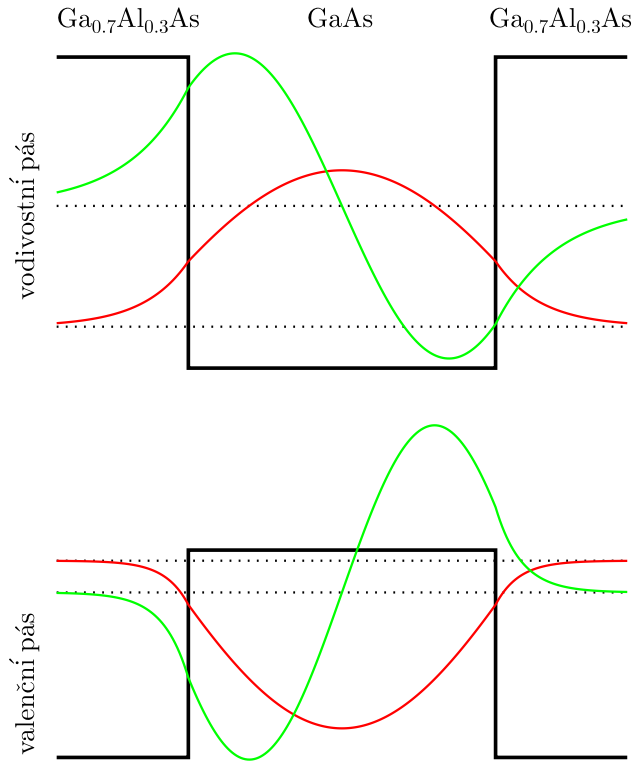


1. Kvantové jámy

Pokročilé metody růstu krystalů po jednotlivých vrstvách (jako MBE) dovolují vytvořit si v krystalu libovolný potenciál. Jeden z hojně používaných materiálů je: GaAs, AlAs a jejich ternární kombinace $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$, kde je poměrné zastoupení Al vyjádřeno parametrem x . Výhodou těchto krystalů je nepatrný rozdíl mřížkové konstanty:

$$a(\text{GaAs}) = 5.6533 \text{ \AA}, \quad a(\text{AlAs}) = 5.660 \text{ \AA}.$$



Obrázek 1: Pásové schéma kvantové jámy šířky 10 nm.

Zakázaný pás GaAs je užší než u AlAs. Pokud vrstvu GaAs obložíme z obou stran vrstvami $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$, budou se volné elektrony i díry hromadit ve vrstvě GaAs, která působí jako jáma (má nižší energetické stavy). Změna velikosti zakázaného pásu na rozhraní GaAs- $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ je daná výrazem $\Delta E_g = 1247 \cdot x \text{ meV}$. Tento skok pásů se rozdělí mezi vodivostní a valenční pás v poměru 60/40. Např. pro $x = 0.3$ dostaneme skok ve vodivostním pásu $V_e = 225 \text{ meV}$, a ve valenčním pásu $V_h = 150 \text{ meV}$. Samotný zakázaný pás GaAs je při pokojové teplotě 300 K: $E_g = 1.42 \text{ eV}$.

Pokud vytvoříme v polovodiči potenciál, který vede k prostorovému omezení pohybu nosičů, vytvoří se nám diskrétní spektrum povolených energetických hladin \Rightarrow *rozměrové kvantování*. Zopakujeme vlastnosti řešení Schrödingerovy rovnice pro jednoduché potenciály. Pro výpočty je třeba znát hmotnost elektronů a děr v daném materiálu. Obvykle tuto efektivní hmotnost m^* vyjadřujeme v poměru ke hmotnosti volného elektronu m_o . Jak to vypadá v praxi pro GaAs, AlAs:

Tabulka 1: Efektivní hmotnosti nosičů v krystalech GaAs, AlAs, v jednotkách hmotnosti volného elektronu m_o .

		GaAs	AlAs	$\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$
elektrony	m_e	0.0665	0.15	$0.0665+0.0835x$
těžké díry	m_h	0.34	0.76	$0.34+0.42x$
lehké díry	m_l	0.12	0.17	$0.12+0.05x$

1.1. Schrödingerova rovnice

Za nepřítomnosti časově proměnných interakcí stačí řešit časově nezávislou Schrödingerovu rovnici.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Pokud se navíc potenciál mění pouze v jednom směru (z), řešíme pouze 1D problém. Ve směru x, y jde o řešení pohybu volné částice. T.j. vlnová funkce podél vrstev bude ve tvaru rovinné vlny

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}}\psi(z).$$

Podélná část energetického spektra je spojitá

$$E = E_{xy} + E_z = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + E_z. \quad (2)$$

1.2. Jednoduchá kvantová jáma

Potenciál jednoduché pravoúhlé kvantové jámy je např:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{v jámě (GaAs)} \\ V_0 & \text{v bariéře (Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As)} \end{cases} \quad (3)$$

Pro nekonečnou jámu jsou okrajové podmínky $\psi(0) = 0$ a $\psi(L) = 0$, kde L je šířka jámy. Odpovídající vlnové funkce jsou $\sin(kz)$ a z okrajové podmínky $kL = n\pi$ dostaneme energetické spektrum:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (4)$$

$$\psi(z) \propto \sin(n\pi z/L)$$

Pro reálnou kvantovou jámu popsanou potenciálem (3) je třeba hledat vlnovou funkci navazováním řešení ŠR v jednotlivých oblastech konstantního potenciálu (viz Obr. 1). V jámě lze řešení nalézt jako lineární kombinaci funkcí $\sin(\xi), \cos(\xi)$. V bariéře je řešení lineární kombinací funkcí $\exp(\xi), \exp(-\xi)$.

1.3. Trojúhelníková kvantová jáma

Pokud je ve studovaném krystalu elektrické pole F ve směru osy z , je třeba k potenciální energii nosičů přičíst člen $E_F = -qFz$, kde q je elektrický náboj částice (pro elektrony $-e$, pro díry $+e$). V tomto lineárním potenciálu jsou výsledkem řešení ŠR Airyho funkce $\text{Ai}(\xi)$ a $\text{Bi}(\xi)$ (viz. Obr. 2).

V případě nekonečné trojúhelníkové jámy pro elektrony lze nalézt analytický výraz pro energetické spektrum. Potenciál se zapíše:

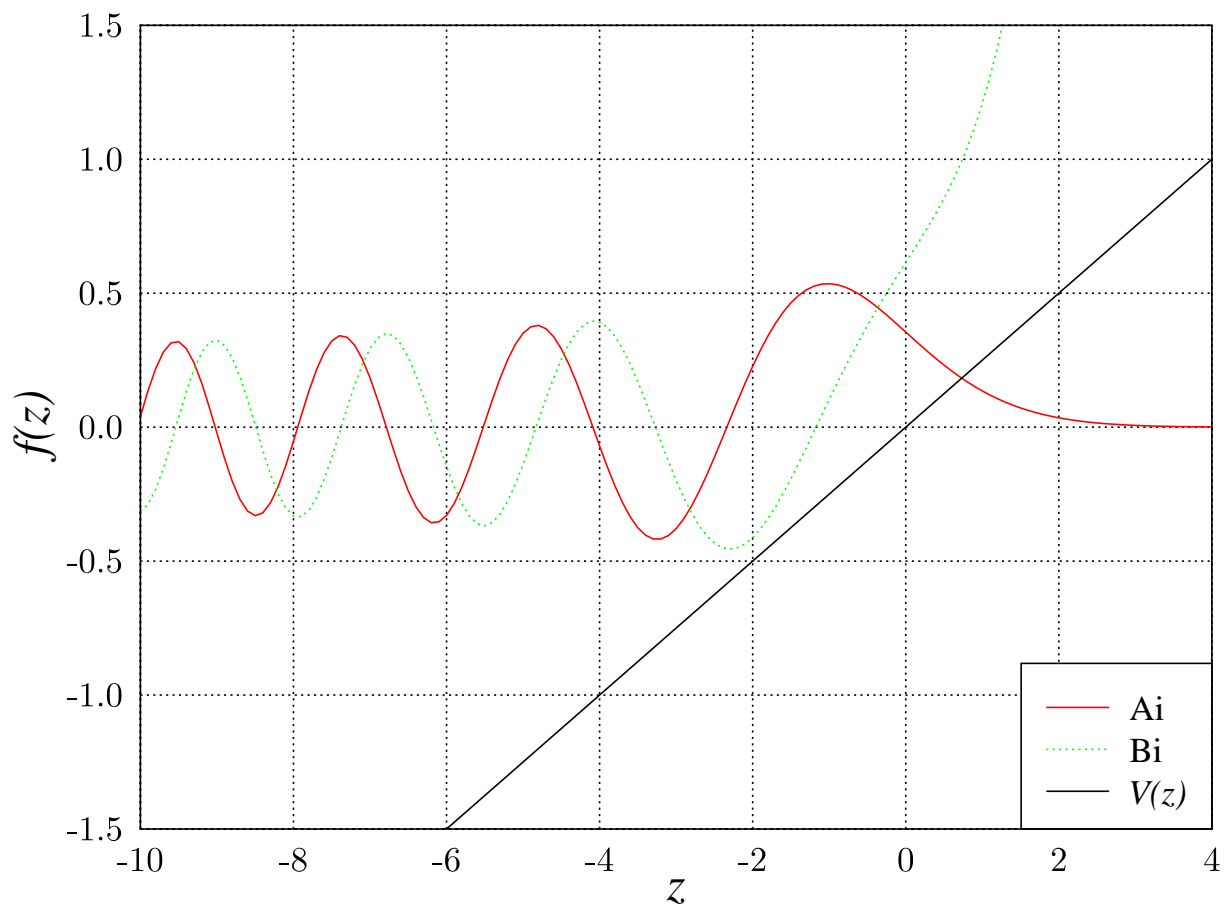
$$V(z) = \begin{cases} \infty & \text{pro } z < 0 \\ eFz & z > 0 \end{cases} \quad (5)$$

Použitím okrajových podmínek získáme energetické spektrum:

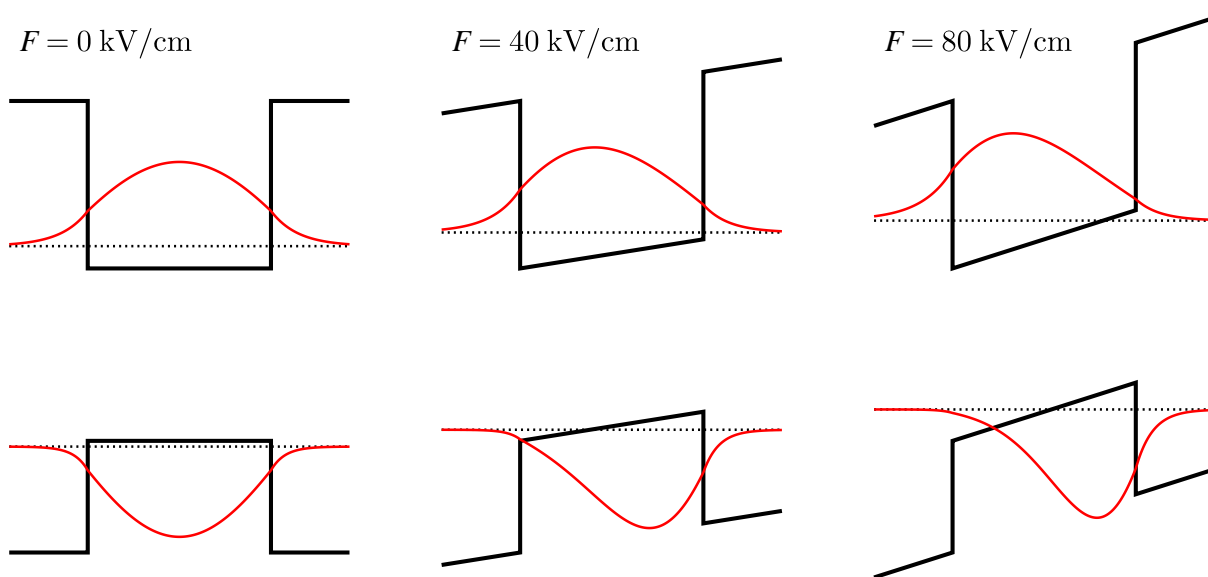
$$E_n \propto \left[F \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6)$$

Pro reálnou jednoduchou kvantovou jámu s elektrickým polem dostaneme řešením ŠR vlnové funkce a energie, které jsou zakresleny na Obr 3.

Airy



Obrázek 2: Airyho funkce jako řešení ŠR v lineárním potenciálu.



Obrázek 3: Pásové schéma kvantové jámy šířky 10 nm s elektrickým polem.

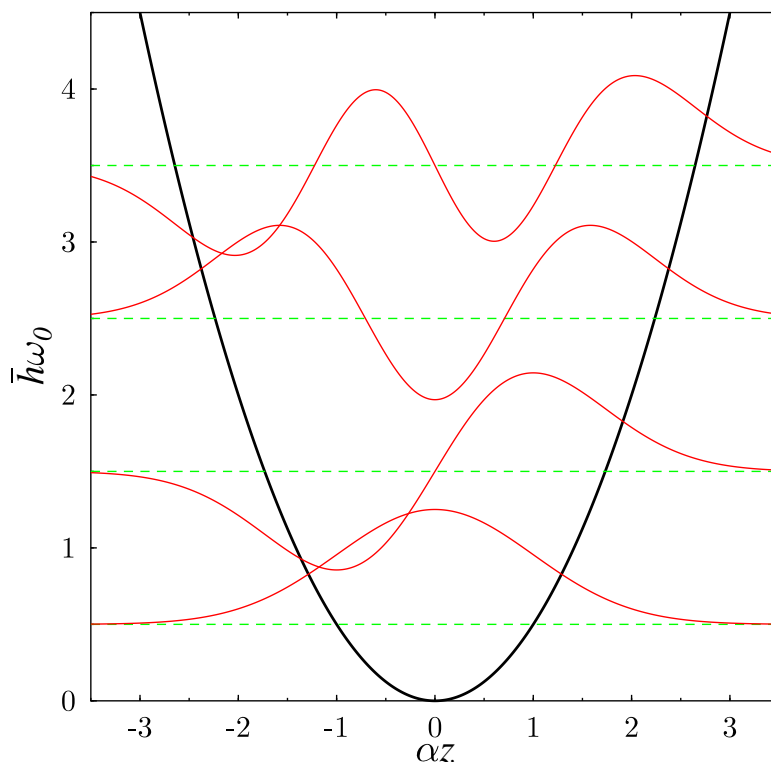
1.4. Harmonický oscilátor

Použijeme všude, kde lze provést harmonické přiblížení potenciální energie. $V(z) = \frac{1}{2}\kappa z^2$. Energetické hladiny harmonickému oscilátoru jsou ekvidistantní.

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, \dots, \quad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m^*}} \quad \alpha = \sqrt{\frac{m^*\omega}{\hbar}}. \quad (7)$$

Vlnové funkce pro harmonický oscilátor vyjdou Hermitovy-Gaussovy funkce

$$\phi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \alpha z, .$$



Obrázek 4: Energetické hladiny v parabolické kvantové jámě.

Obrázek 4 ukazuje řešení v relativních jednotkách vzdáleností αz a energií $\hbar\omega$. Budeme uvažovat kvantovou jámu šířky 10 nm stejně jako v Obr. 3, ale průběh potenciálu nebude schodovitý ale parabolický. Tzn. koncentrace hliníku mimo jámu bude $x = 0.3$ a v jámě se bude měnit parabolicky. Bezrozměrný parametr ξ na kraji jámy lze spočítat ze vztahů

$$\xi(L/2) = \sqrt{\frac{\sqrt{2m^*V_o} L}{\hbar} \frac{L}{2}} \quad (8)$$

a energie základního stavu bude

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = \sqrt{\frac{2V_o \hbar}{m^* L}},$$

Pro efektivní hmotnosti m^* specifikované v Tab. 1 a pro známé potenciálové rozdíly V_o pro materiály GaAs-Ga_xAl_{1-x}As nám vyjdou hodnoty podle následující tabulky:

Tabulka 2: Parametry parabolické kvantové jámy šířky $L = 10$ nm. Energie jsou uvedeny v meV.

	elektrony	těžké díry	lehké díry
V_o	225	150	150
$\xi(L/2)$	1.77	2.41	1.85
$\frac{1}{2}\hbar\omega$	72	26	44
počet hladin	2	3	2

1.5. Energetické hladiny v Coulombově potenciálu

Pokud je v krystalu GaAs atom Si na místě Ga vzniká donorová hladina s potenciálem podobným analogickým s atomem vodíku

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{e^2}{r}$$

Řešení ŠR vede k diskrétnímu spektru vázaných hladin

$$E_n = -\frac{m^*e^4}{2(4\pi\epsilon\hbar)^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (9)$$

Dosažením parametrů GaAs, kde je relativní dielektrická konstanta 12.85, vyjde energie základního stavu této příměsi $E_1 = 5.5$ meV.

1.6. Shrnutí

Energetické hladiny pro různé tvary potenciálů lze shrnout takto.

Tabulka 3: Závislost energetického spektra na tvaru potenciálu.

Tvar jámy	$V(\mathbf{r})$	E_n	n
parabolická	$\sim z^2$	$\sim (n + \frac{1}{2})$	0,1,...
obdélníková	\square	$\sim n^2$	1,2,...
trojúhelníková	$ /$	$\sim (n - \frac{1}{4})^{2/3}$	1,2,...
Coulombovská	$\sim 1/r$	$\sim \frac{1}{n^2}$	1,2,...

2. Hustota stavů

Při přechodech mezi hladinami (absorbce, emise) je třeba kromě energetického spektra znát také hustotu stavů v daném pásu. T.j. kolik existuje dovolených kvantových stavů v okolí dané energie. Pro prostorový krystal (3D) dostaneme odmocninovou závislost hustoty stavů nad hranou pásu:

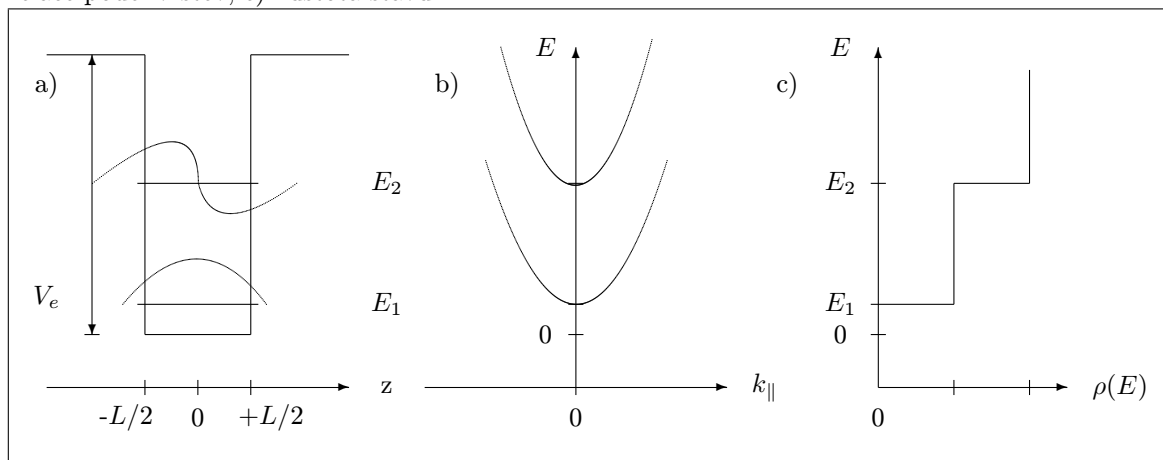
$$\rho_{3D}(E) = \frac{\sqrt{2(m^*)^3 E}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (10)$$

Pokud bude ale v krystalu potenciál, který povede k rozměrovému kvantování, vyjde dvoudimenzionální hustota stavů (2D) konstantní se schodovitým vzestupem na každé energetické hladině v tomto potenciálu:

$$\rho_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} p_n, \quad (11)$$

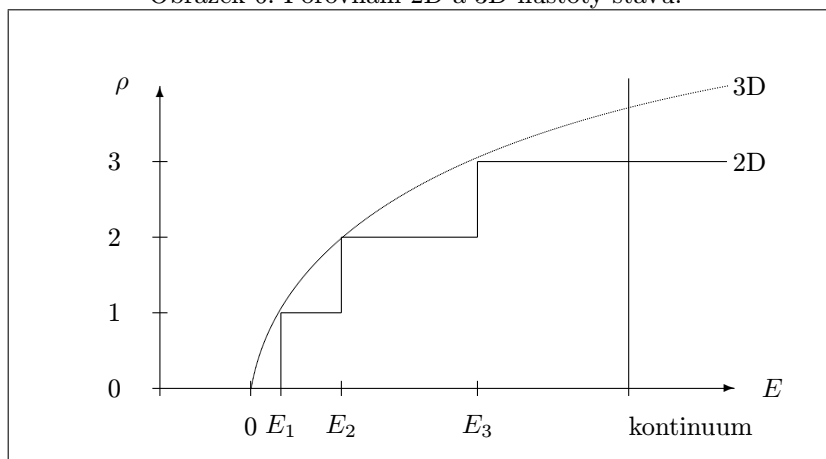
kde p_n je počet stavů pod energií E .

Obrázek 5: a) energetické hladiny a vlnové funkce v potenciálu jednoduché kvantové jámy, b) disperzní relace podél vrstev, c) hustota stavů.



Porovnání hustoty stavů pro 3D případ a 2D kvantovou jámu ukazuje Obr. 6.

Obrázek 6: Porovnání 2D a 3D hustoty stavů.



2.1. Obsazení hladin

Je třeba ještě připomenout, že pro optické vlastnosti studovaných kvantových jam je důležité znát také obsazení hladin nosiči. Pravděpodobnost, že energetická hladina E je obsazena, je daná Fermiho-Diracovým rozdělením

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}, \quad (12)$$

kde E_F je Fermiho energie, k_B je Boltzmanova konstanta a T je teplota.