, αρ. 1899, 2002.
- [14] I. Ferain, C. A. Colinge και J.-P. Colinge, «Multigate transistors as the future of classical metal-oxide-semiconductor field-effect transistors,» *Nature*, τόμ. 479, pp. 310-316, 2011.
- [15] T. Theis και P. Solomon, «In quest of the "next switch": prospects for greatly reduced power dissipation in a successor to the silicon field-effect transistor.,» σε *IEEE 98*, 2010.
- [16] J. A. d. Alamo, «Nanometre-scale electronics with III-V compound semiconductors,» *Nature*, τόμ. 479, pp. 317-323, 2011.
- [17] C.-Y. Huang, S. Lee, D. Cohen-Elias, J. J. Law και A. D. Carter, «Reduction of leakage current in In_{0.53}Ga_{0.47}As channel metal-oxide-semiconductor field-effect-transistors using AlAs_{0.56}Sb_{0.44} confinement layers,» *Applied Physics Letters*, αρ. 103, 2013.

- [18] D. A. Antoniadis, I. Aberg, C. N. Chleirigh, O. M. Nayfeh, A. Khakifirooz και J. L. Hoyt, «Continuous MOSFET performance increase with device scaling: The role of strain and channel material innovations,» *IBM Journal of Research and Development*, τόμ. 50, pp. 363-376, 2006.
- [19] M. V. Fischetti και S. E. Laux, «Are GaAs MOSFETs worth building? A model-based comparison of Si and GaAs n-MOSFETs,» σε *IEEE int. Electron Devices Meet.*, 1989.
- [20] D. Jin, D.-H. Kim, T. Kim και J. d. Alamo, «Quantum capacitance in scaled down III-V FETs,» σε *IEEE Int. Electron Devices Meet.*, 2009.
- [21] U. Singisetti, M. Wistey, G. Burek, A. Baraskar, B. Thibeault και M. Rodwell, «In_{0.53}Ga_{0.47}As Channel MOSFET with self-aligned InAs Source/Drain Formed by MBE Regrowth,» *Electron Devices Letters*, τόμ. 30, αρ. 11, 2009.
- [22] Γ. Κροκίδης, Κβαντική προσομοίωση (στατική και δυναμική) ημιαγωγικών ετεροεπαφών: Εφαρμογή στις ηλεκτρονικές διατάξεις HEMT/MODFET, 2007.
- [23] D. Bohm, «A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables,» *Physical Review*, τόμ. 85, pp. 166-179, 1952.
- [24] G. Iannaccone, G. Curatola και G. Fiori, «Effective Bohm Quantum Potential for device simulators based on drift-diffusion and energy transport,» σε *SISPAD*, 2004.