

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Весь комплекс явлений, обычно понимаемый под словами «электронные свойства низкоразмерных электронных систем» имеет в основе фундаментальный физический факт: изменение энергетического спектра электронов и дырок в структурах с очень малыми размерами.

Продемонстрируем основную идею размерного квантования на примере электронов, находящихся в очень тонкой металлической или полупроводниковой пленке толщиной a .

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Электроны в пленке находятся в потенциальной яме глубиной, равной работе выхода. Глубину потенциальной ямы можно считать бесконечно большой, поскольку работа выхода на несколько порядков превышает тепловую энергию носителей. Типичные значения работы выхода в большинстве твердых тел имеют величину $W=4-5$ эВ, на несколько порядков превышающую характерную тепловую энергию носителей, имеющий порядок величины kT , равную при комнатной температуре $0,026$ эВ.

Согласно законам квантовой механики, энергия электронов в такой яме квантуется, т.е. может принимать лишь некоторые дискретные значения E_n , где n может принимать целочисленные значения $1,2,3,\dots$. Эти дискретные значения энергии называют уровнями размерного квантования.

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m^* a^2}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Для свободной частицы с эффективной массой m^* , движение которой в кристалле в направлении оси Z ограничено непроницаемыми барьерами (т.е. барьерами с бесконечной потенциальной энергией), энергия основного состояния по сравнению с состоянием без ограничения возрастает на величину

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* a^2}$$

Это увеличение энергии называется **энергией размерного квантования** частицы.

Энергия размерного квантования является следствием принципом неопределенности в квантовой механике. Если частица ограничена в пространстве вдоль оси Z в пределах расстояния a , неопределенность Z -компоненты ее импульса возрастает на величину порядка \hbar/a .

Соответственно увеличивается кинетическая энергия частицы на величину E_1 . Поэтому рассмотренный эффект часто называют **квантово-размерным эффектом**.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Вывод о квантовании энергии электронного движения относится лишь к движению поперек потенциальной ямы (по оси z). На движение в плоскости xu (параллельно границам пленки) потенциал ямы не влияет. В этой плоскости носители движутся как свободные и характеризуются, как и в массивном образце, непрерывным квадратичным по импульсу энергетическим спектром с эффективной массой m^* .

Полная энергия носителей в квантово-размерной пленке носит смешанный дискретно непрерывный спектр

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

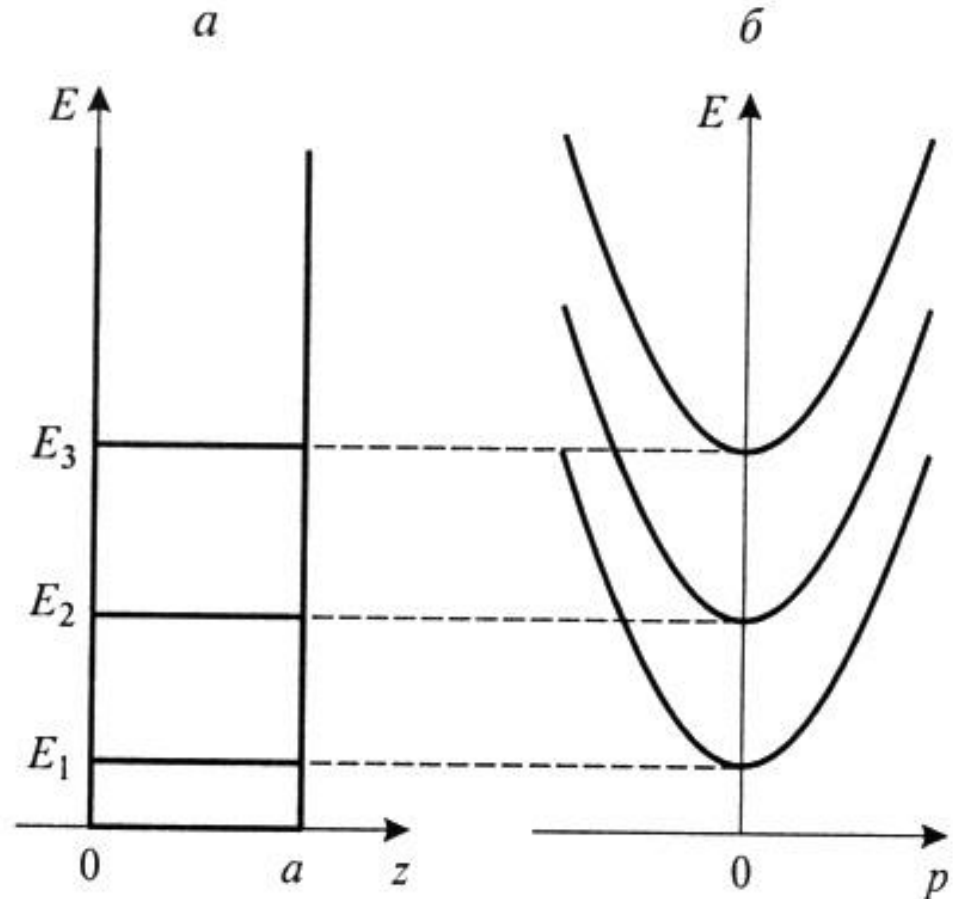
Принцип размерного квантования

Кроме увеличения минимальной энергии частицы квантово-размерный эффект приводит также к квантованию энергий ее возбужденных состояний.

Энергетический спектр квантово-размерной пленки

$$p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$$

- импульс носителей заряда в плоскости пленки



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Пусть электроны в системе имеют энергии, меньшие E_2 , и поэтому принадлежат нижнему уровню размерного квантования. Тогда никакой упругий процесс (например, рассеяние на примесях или акустических фононах), равно как и рассеяние электронов друг на друге, не может изменить квантовое число n , переведя электрон на вышележащий уровень, поскольку это потребовало бы дополнительных затрат энергии. Это означает, что электроны при упругом рассеянии могут изменять только свой импульс в плоскости пленки, т.е. ведут себя как чисто двумерные частицы.

Поэтому квантово-размерные структуры, в которых заполнен лишь один квантовый уровень, часто называют двумерными электронными структурами.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Существуют и другие возможные квантовые структуры, где движение носителей ограничено не в одном, а в двух направлениях, как в микроскопической проволоке или нити (**квантовые нити или проволоки**).

В этом случае носители могут свободно двигаться лишь в одном направлении, вдоль нити (назовем его осью x). В поперечном сечении (плоскость yz) энергия квантуется и принимает дискретные значения E_{mn} (как любое двумерное движение, оно описывается двумя квантовыми числами, m и n). Полный спектр при этом тоже является дискретно-непрерывным, но лишь с одной непрерывной степенью свободы:

$$E = E_{mn} + \frac{p_x^2}{2m^*}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Принцип размерного квантования

Возможно, также, создание квантовых структур, напоминающих искусственные атомы, где движение носителей ограничено во всех трех направлениях (**квантовые точки**).

В квантовых точках энергетический спектр уже не содержит непрерывной компоненты, т.е. не состоит из подзон, а является чисто дискретным. Как и в атоме, он описывается тремя дискретными квантовыми числами (не считая спина) и может быть записан в виде $E = E_{lmn}$, причем, как и в атоме, энергетические уровни могут быть вырождены и зависеть лишь от одного или двух чисел.

Общей особенностью низкоразмерных структур является тот факт, что, если хотя бы вдоль одного направления движение носителей ограничено очень малой областью, сравнимой по размерам с де-бройлевской длиной волны носителей, их энергетический спектр заметно меняется и становится частично или полностью дискретным.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Определения

Квантовые точки – quantum dots – структуры, у которых во всех трех направлениях размеры составляют несколько межатомных расстояний (нульмерные структуры).

Квантовые проволоки (нити) – quantum wires – структуры, у которых в двух направлениях размеры равны нескольким межатомным расстояниям, а в третьем – макроскопической величине (одномерные структуры).

Квантовые ямы – quantum wells – структуры, у которых в одном направлении размер составляет несколько межатомных расстояний (двумерные структуры).

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Минимальный и максимальный размеры

Нижний предел размерного квантования определяется критическим размером D_{\min} , при котором в квантово-размерной структуре существует хотя бы один электронный уровень. D_{\min} зависит от разрыва зоны проводимости ΔE_c в соответствующем гетеропереходе, используемом для получения квантово-размерных структур.

В квантовой яме хотя бы один электронный уровень существует в том случае, если ΔE_c превышает величину

$$\Delta E_c^* = \frac{h}{2m_e^*} \left(\frac{\pi}{D_{\min}} \right)^2 \equiv \Delta E_1^{QW}$$

h – постоянная Планка, m_e^* - эффективная масса электрона, ΔE_1^{QW} - первый уровень в прямоугольной квантовой яме с бесконечными стенками.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Минимальный и максимальный размеры

Если расстояние между энергетическими уровнями становятся сопоставимыми с тепловой энергией $k_B T$, то возрастает заселенность высоких уровней. Для квантовой точки условие, при котором заселением более высоко лежащих уровней можно пренебречь записывается как

$$k_B T \leq \frac{1}{3} (E_2^{QD} - E_1^{QD})$$

E_1^{QD} , E_2^{QD} – энергии первого и второго уровня размерного квантования соответственно. Это означает, что преимущества размерного квантования могут быть полностью реализованы, если

$$k_B T \leq E_1^{QD}$$

Это условие устанавливает верхние пределы для размерного квантования. Для

GaAs – Al_xGa_{1-x}As это значение составляет 12 нм.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Важной характеристикой любой электронной системы наряду с ее энергетическим спектром является плотность состояний $g(E)$ (количество состояний, приходящихся на единичный интервал энергии E).

Для трехмерных кристаллов плотность состояний определяют с использованием циклических граничных условий Борна-Кармана, из которых следует, что компоненты волнового вектора электрона изменяются не непрерывно, а принимают ряд дискретных значений

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_1, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_2, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_3,$$

здесь $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$, a – размеры кристалла (в форме куба со стороной L).

Объем k -пространства, приходящийся на одно квантовое состояние, равен $(2\pi)^3/V$, где $V = L^3$ – объем кристалла.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Таким образом, число электронных состояний приходящихся на элемент объема $dk = dk_x dk_y dk_z$, рассчитанное на единицу объема, будет равно

$$dN = 2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3 / V} \cdot \frac{1}{V} = \frac{2d^3 k}{(2\pi)^3},$$

здесь множитель 2 учитывает две возможные ориентации спина.

Число состояний, приходящихся на единичный объем в обратном пространстве, т.е. плотность состояний) не зависит от волнового вектора

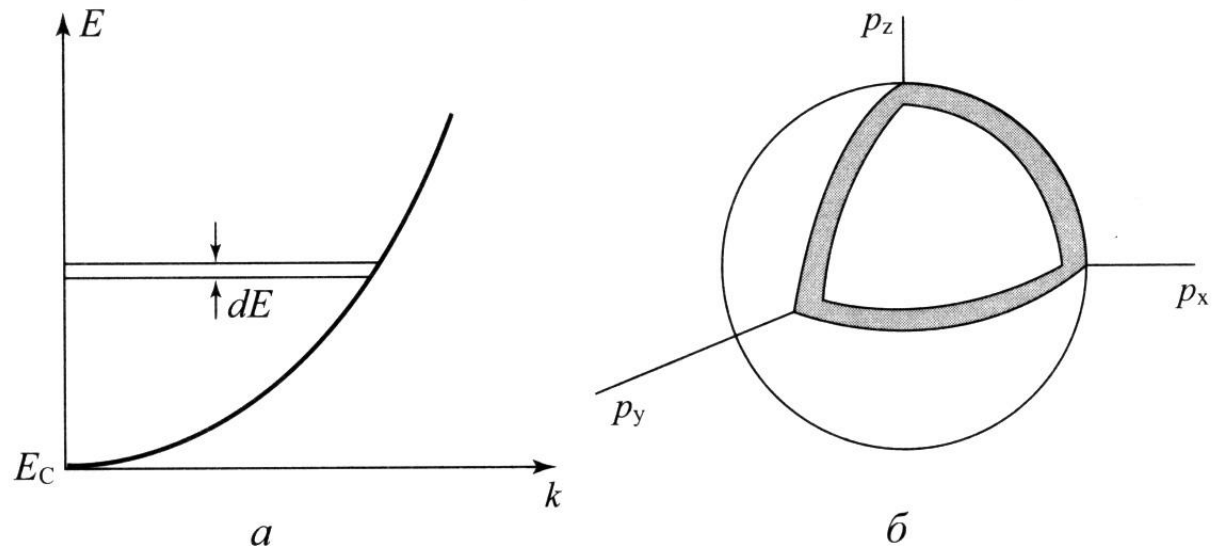
$$g(k) = \frac{dN}{d^3 k} = \frac{2}{(2\pi)^3}.$$

Иными словами, в обратном пространстве разрешенные состояния распределены с постоянной плотностью.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Функцию плотности состояний по энергии в общем случае рассчитать практически невозможно, так как изоэнергетические поверхности могут иметь довольно сложную форму. В простейшем случае изотропного параболического закона дисперсии, справедливого для краев энергетических зон можно найти число квантовых состояний, приходящихся на объем сферического слоя, заключенного между двумя близкими изоэнергетическими поверхностями, соответствующим энергиям E и $E+dE$.



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Объем сферического слоя в k -пространстве.

$$dQ = 4\pi k^2 dk$$

dk – толщина слоя.

На этот объем будут приходиться dN состояний

$$dN = g(k)dQ = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{k^2 dk}{\pi^2}$$

Учитывая связь E и k по параболическому закону

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

получим
$$dN = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

m^* - эффективная масса электрона

Отсюда плотность состояний по энергии будет равна

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{(2m^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E}$$

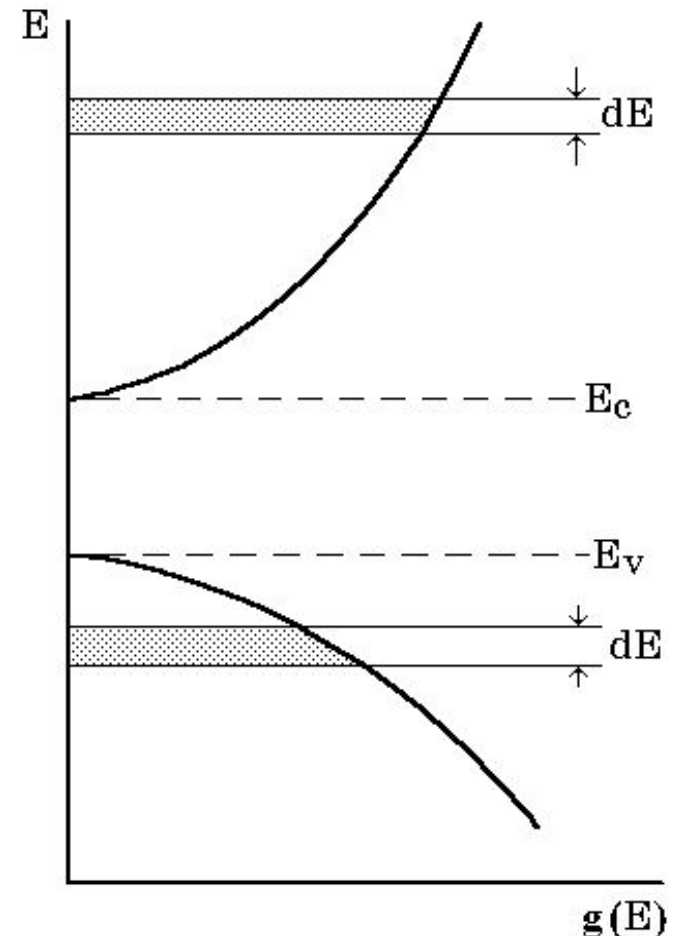
ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Таким образом, в трехмерных кристаллах с параболическим энергетическим спектром при увеличении энергии плотность разрешенных энергетических уровней (плотность состояний) будет увеличиваться пропорционально \sqrt{E}

Плотность уровней в зоне проводимости и в валентной зоне.

Площадь заштрихованных областей пропорциональна числу уровней в интервале энергий dE



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Вычислим плотность состояний для двумерной системы. Полная энергия носителей для изотропного параболического закона дисперсии в квантово-размерной пленке, как показано выше, имеет смешанный дискретно непрерывный спектр

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 n^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)$$

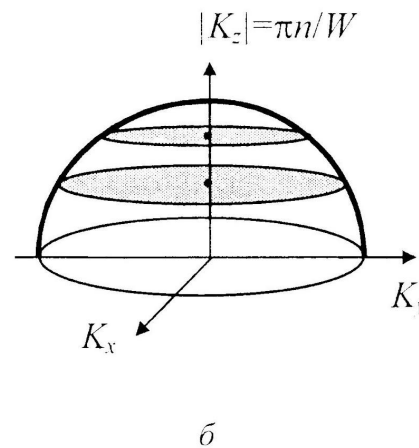
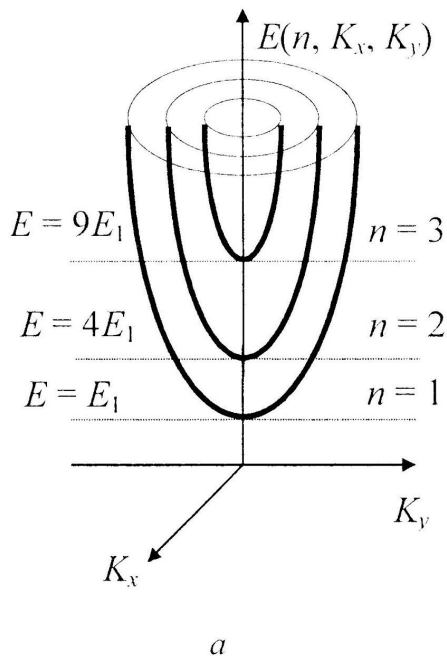
В двумерной системе состояния электрона проводимости определяются тремя числами (n, k_x, k_y) . Энергетический спектр разбивается на отдельные двумерные подзоны E_n , соответствующие фиксированным значениям n .

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Кривые постоянной энергии представляют собой в обратном пространстве окружности. Каждому дискретному квантовому числу n соответствует абсолютное значение z-компоненты волнового вектора $|k_z| = (\pi/a)n$

Поэтому объем в обратном пространстве, ограниченный замкнутой поверхностью данной энергии E в случае двумерной системы разбивается на ряд сечений.



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Определим зависимость плотности состояний от энергии для двумерной системы. Для этого при заданном n найдем площадь S кольца, ограниченного двумя изоэнергетическими поверхностями, соответствующие энергиям E и $E+dE$:

$$S = 2\pi k_\rho dk_\rho,$$

Здесь $k_\rho = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$

Величина двумерного волнового вектора, соответствующая данным n и E ; dk_ρ – ширина кольца.

Так как одному состоянию в плоскости (k_x, k_y) соответствует площадь $dS = (2\pi)^2 / L^2$

где L^2 – площадь двумерной пленки толщиной a , число электронных состояний в кольце, рассчитанное на единицу объема кристалла, будет равно с учетом спина электрона

$$dN = \frac{2S}{VdS} = \frac{2S}{aL^2dS} = \frac{k_\rho dk_\rho}{\pi a} = \frac{dk_\rho^2}{2\pi a}.$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Поскольку

$$E = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_\rho^2 \quad k_\rho^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_n)$$

здесь

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{a} \right)^2 n^2 \quad - \text{ энергия, соответствующая дну } n\text{-ой подзоны.}$$

Таким образом, плотность состояний в двумерной пленке

$$g_{nli}(E) = \frac{\sum dN}{dE} = \frac{m^*}{\pi a \hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n)$$

где $\Theta(Y)$ – единичная **функция Хевисайда**, $\Theta(Y) = 1$ при $Y \geq 0$ и $\Theta(Y) = 0$ при $Y < 0$.

Суммирование ведется по числу подзон, дно которых находится ниже данной энергии E .

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

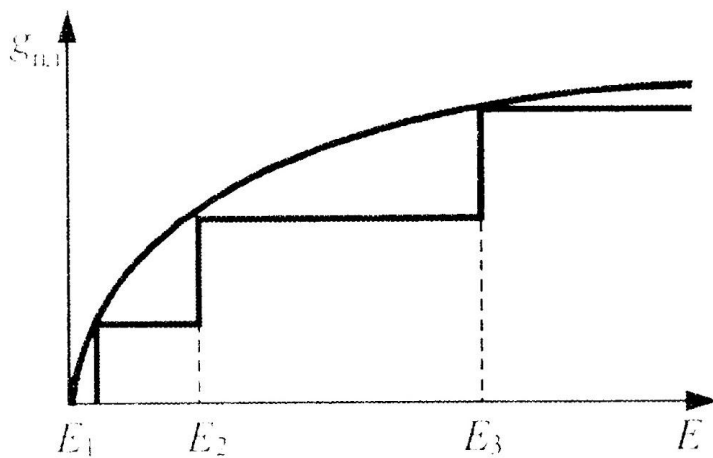
Плотность состояний в двумерной пленке можно также представить в виде

$$g_{пл}(E) = \frac{m^*}{\pi a^2} \left[\sqrt{E/E_1} \right] \quad \left[\sqrt{E/E_1} \right] - \text{целая часть } \sqrt{E/E_1}, \text{ равная числу подзон, дно которых находится ниже энергии } E.$$

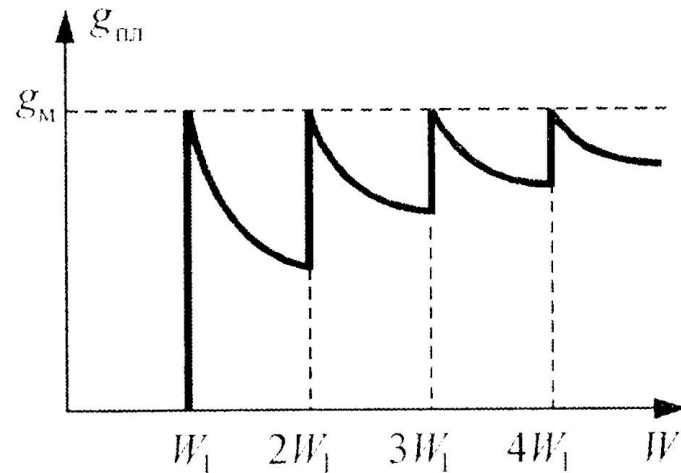
Таким образом, для двумерных пленок с параболическим законом дисперсии плотность состояний в любой подзоне постоянна и не зависит от энергии. Каждая подзона дает одинаковый вклад в общую плотность состояний. При фиксированной толщине пленки плотность состояний меняется скачком, когда $\left[\sqrt{E/E_1} \right]$ не изменится на единицу.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности



а



б

Зависимость плотности состояний двумерной пленки от энергии (а) и толщины a (б).

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

В случае произвольного закона дисперсии или при другом виде потенциальной ямы зависимости плотности состояния от энергии и толщины пленки могут отличаться от приведенных выше, однако **основная особенность – немонотонный ход – сохранится.**

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Вычислим плотность состояний для одномерной структуры – квантовой нити.

Изотропный параболический закон дисперсии в этом случае можно записать в виде

$$E(n, m, k_x) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 (m^2 + n^2) \right],$$

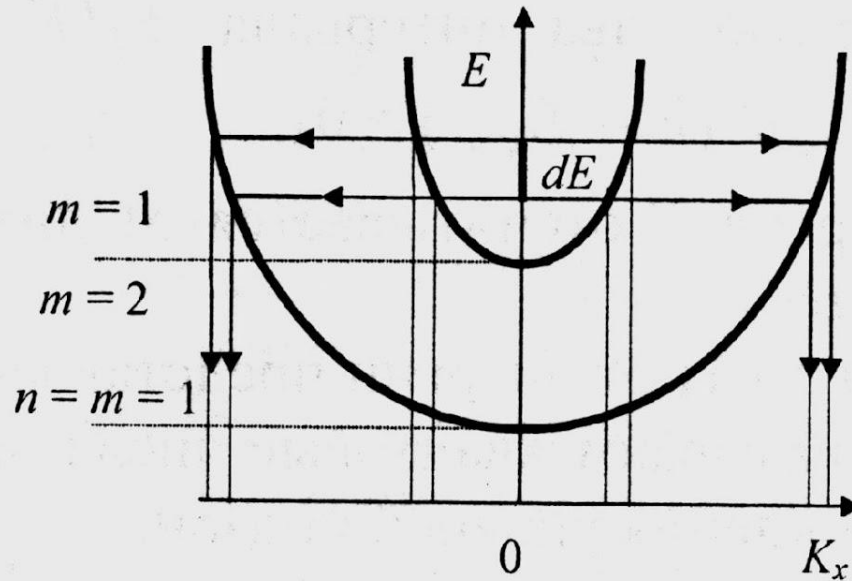
где ось x направлена вдоль квантовой нити, d – толщина квантовой нити вдоль осей y и z , k_x – одномерный волновой вектор. m, n – целые положительные числа, характеризующие квантовые подзоны.

Энергетический спектр квантовой нити разбивается, таким образом, на отдельные перекрывающиеся одномерные подзоны (параболы).

Движение электронов вдоль оси x оказывается свободным (но с эффективной массой), а вдоль двух других осей движение ограничено.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности



Энергетический спектр электронов для квантовой нити

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой нити от энергии

Число квантовых состояний, приходящихся на интервал dk_x , рассчитанное на единицу объема

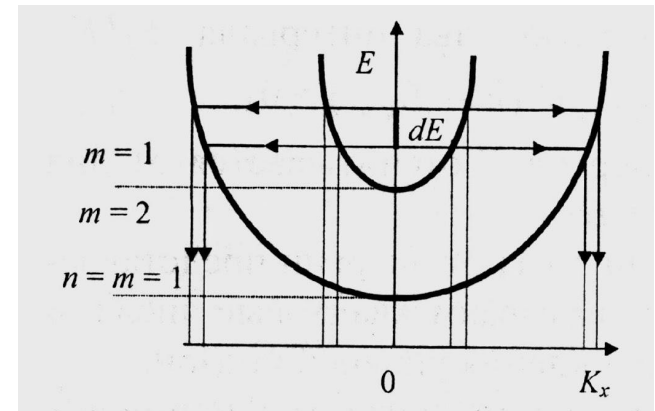
$$dN = \frac{dk_x}{V(2\pi/L_x)} = \frac{dk_x}{2\pi d^2}$$

$$E(n, m, k_x) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 (m^2 + n^2) \right], \quad \longrightarrow \quad k_x = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (E - E_{n,m})}$$

где $E_{n,m} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 (m^2 + n^2) \right]$



энергия, соответствующая дну подзоны с заданными n и m .



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой нити от энергии

Таким образом

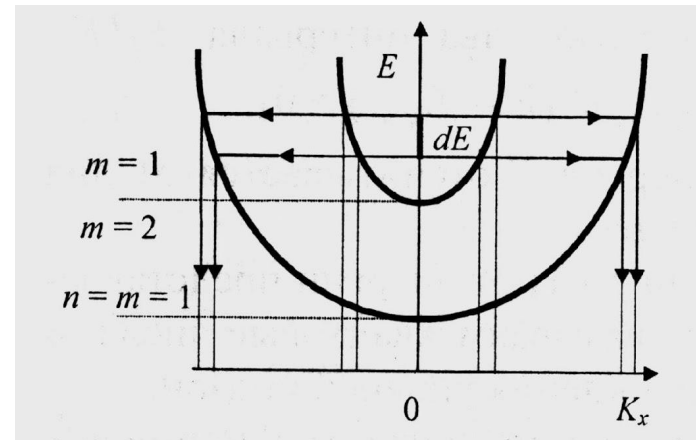
$$dk_x = \frac{\sqrt{2m^*}}{2\pi\sqrt{E - E_{n,m}}} dE$$

Следовательно

$$g_{КП}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi d^2} \sum_m \sum_n \frac{\Theta(E - E_{n,m})}{\sqrt{E - E_{n,m}}}$$

При выводе этой формулы учтено спиновое вырождение состояний и то, что одному интервалу dE соответствуют два интервала $\pm dk_x$ каждой подзоны, для которой $(E - E_{n,m}) > 0$.

Энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости массивного образца.

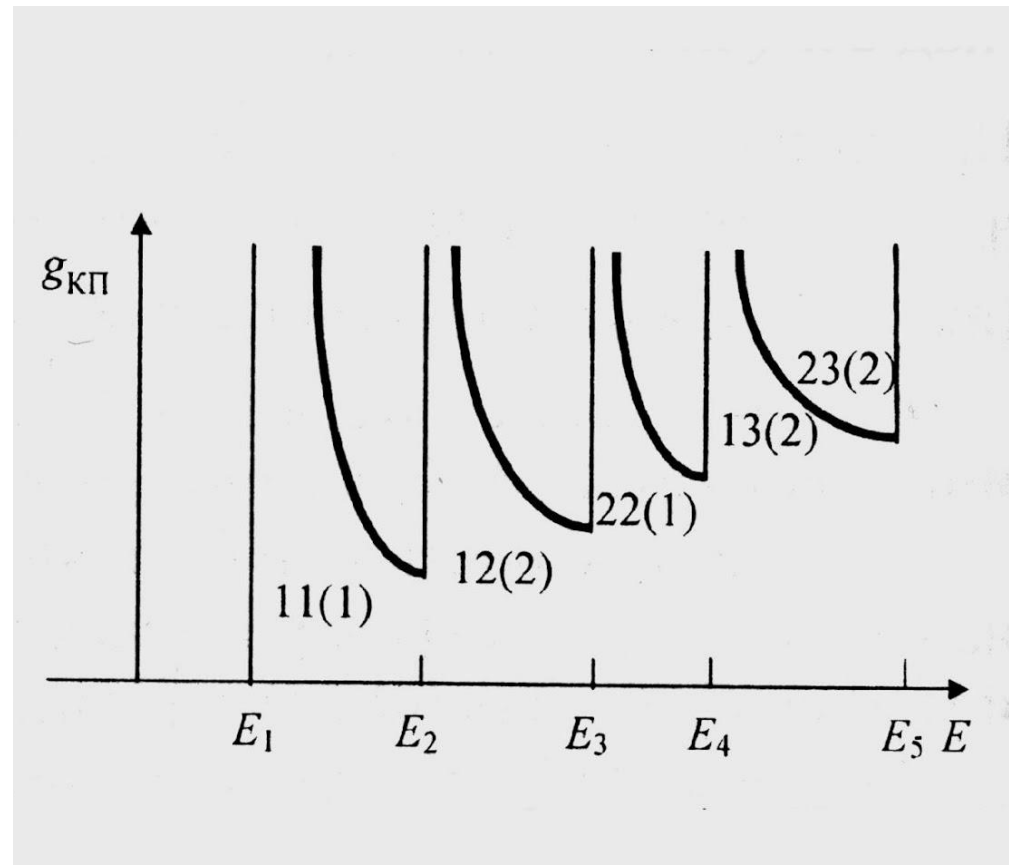


ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой нити от энергии

Зависимость плотности состояний квантовой нити от энергии. Цифры у кривых показывают квантовые числа n и m . В скобках указаны факторы вырождения уровней подзон.



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой нити от энергии

$$g_{\text{КП}}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi d^2} \sum_m \sum_n \frac{\Theta(E - E_{n,m})}{\sqrt{E - E_{n,m}}}$$

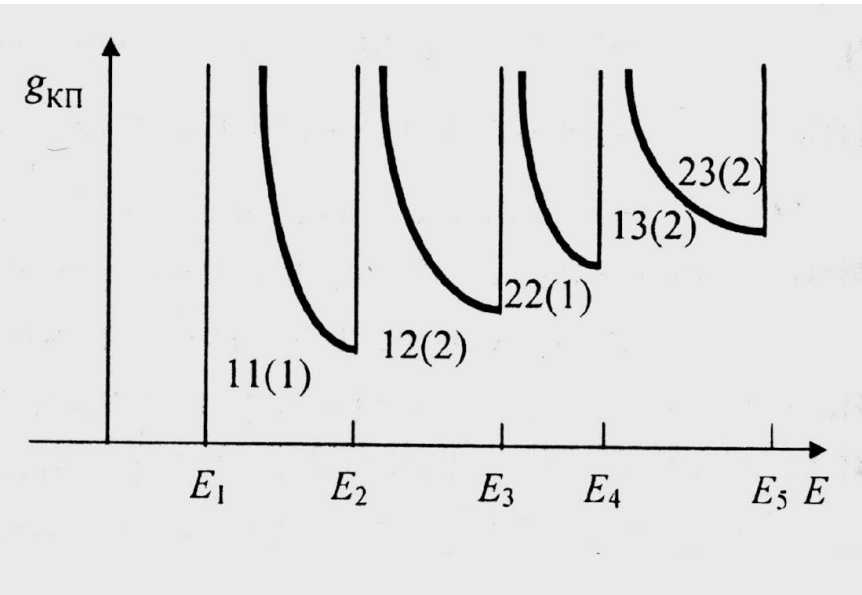


В пределах отдельной подзоны плотность состояний уменьшается с увеличением энергии. Полная плотность состояний представляет собой суперпозицию одинаковых убывающих функций (соответствующих отдельным подзонам), смещенных по оси энергии.



При $E = E_{m,n}$ плотность состояний равна бесконечности.

Подзоны с квантовыми числами $n \neq m$ оказываются дважды вырожденными (только для $L_y = L_z \equiv d$).



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой точке от энергии

При **трехмерном ограничении движения частиц** мы приходим к задаче о нахождении разрешенных состояний в **квантовой точке** или **нульмерной системе**.

Используя приближение эффективной массы и параболический закон дисперсии, для края изотропной энергетической зоны спектр разрешенных состояний квантовой точки с одинаковым размерам d вдоль всех трех координатных осей будет иметь вид

$$E(n, m, l) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\left(\frac{\pi}{d} \right)^2 (m^2 + n^2 + l^2) \right]$$

$n, m, l = 1, 2, 3 \dots$ - положительные числа, нумерующие подзоны.

Энергетический спектр квантовой точки представляет собой набор дискретных разрешенных состояний, соответствующих фиксированным n, m, l .

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой точке от энергии

Число состояний в подзоны, соответствующих одному набору n, m, l , рассчитанное на единицу объема,



$$t = \frac{2}{d^3}$$

Полное число состояний, имеющих одинаковую энергию, рассчитанное на единицу объема



$$N = tg$$



Вырождение уровней в первую очередь определяется симметрией задачи.



g – фактор вырождения уровня

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой точке от энергии

Вырождение уровней в первую очередь определяется симметрией задачи.

Например, для рассматриваемого случая квантовой точки с одинаковыми размерами во всех трех измерениях, уровни будут трехкратно вырождены, если два квантовых числа равны между собой и не равны третьему, и шестикратно вырождены, если все квантовые числа не равны между собой.

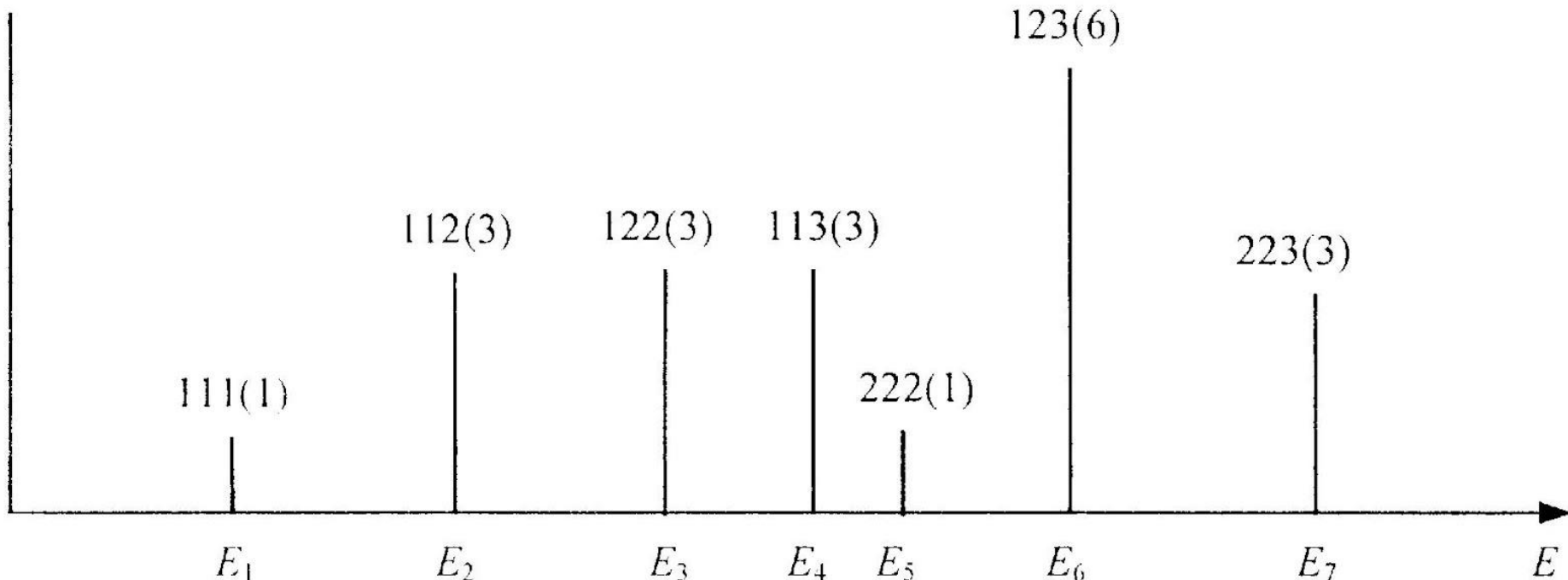
Конкретный вид потенциала также может приводить к дополнительному, так называемому случайному вырождению. Например, для рассматриваемой квантовой точки, к трехкратному вырождению уровней $E(5,1,1)$; $E(1,5,1)$; $E(1,1,5)$, связанному с симметрией задачи, добавляется случайное вырождение $E(3,3,3)$ ($n^2+m^2+l^2=27$ как в первом, так и во втором случаях), связанное с видом ограничивающего потенциала (бесконечная прямоугольная потенциальная яма).

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Распределение квантовых состояний в структурах пониженной размерности

Плотность состояний в квантовой точке от энергии

Распределение числа разрешенных состояний N в зоне проводимости для квантовой точки с одинаковыми размерами во всех трех измерениях. Цифры обозначают квантовые числа; в скобках указаны факторы вырождения уровней.



ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Трехмерные электронные системы

Свойства равновесных электронов в полупроводниках зависят от фермиевской функции распределения, которая определяет вероятность того, что электрон будет находиться в квантовом состоянии с энергией E

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{kT}}} \quad E_F - \text{уровень Ферми или электрохимический потенциал, } T - \text{абсолютная температура, } k - \text{постоянная Больцмана.}$$

Вычисление различных статистических величин значительно упрощается, если уровень Ферми лежит в запрещенной зоне энергий и значительно удален от дна зоны проводимости E_c ($E_c - E_F$) $>$ kT .

Тогда в распределении Ферми-Дирака единицей в знаменателе можно пренебречь и оно переходит в распределение Максвелла-Больцмана классической статистики. Это случай невырожденного полупроводника

$$f(E, T) = e^{-\frac{E - E_F}{kT}}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Трехмерные электронные системы

Функция распределения плотности состояний в зоне проводимости $g(E)$, функция Ферми-Дирака для трех температур и функция Максвелла-Больцмана для трехмерного электронного газа.

При $T = 0$ функция Ферми-Дирака имеет вид разрывной функции. Для $E < E_F$ она равна единице, значит все квантовые состояния заполнены. Для $E > E_F$ функция равна нулю и соответствующие квантовые состояния совершенно свободны. При $T > 0$ функция Ферми-Дирака размывается в окрестности энергии Ферми, где она быстро изменяется от 1 до 0 и это размытие пропорционально kT , т.е. тем больше, чем выше температура. (Рис. 1.4. Гуртов)

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Трехмерные электронные системы

Концентрация электронов в зоне проводимости находится путем суммирования по всем состояниям

$$n = \int_{E_c}^{\infty} g(E) f(E, T) dE$$

Отметим, что в качестве верхнего предела в этом интеграле мы должны были бы взять энергию верхнего края зоны проводимости. Но так как функция Ферми-Дирака для энергий $E > E_F$ экспоненциально быстро убывает с увеличением энергии, то замена верхнего предела на бесконечность не меняет значения интеграла. Подставляя в интеграл значения функций, получим

$$n = N_C e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}}$$

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

-эффективная плотность состояний в
зоне проводимости

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Двумерные электронные системы

Определим концентрацию носителя заряда в двумерном электронном газе.

Поскольку плотность состояний двумерного электронного газа

$$g_{nl}(E) = \frac{m^*}{\pi a^2} \sum_n \Theta(E - E_n)$$

Получим

$$n_{2D} = \frac{m^*}{\pi a^2} \sum_n \int_{E_n}^{\infty} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \Theta(E - E_n) dE$$

Здесь также верхний предел интегрирования взят равным бесконечности, учитывая резкую зависимость функции распределения Ферми-Дирака от энергии.

Интегрируя

$$n_{2D} = N_C^{(2D)} \sum_n \ln \left(1 + e^{\frac{E_F - E_n}{kT}} \right)$$

где
$$N_C^{(2D)} = \frac{m^* kT}{\pi a^2}$$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Двумерные электронные системы

Для невырожденного электронного газа, когда $e^{\frac{E_F - E_1}{kT}} \ll 1$

$$n_{2D} \cong N_C^{(2D)} e^{\frac{E_F}{kT}} \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

В случае сверхтонких пленок, когда можно учитывать заполнение лишь нижней подзоны

$$n_{2D} \cong N_C^{(2D)} e^{\frac{E_F - E_1}{kT}}$$

При сильном вырождении электронного газа, когда $e^{\frac{E_F - E_1}{kT}} \gg 1$

$$n_{2D} \cong \frac{N_C^{(2D)}}{kT} \sum_{n=1}^{n_0} (E_F - E_1 n^2)$$

где n_0 - целая часть $\sqrt{E_F / E_1}$

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Статистика носителей в низкоразмерных структурах

Следует отметить, что в квантово-размерных системах за счет меньшей плотности состояний условие полного вырождения не требует экстремально высоких концентраций или низких температур и достаточно часто реализуется в экспериментах. Например, в *n*-GaAs при $N_{2D} = 10^{12} \text{ см}^{-2}$ вырождение будет иметь место уже при комнатной температуре.

В квантовых нитях интеграл для расчета, в отличие от двумерного и трехмерного случаев не вычисляется аналитически при произвольном вырождении, и простые формулы могут быть написаны лишь в предельных случаях.

В невырожденном одномерном электронном газе в случае сверхтонких нитей, когда можно учитывать заполнение лишь наинизшего уровня с энергией E_{11} концентрация электронов

$$n_{1D} \cong N_C^{(1D)} e^{\frac{E_F - E_{11}}{kT}}$$

где одномерная эффективная плотность состояний

$$N_C^{1D} = \sqrt{\frac{2m^*kT}{\pi\hbar^2}}$$