

JÓZSEF ATIILA TUDOMÁNYEGYETEM

TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

DIPLOMAMUNKA

Rácsillesztett félvezető heteroátmenetek energia-
sávszerkezetének vizsgálata

Készítette: Boda Dezső

fizikus hallgató

Témavezető: Dr. Papp György docens

JATE Elméleti Fizikai Tanszék

SZEGED

1992

Tartalom

Tartalom.....	2
Bevezető.....	4
1. Félvezető kvantumstruktúrák.....	6
1.1 Félvezető heterostruktúrák.....	6
1.2 Félvezető interface-ek.....	10
2. Sávszakadások az interface-nél.....	14
2.1 A heteroátmenet sávszerkezetét jellemző paraméterek.....	14
2.2 Néhány a VBO-ra vonatkozó szabály.....	16
2.3 Kísérleti adatbázis.....	19
3. A közös energiaskála és a potenciál lineup problémája.....	21
3.1 Elméleti bevezető.....	21
3.2 A közös energiaskála problémája.....	21
3.3 Referenciaszint-elméletek.....	22
3.4 Tersoff modellje.....	25
3.5 A potenciál eltolódás.....	28
3.6 Makroszkopikus átlagok.....	30
4. Egy önkonzisztens pseudopotenciális sávzá- mítási módszer.....	33
4.1 Az eljárás.....	33
4.2 A bázis.....	33
4.3 A struktúra.....	36
4.4 A pseudopotenciál.....	37
4.5 A Hartree-potenciál.....	39

4.6 A kicserélődési potenciál.....	40
4.7 A Hamilton-mátrix.....	41
4.8 A speciális-pont technika.....	41
4.9 A töltéssűrűség.....	43
4.10 A makroszkopikus átlagok számolása.....	44
5. Alapanyag-számolások.....	46
5.1 A struktúra.....	46
5.2 Eredmények.....	48
6. Interface-számolások.....	50
6.1 A struktúra.....	50
6.2 A GaAs/AlAs interface sávszerkezete.....	52
Következtetések.....	55
Irodalomjegyzék.....	57
Képek jegyzéke.....	59
Köszönetnyilvánítás.....	60

Bevezető

Mind az alap, mind az alkalmazott tudományokban tevékenykedő kutatók napjainkban egyre nagyobb figyelmet szentelnek a félvezetők kvantumszerkezete vizsgálatának. Ma már, hála a technikai fejlődésnek, jó minőségű félvezető-heterostruktúrákat tudnak előállítani, és ezeket széles körűen használják a mikroelektronikában.

A heterostruktúrák többféle, különféle bonyolultságú rendszereket foglalnak magukba, az egyszerű heteroátmenettől a komplexebb felépítésű többrétegű struktúrákig. (Ezekről található egy rövid áttekintés az 1. fejezetben.)

Ebben a dolgozatban elméleti nézőpontból közelítek az egyszerű heteroátmenet problémájához. Két különböző félvezető közötti izolált interface elektronszerkezetét vizsgálom, és ennek révén a sáv szerkezetben levő diszkontinuitásokat; pontosabban a vezetési és a valenciásáv széleinek a szakadását az interface-nél. Ezeket a mennyiségeket a 2. fejezetben vezetem be. Mivel a használt fogalmak elterjedt magyar fordítása nem állt rendelkezésre, néha elő fog fordulni, hogy egyes mennyiségekre angol nevükkel illetve rövidítésükkel fogok hivatkozni. A fentebb említett két sáv szakadásra például az angol rövidítésükkel: CBO és VBO.

A VBO-nak és a CBO-nak különleges jelentősége van, mivel kulcsszerepet játszanak a heteroátmenet transzporttulajdonságainak leírásában, ami rendkívül fontos a technológiai alkalmazások szempontjából. Bár nagyszámú mérési adat áll rendelkezésre, ezek jelentős szórása rámutat a pontos mérések

nehézségére. A probléma elméleti megközelítése viszont nem csak azért fontos hogy kiválasszuk ezen adatok közül az ideális interface-elrendezésre leginkább jellemzőket, hanem azért is, hogy elősegítsük a jelenség minél mélyebb megértését.

A 3. fejezetben található annak a kérdésnek az elemzése, hogyan található közös energia-skála, amihez a két alapanyag sávszerkezetét viszonyítani lehetne. Ezután rövid áttekintést adok az ide vonatkozó modell-elméletekről, majd ismertetem a potenciál eltolódás szerepét a VBO számolásában.

A 4. fejezet tartalmazza egy önkonzisztens pseudopotenciális sávszerkezetszámítási eljárás elméleti alapjait. [21]

Az 5. fejezetben a tiszta GaAs és ZnSe sávszerkezetére kapott eredményeket ismertetem.

A 4. fejezetben leírt eljáráson alapuló, heteroátmenetekre vonatkozó program írása folyamatban van, ezért a 6. fejezetben ismertetem egy a szakirodalomból vett, GaAs/AlAs átmenetre vonatkozó számolás eredményét.

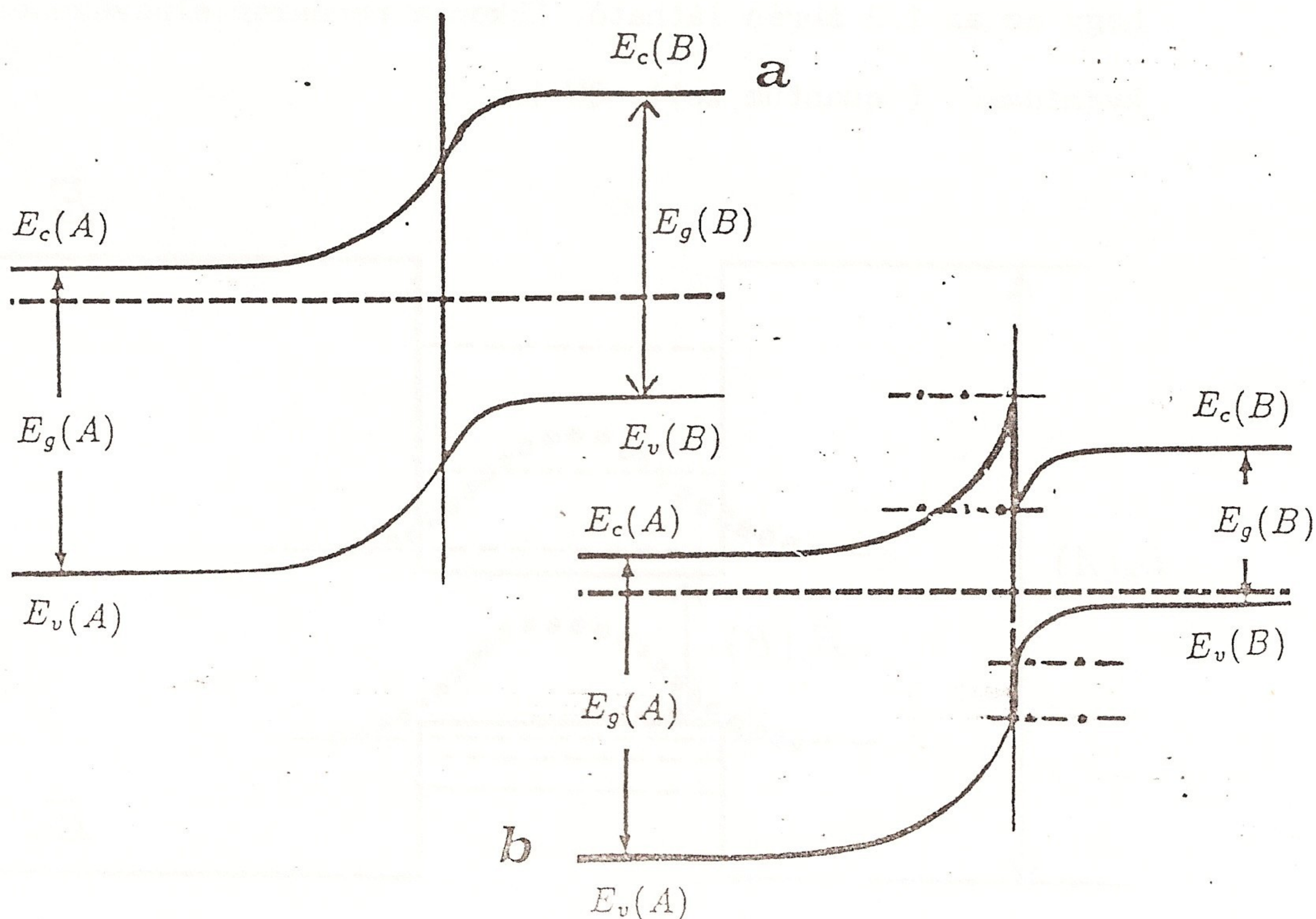
1. FEJEZET

FÉLVEZETŐ KVANTUMSTRUKTÚRÁK

1.1 Félvezető heterostrukturák

A vékonyfilm-növesztési eljárások (Molecular-Beam Epitaxy [1], Metal Organic Chemical Vapor Deposition [2]) fejlődése lehetővé teszi jó minőségű, éles határfelülettel rendelkező határátmenetek készítését. Ezekről adok most egy rövid áttekintést.

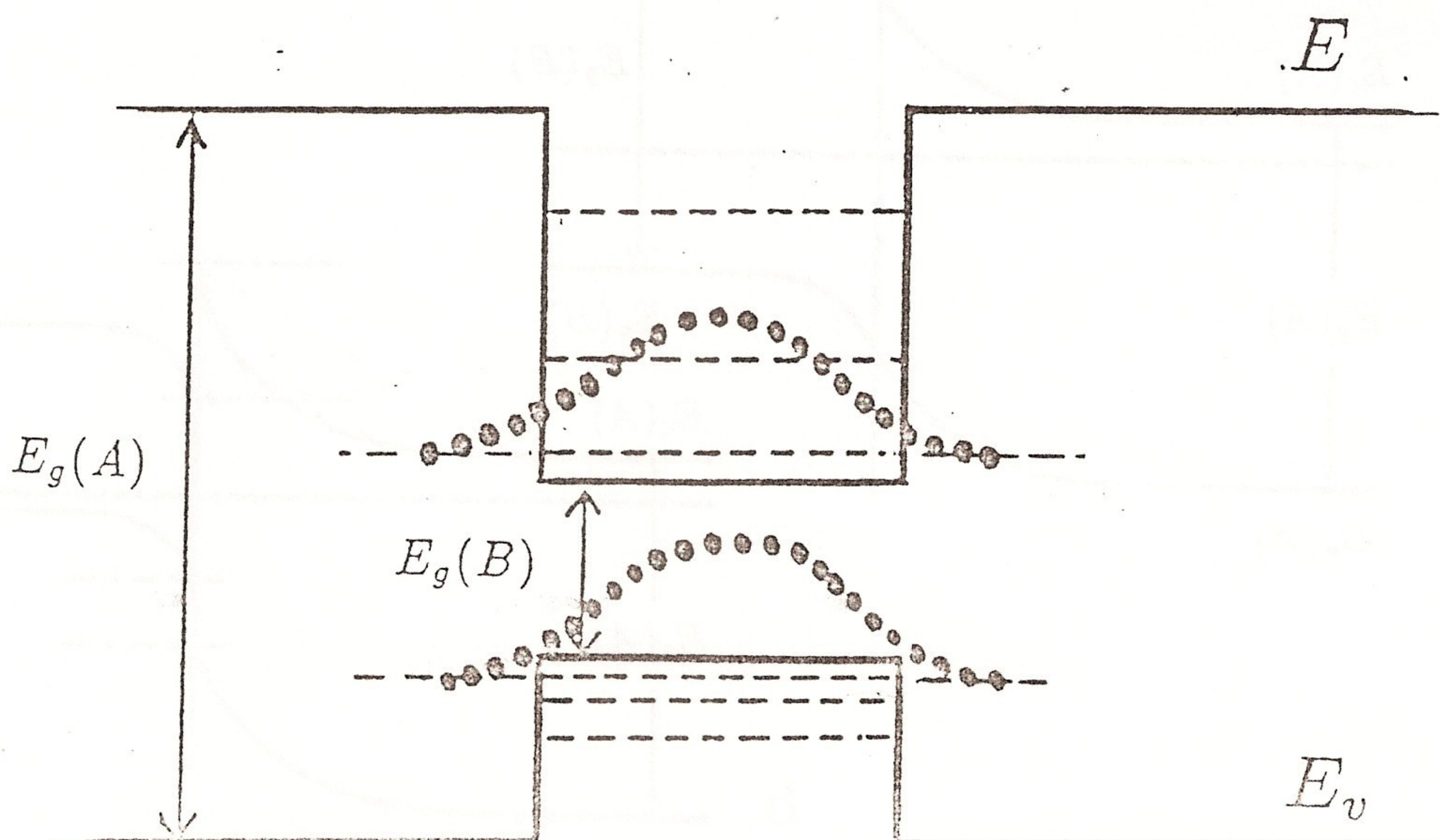
A *homoátmenet* (homojunction) két azonos, de különböző mértékben szennyezett félvezető egymás mellé helyezéséből adódik. Amint az az 1.1/a ábrán látható, ebben az esetben nincs szakadás a sávélekben, mivel az interface két oldalán lévő ugyanazon anyag tiltott sávja ugyanakkora.



1.1 ábra

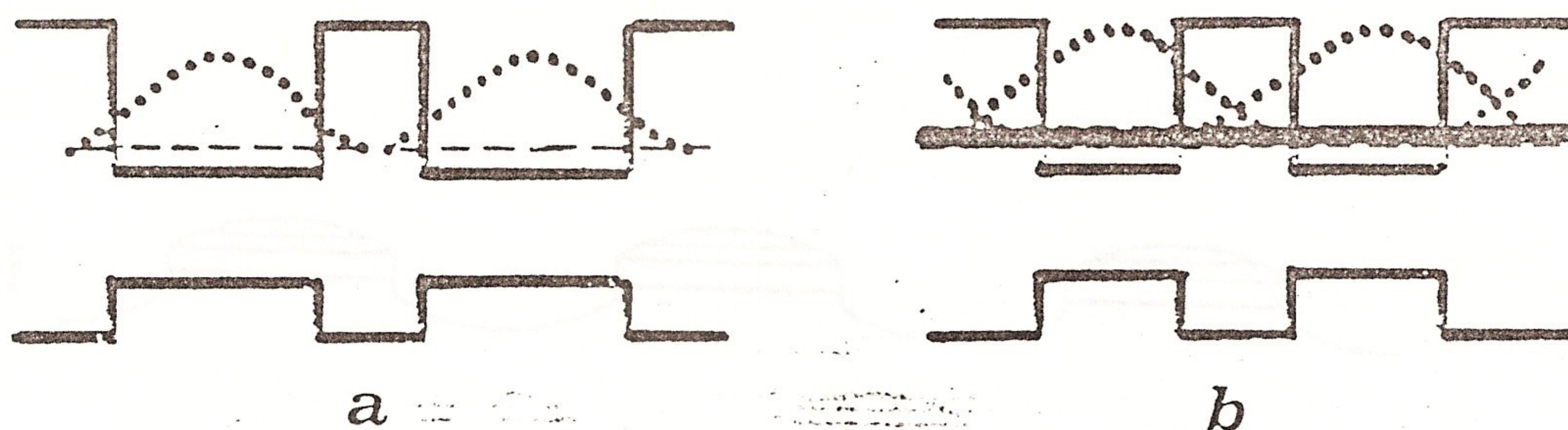
Ezzel szemben ha az interface két oldalán két különböző anyag található, melyeknek különböző a tiltott sáv-szélessége, akkor ún. *heteroátmenetet* (heterojunction) kapunk. Ekkor a valencia és vezetési sáv széle nem folytonos, az interface-nél szakadása van. (ld.: 1.1/b ábra) Ezen diszkontinuitások vizsgálata jelen dolgozat egyik fő célkitűzése.

A többrétegű struktúrákra a legegyszerűbb példa a *kettős heteroátmenet*, ahol a sávszakadások egy potenciálgödröt alakítanak ki a középső rétegben. Az ily módon csapdába ejtett elektronok és lyukak energiája függ a töltéshordozók effektív tömegétől, a középső réteg vastagságától és a potenciálgát magasságától, azaz a sávszakadás nagyságától. Magas gát esetén a töltéshordozók hullámfüggvénye lokalizált, csak kis mértékben hatol be a két szélső rétegbe, ahogy az az 1.2 ábrán látható. Ekkor a rendszer elnevezése: *kvantumkút* (quantum well, QW).



1.2 ábra

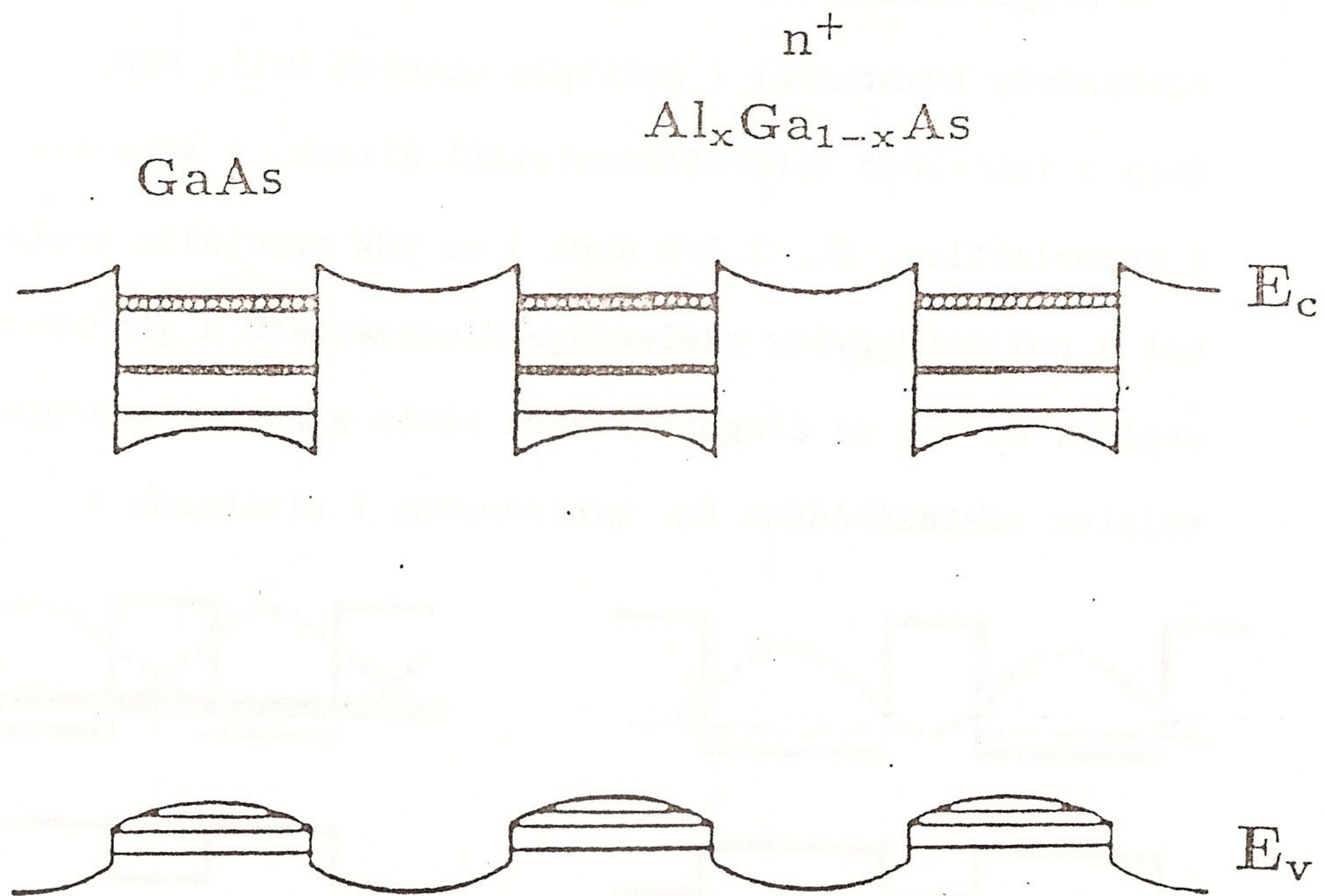
A bonyolultabb többrétegű szerkezetek, mint például a többszörös kvantumkút (multiple quantum well, MQW, 1.3/a ábra) ismétlődő heteroátmenetekből állnak. A szuperrács (superlattice, SL, 1.3/b ábra) az MQW speciális esete, ahol a hullámfüggvény szélessége összemérhető a gát szélességével és így az alagúteffektus révén a kötött energiaszintek szétszóródnak ún. minisávokba (minibands).



1.3 ábra

A félvezető heteroátmenetekenél két jelenség játszik fontos szerepet: az egyik az elektronok viselkedése a növesztési irányban (ez általában megegyezik az interface-orientációval), ami meghatározza a transzporttulajdonságokat; a másik az interface-síkkal párhuzamos potenciálgátak jelenléte.

A tértöltés-effektusok is módosíthatják a sávszélek alakját. Tipikus eset a GaAs/GaAlAs SL, amelynél a szennyezett GaAlAs-gát donorjainak elektronjai átmennek a GaAs-gödörbe, így az interface két oldalán összegyűlő ellentétes töltések görbületet okoznak a sávélékben, ahogy azt az 1.4 ábra mutatja.



1.4 ábra

1.2 Félvezető interface-ek

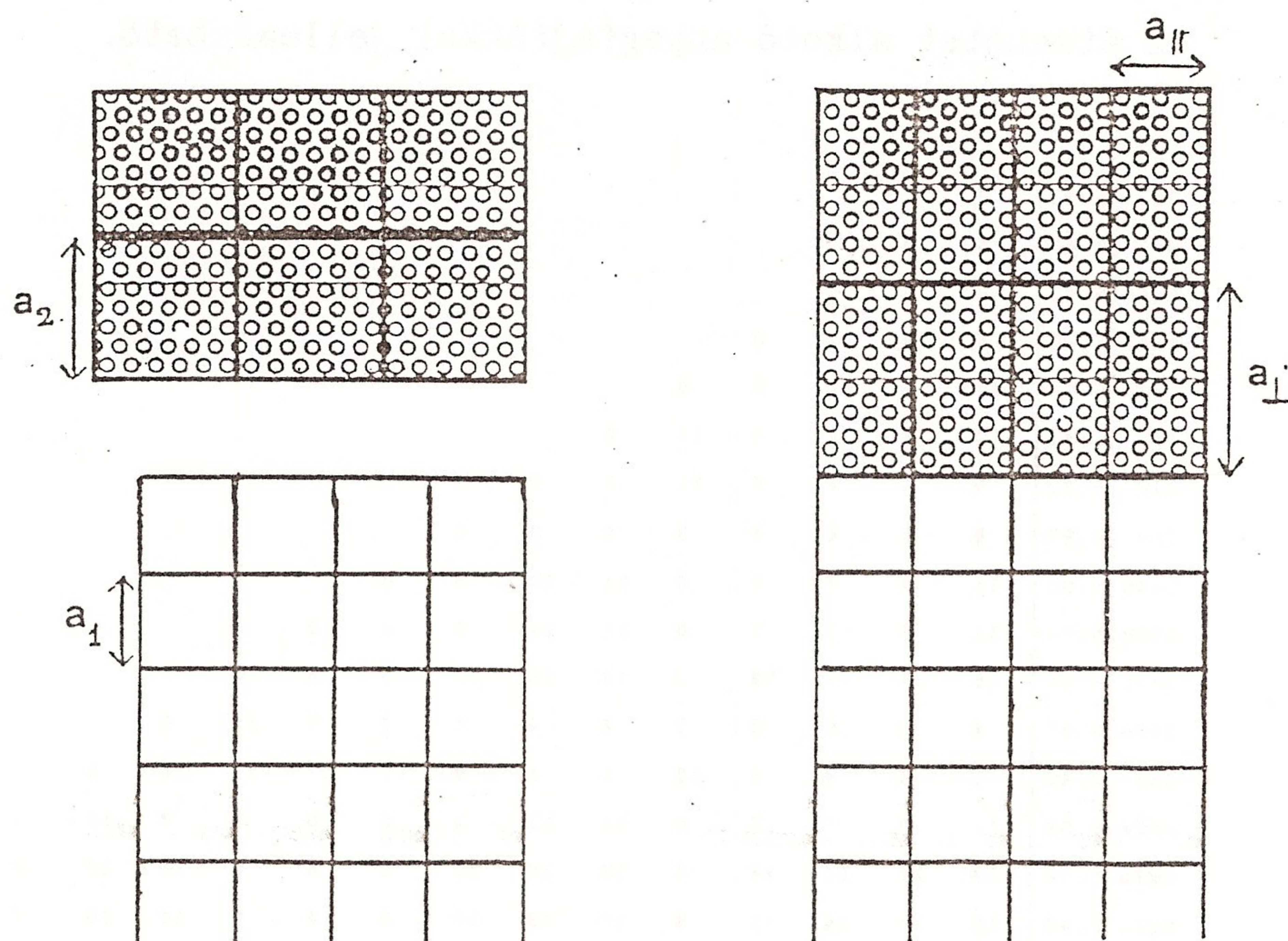
A félvezető interface-eket többféle szempont szerint csoportosíthatjuk. A legfontosabb paraméter, amely a heteroátmenet struktúráját meghatározza, természetesen az átmenetet alkotó két félvezető rácsállandója. A technológiailag fontos félvezetők közül számos jellemezhető megközelítően ugyanazzal a rácsállandóval. (Az 1.5 ábrán a legfontosabb félvezetők rácsállandói és azok relatív eltérései láthatók.) Az ilyen félvezetők által alkotott heteroátmenetet nevezzük *rácsillesztett* (lattice matched) heteroátmenetnek. A legtöbbet idézett eset a GaAs/AlAs átmenet, ahol a két rácsállandó szobahőmérsékleten 5.653 Å illetve 5.660 Å, eltérésük mindössze 0.2 %. A rácsillesztett átmenetek különösen egyszerű struktúrák, a kristályszerkezet az interface-nél nem törik meg, torzulások nem lépnek fel és az interface jórészt az átmenetet alkotó anyagfajtákkal jellemezhető.

Si	5.43	0																
Ge	5.65	4	0															
GaAs	5.65	4	0	0														
AlAs	5.65	4	0	0	0													
InAs	6.08	11	7	7	7	0												
GaP	5.43	0	4	4	4	11	0											
AlP	5.43	0	4	4	4	11	0	0										
InP	5.87	8	4	4	4	3	8	8	0									
GaSb	6.08	11	7	7	7	0	11	11	3	0								
AlSb	6.08	11	7	7	7	0	11	11	3	0	0							
InSb	6.48	18	14	14	14	6	18	18	10	6	6	0						
ZnSe	5.65	4	0	0	0	7	4	4	4	7	7	14	0					
ZnS	5.40	1	4	4	4	12	1	1	8	12	12	18	4	0				
ZnTe	6.08	11	7	7	7	0	11	11	3	0	0	6	7	12	0			
CdTe	6.48	18	14	14	14	6	18	18	10	6	6	0	14	18	6	0		
HgTe	6.48	18	14	14	14	6	18	18	10	6	6	0	14	18	6	0	0	
Å		Si	Ge	GaAs	AlAs	InAs	GaP	AlP	InP	GaSb	AlSb	InSb	ZnSe	ZnS	ZnTe	CdTe	HgTe	

1.5 ábra

A nem illesztett (lattice mismatched) heteroátmenetek esete jóval bonyolultabb. (Tipikus példa a Ge/Si) Itt ad-
va van egy alapréteg (substrate) és az erre felnövesztett
anyag megváltoztatja saját szerkezetét alkalmazkodva az a-
lapréteghez. Különleges esetben a lerakódott anyag a növe-
kedési felülettel párhuzamos síkokban felveszi az alapréteg
kristályszerkezetét. A kémiai kötések megnyúlnak, az eredeti
cinkszulfid-szerkezet felbomlik.

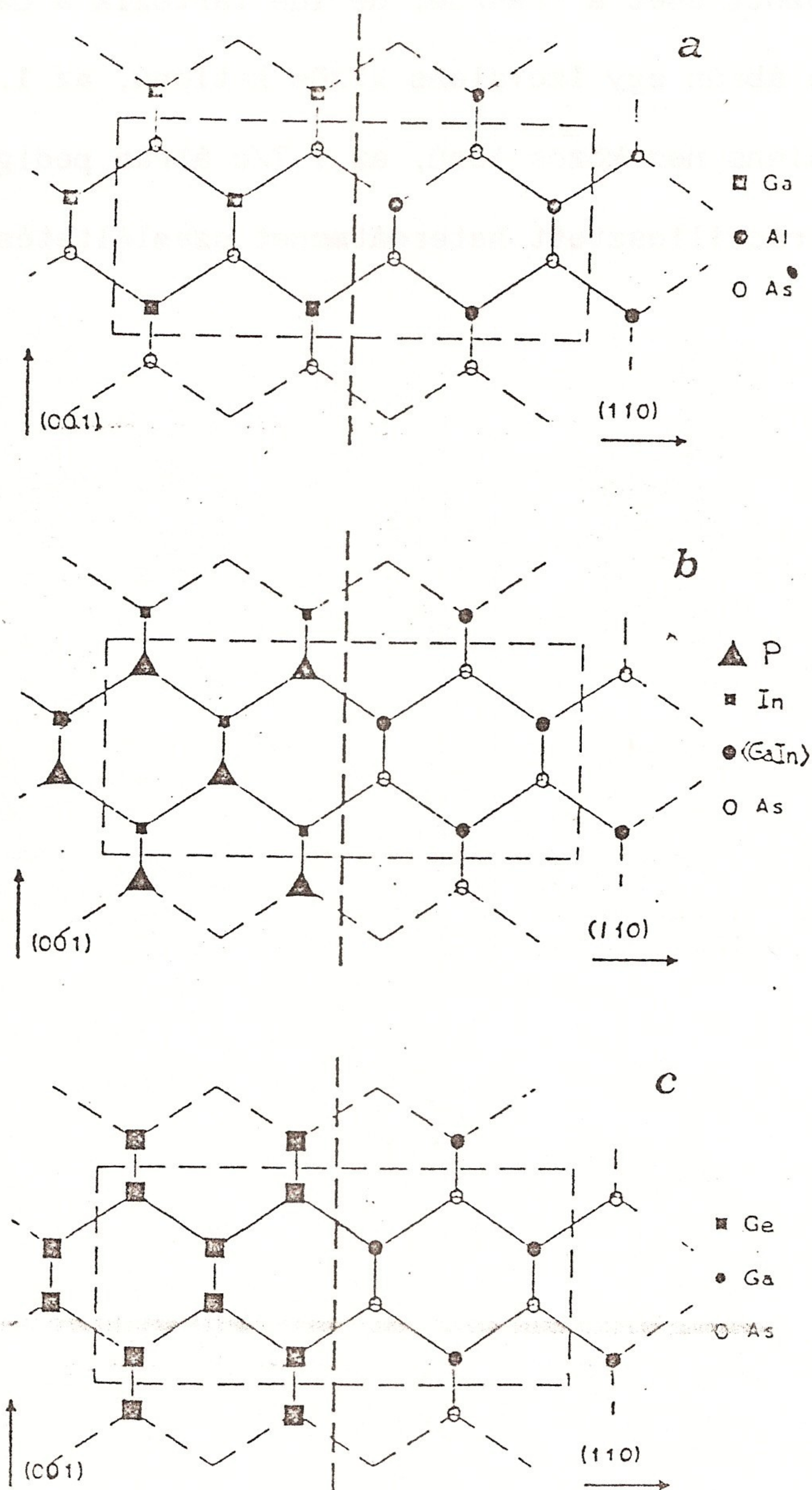
Ilyenkor általában megkülönböztetünk az interface-síkkal
párhuzamos síkokra jellemző $a_{\parallel}$ és az erre merőleges irány-
ra jellemző $a_{\perp}$ paramétert. (ld.: 1.6 ábra) Általában $a_{\parallel}$
az, amelyik megváltozott, hogy egyenlő legyen az alapréteg
 a_1 rácsparaméterével, $a_{\perp}$ -t pedig az anyag rugalmas tulajdon-
ságai határozzák meg.



1.6 ábra

Az átmenetet alkotó ionok milyensége szerint megkülönböztethetünk továbbá *izovalens* és *heterovalens* interface-eket.

Az izovalens heteroátmenet két ugyanazon csoportba (IV, III-V vagy II-VI) tartozó egyszerű, kettős vagy pszudokettős félvezetővegyületből áll. Egy csoportba azok a félvezetők tartoznak, amelyek ugyanolyan vegyértékű ionokból áll-



1.7 ábra

nak. Ezen belül a közös anionú (common anion) heteroátmenetek olyan vegyületekből állnak, amelyekben az anion megegyezik. (pl.: a GaAs/AlAs) A nem közös ionú heteroátmeneteknél a két oldalon lévő minden ion különböző. (pl.: InAs/GaSb)

A heterovalens heteroátmenet olyan félvezetőkben áll, amelyek két különböző csoportba tartoznak. A legtöbbet tanulmányozott eset a GaAs/Ge, de ide tartozik a GaAs/ZnSe is. Az 1.7/a ábrán egy izovalens közös kationú, az 1.7/b ábrán egy izovalens nem közös ionú, az 1.7/c ábrán pedig egy heterovalens rácsillesztett heteroátmenet szemléltetése látható.

2. FEJEZET

SÁVSZAKADÁSOK AZ INTERFACE-NÉL

2.1 A heteroátmenet sávszerkezetét jellemző paraméterek

A két legfontosabb paraméter a valencia ill. a vezetési sáv széleinek az interface két oldalán vett különbsége.

(valence-band offset ill. conduction-band offset, a továbbiakban: VBO ill. CBO) Mivel a VBO könnyebben hozzáférhető mennyiség, ezért a továbbiakban ezzel foglalkozunk. Ha a két alapanyag tiltott sávja ismert, a CBO számolható a következő formula alapján:

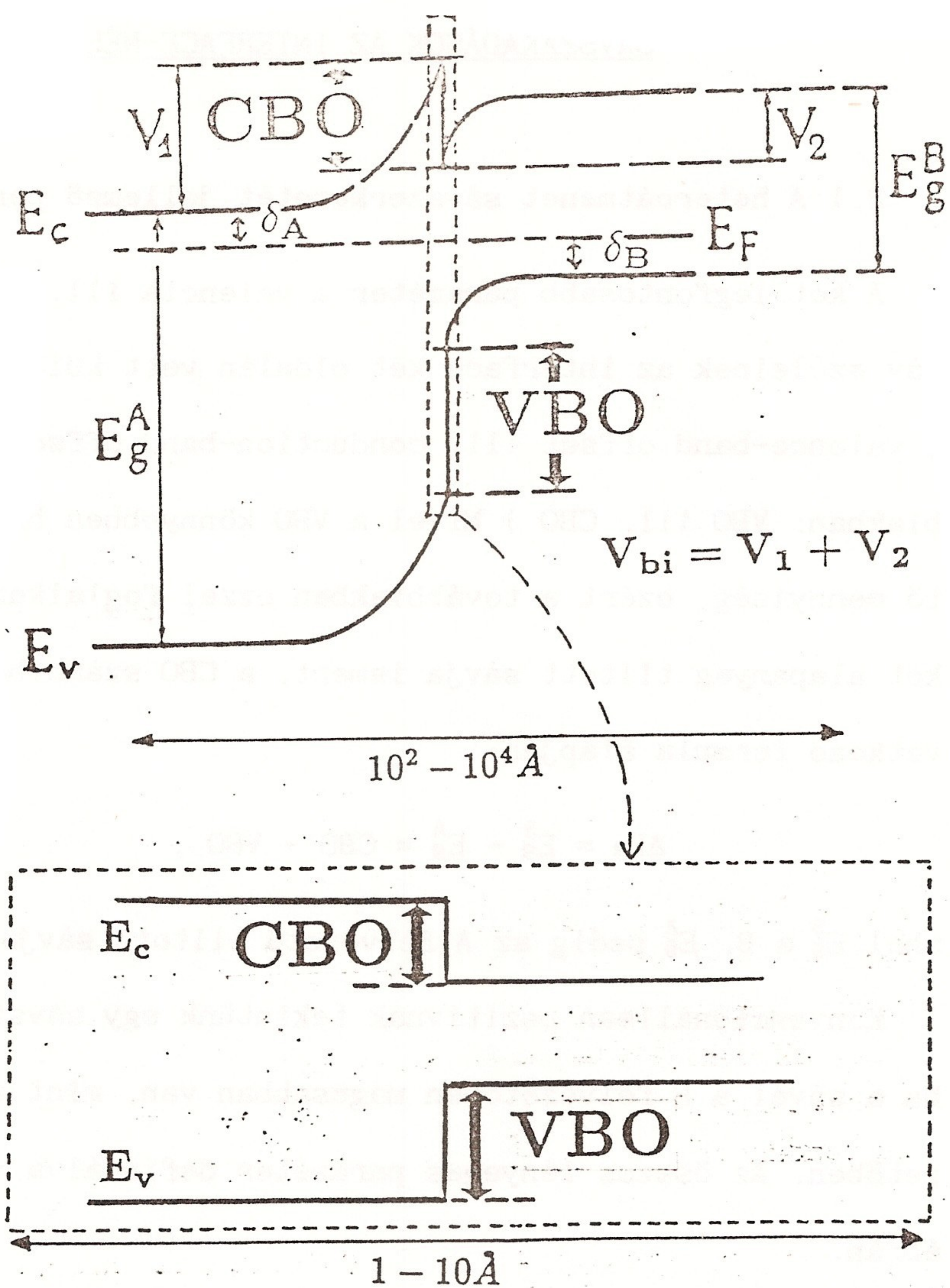
$$\Delta E_g = E_g^B - E_g^A = \text{CBO} - \text{VBO} , \quad (2.1)$$

ahol E_g^B a B, E_g^A pedig az A félvezető tiltott sávja.

Konvencionálisan pozitívnak tekintünk egy sávszakadást, ha a sáv a B félvezetőben magasabban van, mint az A félvezetőben. Az összes lényeges paraméter definiálva van a 2.1 ábrán.

Szennyezett alapanyagok esetén a sávelhajlások is fontos szerepet játszhatnak az interface-tartomány kialakulásában tértöltési és egyéb effektusok révén. Ezeket a jelenségeket a továbbiakban elhanyagoljuk, ami azt jelenti, hogy csak azt vizsgáljuk, mi történik az interface körüli szűk tartományban (1-10 Å); a sávelhajlási jelenségek vizsgálata nagyobb méretű tartomány ($10^2 - 10^4$ Å) figyelembe vételét igényelné. (ld.: 2.1 ábra)

A VBO problémája nemcsak azért lényeges, mert szükség van a technológiailag fontos rendszerek sávszakadásainak ismerek-

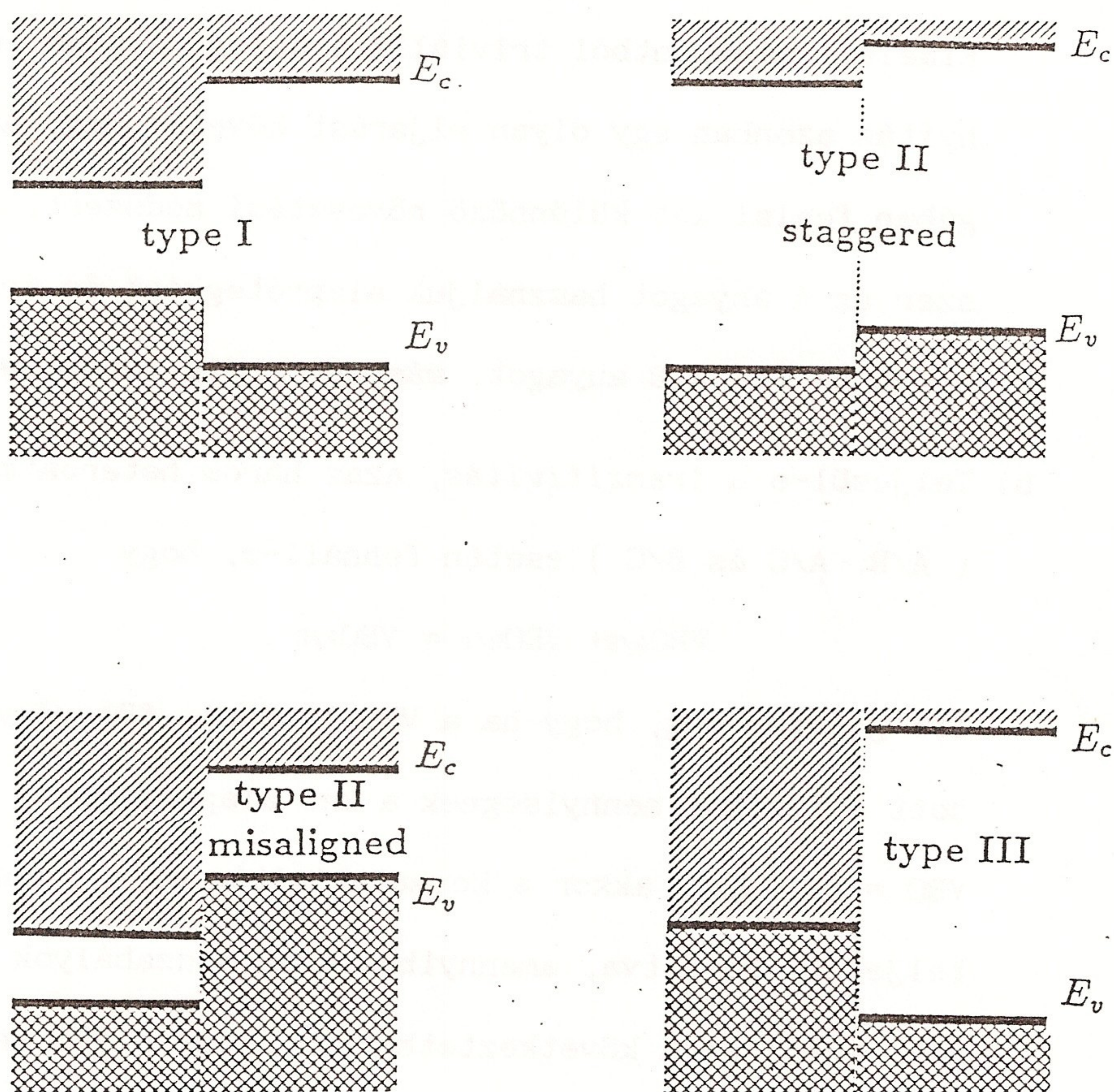


2.1 ábra

tére, hanem azért is, mert rávilágít néhány elméletileg fontos kérdésre, mint például arra, hogy elhelyezhetők-e a kontaktusba hozott félvezetők egy közös energiaskálán.

2.2 Néhány a VBO-ra vonatkozó szabály

Az energiasávok relatív helyzete az interface-nél lényegesen megváltozhat, ha a heteroátmenet egyik vagy másik komponensét kicseréljük egy másik anyagra. A lehetséges elrendezéseket a 2.2 ábra mutatja.



2.2 ábra

A sávszerkezet kialakulására belső és külső jellemzők egyaránt hatással vannak. Belső jellemzőkre példa az alapanyag-rácsállandók és tiltott sávok nagysága. Külső jellemzők alatt olyanokat értünk, mint pl. kémiai szennyező anyagok és szerkezeti hibák jelenléte illetve az atomi diffúzió a két anyag között.

Fontos tudni, hogy az egyes jellemzők mennyiben felelősek

a sávszakadás nagyságáért; azaz meghatározzák-e a VBO-t csak az alapanyag-jellemzők vagy további interface-specifikus tényezők is befolyásolják. Ennek eldöntéséhez meg kell vizsgálni három lényeges kérdést:

a) Teljesül-e a *kommutativitás*, azaz igaz-e, hogy

$$VBO_{A/B} = -VBO_{B/A} . \quad (2.2)$$

Elméleti szempontból triviális a dolog, a kísérleti bizonyítás azonban egy olyan eljárást követel meg, amely magában foglal két különböző növesztési módszert; azaz egyszer az A anyagot használjuk alapréteggként és erre növesztjük fel a B anyagot, másszor pedig fordítva.

b) Teljesül-e a *transzitivitás*, azaz három heteroátmenet

(A/B, A/C és B/C) esetén fennáll-e, hogy

$$VBO_{A/B} + VBO_{B/C} \approx VBO_{A/C} . \quad (2.3)$$

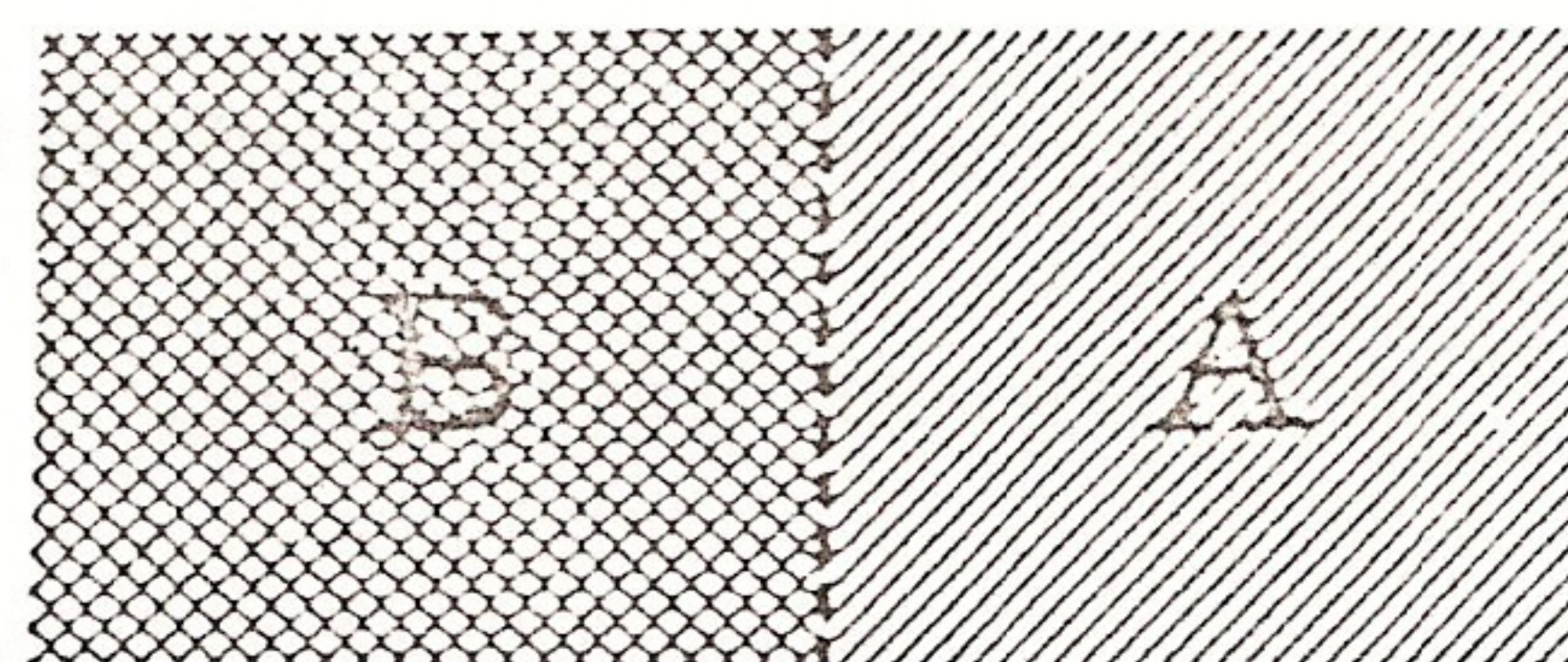
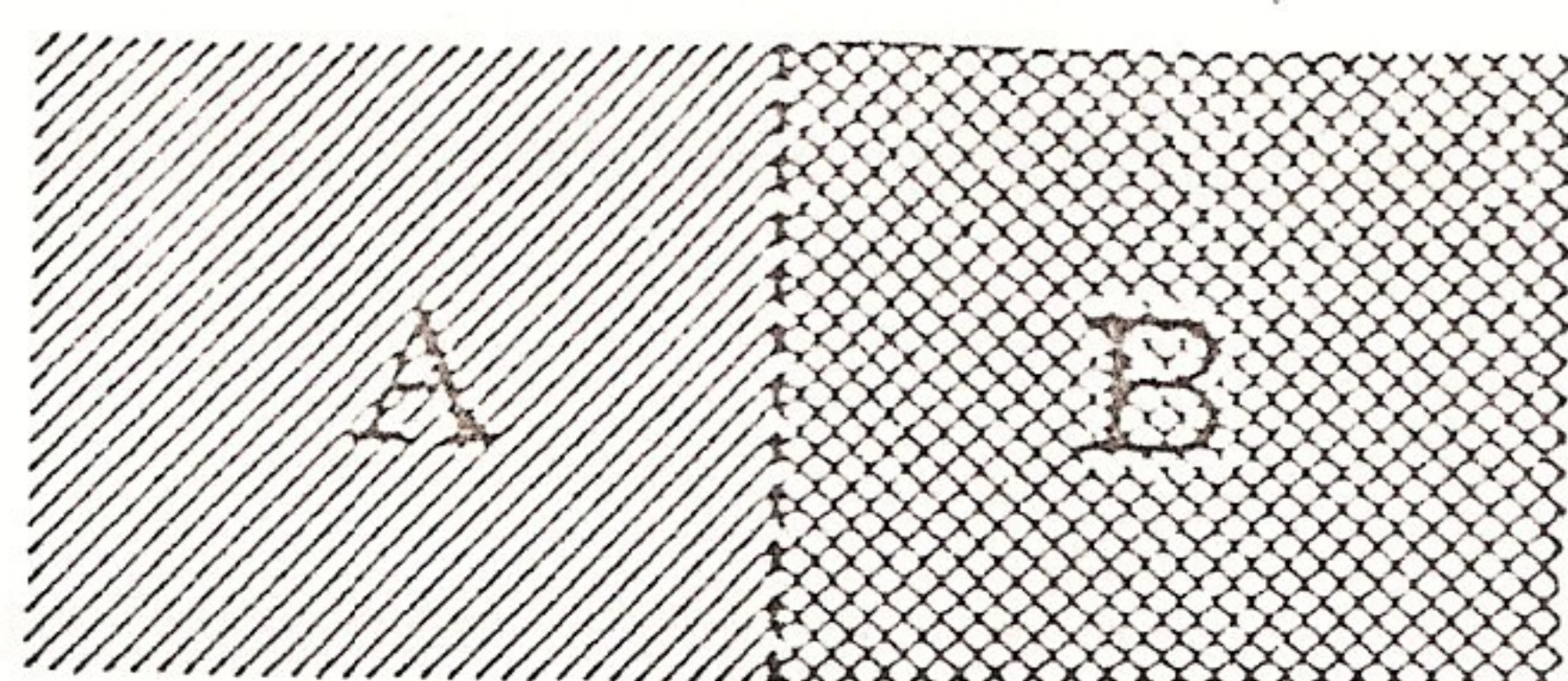
Itt jegyzem meg, hogy ha a VBO lineáris függvénye egy adott ξ fizikai mennyiségnek a két alapanyagban, azaz $VBO = \xi_B - \xi_A$, akkor a kommutativitás és a transzitivitás teljesül. Fordítva, amennyiben ezek a szabályok fennállnak, ebből arra következtethetünk, hogy a VBO erősen függ az alapanyag-jellemzőktől.

c) Az *interface-részletek* szerepén belül két fontos kérdést kell megvizsgálni: milyen hatással van a VBO-ra az *interface-orientáció* és az átmenet éles, ugrásszerű (*abrupt*) jellegének megváltozása. Ha a mikroszkopikus interface-részletek befolyásolják a VBO nagyságát, akkor az ideális interface-től való lehetséges eltérések kézben tartása alkalmas eszközt jelent a sávszakadások ellenőrzéséhez és

hangolásához a technológiai igényeknek megfelelően.

Ezen három szabály szemléltetése látható a 2.3 ábrán.

(a)

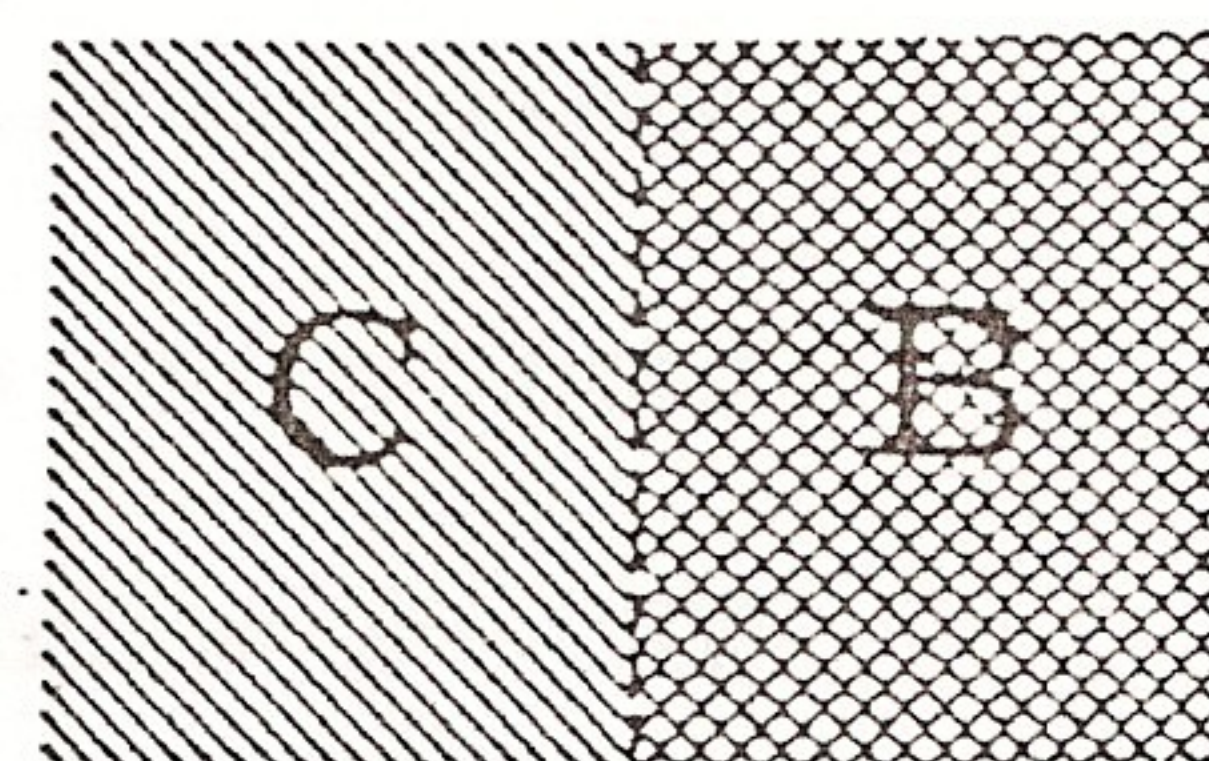
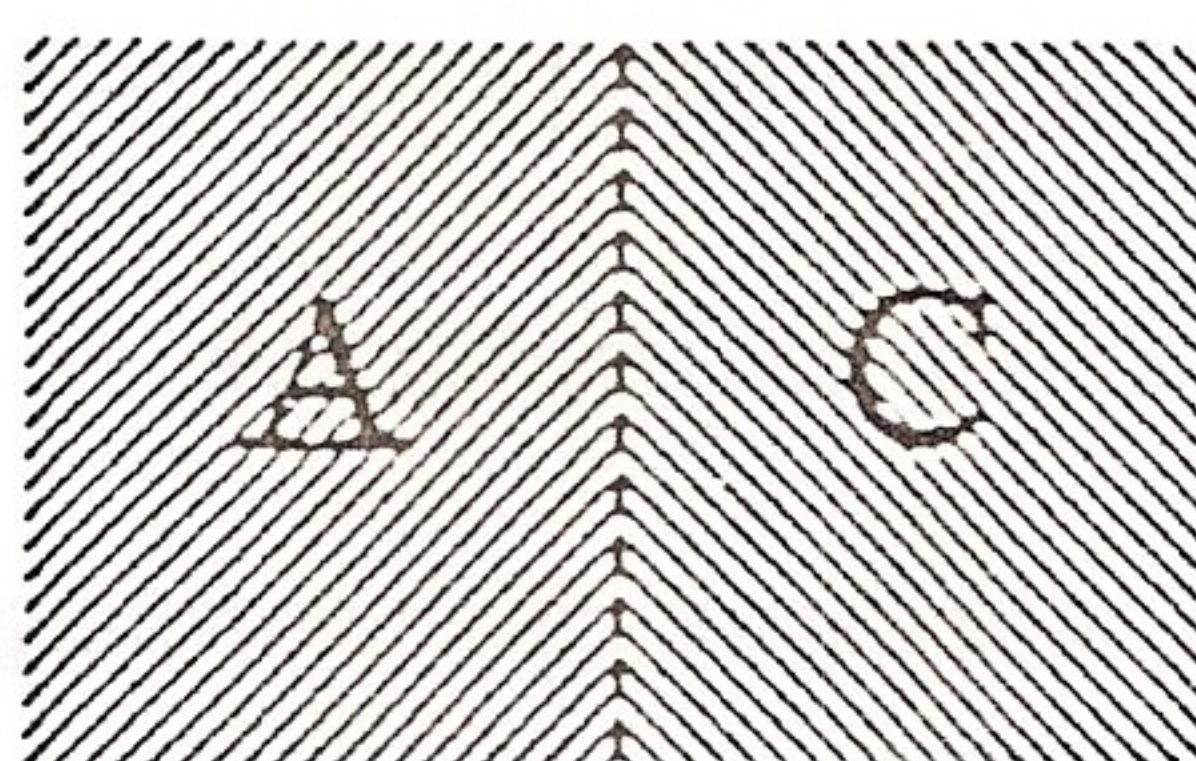
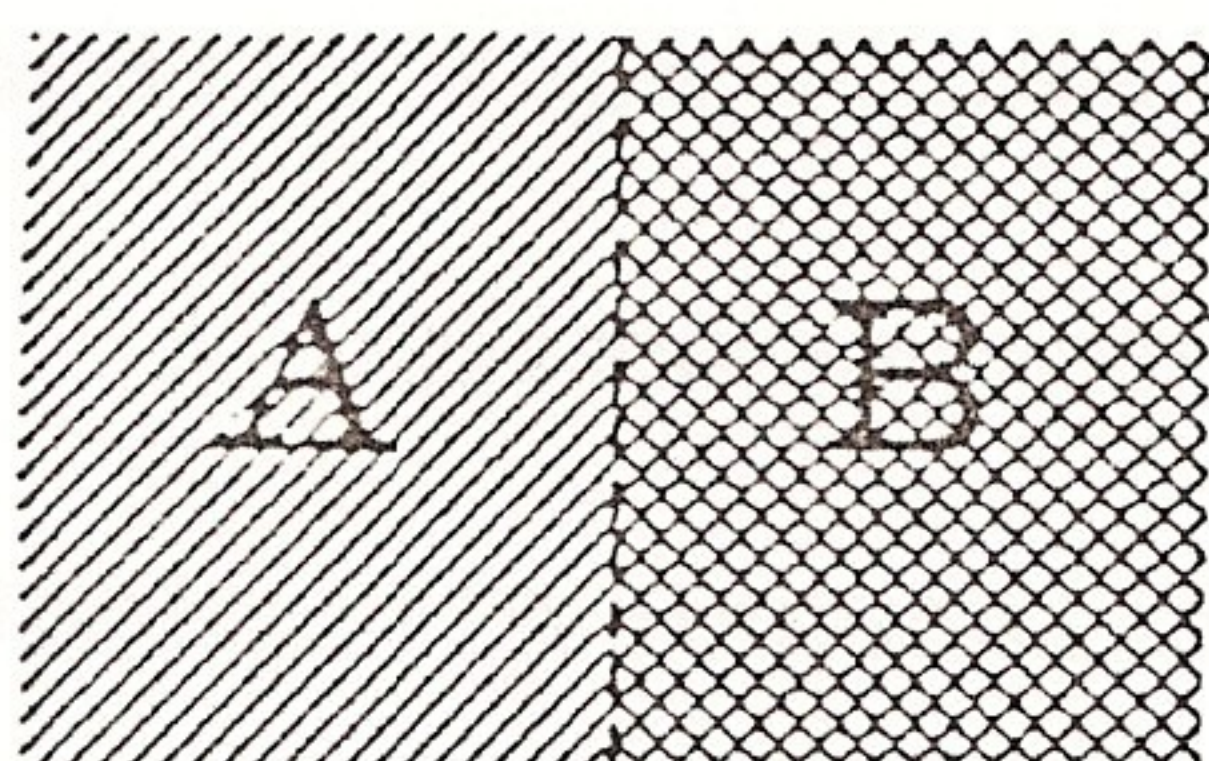


$VBO_{A/B}$

$\approx$

$-VBO_{B/A}$

(b)



$VBO_{A/B}$

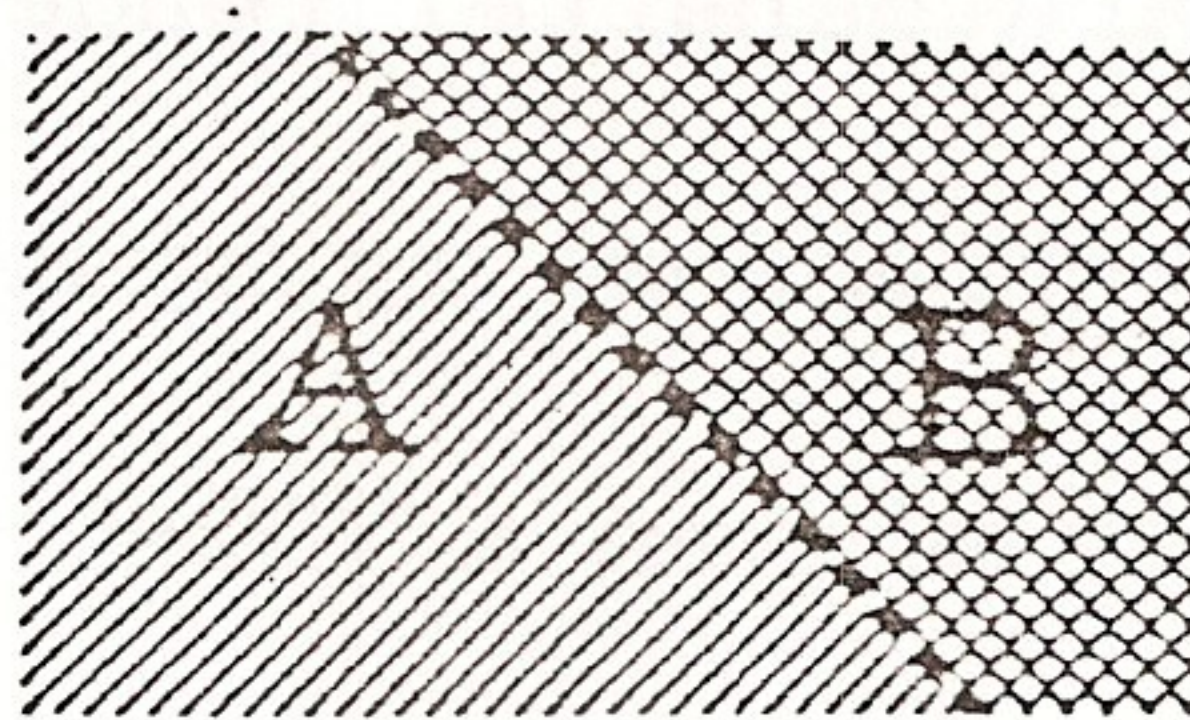
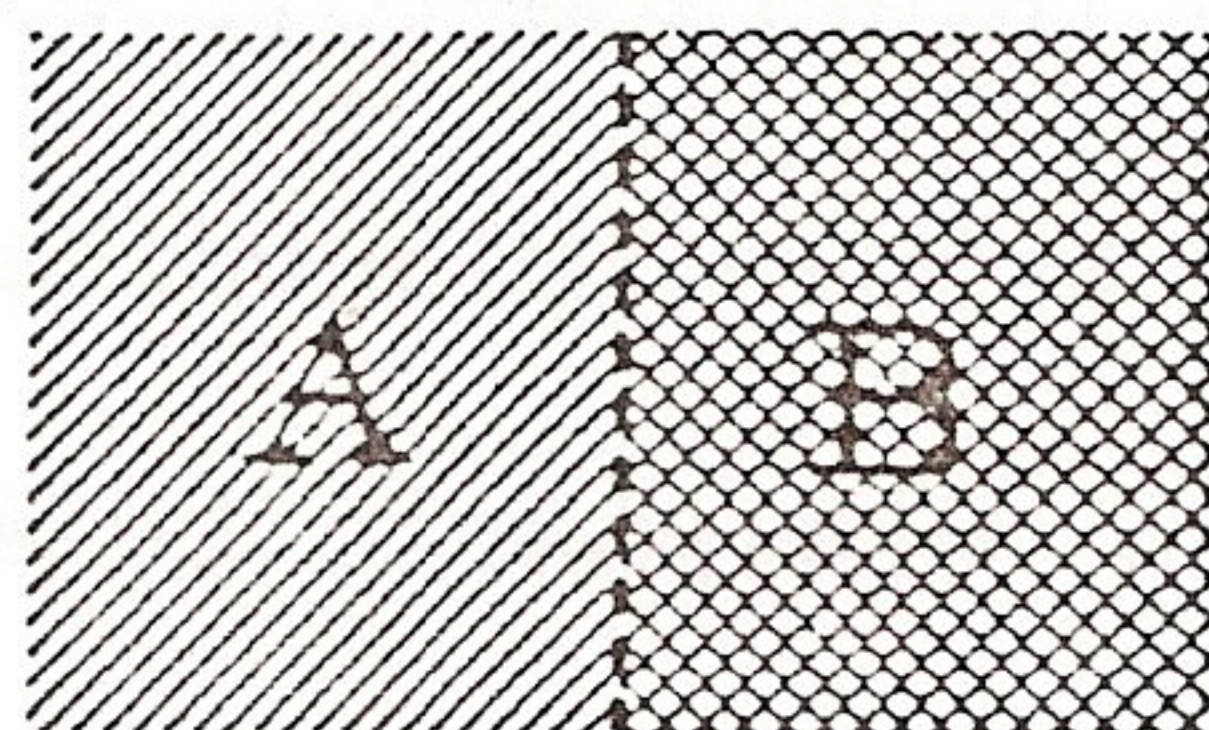
$\approx$

$VBO_{A/C}$

+

$VBO_{C/B}$

(c)



$VBO(001)$

$\approx$

$VBO(110)$

$\approx VBO_{A/B}(\text{non abrupt})$

$\approx$

$VBO(111)$

2.3 ábra

2.3 Kísérleti adatbázis

Nagyszámú a VBO-ra vonatkozó mérési adat áll ma már rendelkezésünkre hála a folyamatosan fejlődő technikának. Ezeknek az adatoknak azonban elég nagy a szórása, a különböző szerzők által közölt eredmények is sokszor nagymértékben eltérnek egymástól.

Ennek az eltérésnek egyik oka, hogy az egyes méréseket eltérő mérési módszerekkel végezték [3]. A VBO nem közvetlenül mérhető mennyiség, értéke különféle modellekből adódik, melyek a közvetlenül mérhető mennyiségeket összekötik a sávszakadással. Így a közvetlenül mérhető mennyiségek mérésének pontossága általában különbözik a VBO pontosságától. A VBO-ra vonatkozó mérések pontossága általánosan elfogadott vélemény szerint napjainkban 0.15 eV körül van.

Az adatok szórásának a másik oka az, hogy a kísérleteket olyan interface-eken végezték, amelyek elég távol állnak az ideális éles határatmenettel rendelkező interface-től; ezek az ún. reális interface-ek egymástól is erősen különbözhetnek aszerint, hogy milyen a VBO-t erősen befolyásoló tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezek közé tartozik a nagyfokú atomi interdiffúzió, idegen atomok jelenléte, különféle torzulások a kristályszerkezetben, tértöltés kialakulása stb.

Mit mutatnak a kísérleti adatok a kommutativitásról, a tranzitivitásról és az interface-részletek szerepéről?

A kommutativitás ezek szerint teljesül, GaAs/AlAs és ZnSe/Ge rendszerekre elvégzett mérések szerint az eltérés a mérési pontosságon belül van.

A tranzitivitás vizsgálatánál már ellentmondó eredmények

születtek. A (GaAs, Ge, AlAs) csoportnál 0.01-0.03 eV eltérést találtak, míg pl. a (GaAs, Ge, CuBr) csoport már jelentős 0.2 eV eltérést mutatott.

Ami az interface irányítottságától való függést illeti, úgy találták, hogy heterovalens interface-eknél (Ge/GaAs) a VBO erősen függ az interface orientációjától.

Az interface-részletek hatása a sávszakadás nagyságára nem jól tesztelhető, mivel az interface mikrostruktúrájának ismerete ma még túl van lehetőségeink határain; így adott esetben általában az sem ismert, hogy pontosan milyen interface-re történik a mérés.

Néhány kísérlet (pl. ellenőrzött szennyezésnek vetették alá az interface-t) viszont azt mutatta, hogy az interface-részletek megváltozása esetenként nagyon nagy változást (0.5 eV) produkálhat a VBO-ban.

A 2.4 ábrán látható táblázat AlAs/GaAs és GaAs/Ge rendszerekre vonatkozó mérési eredményeket tartalmaz.

	VBO(eV)	technique	authors	comments
AlAs/GaAs	0.45	charge transfer	Wang and Stern (1985)	MBE, (001)
	0.40	photoemission	Waldrop et al. (1981)	GaAs on AlAs (110)
	0.15	photoemission	Waldrop et al. (1981)	AlAs on GaAs (110)
	0.38	photoemission	Katnani and Bauer (1986)	commutativity, (001)
GaAs/Ge	0.48	photoemission	Waldrop et al. (1982)	Ge on GaAs(111)Ga
	0.55	photoemission	Waldrop et al. (1982)	Ge on GaAs(001)Ga
	0.56	photoemission	Waldrop et al. (1982)	Ge on GaAs(110)
	0.60	photoemission	Waldrop et al. (1982)	Ge on GaAs(100)As
	0.60	photoemission	Waldrop et al. (1982)	Ge on GaAs(111)As

2.4 ábra

3. FEJEZET

A KÖZÖS ENERGIASKÁLA ÉS A POTENCIÁL LINEUP PROBLÉMÁJA

3.1 Elméleti bevezető

Elméleti nézőpontból a VBO-t a következőképpen lehet egzaktul definiálni. Vegyünk két különböző félvégtelen félvezető kristály közötti A/B átmenetet. Az $n(E, r)$ lokális állapotsűrűség-függvény az interface-től távol az A ill. B alapanyagban r -nek periodikus függvénye. Ha vesszük ezekben a tartományokban az $n(E, r)$ térbeli átlagát, akkor a két alapanyag $g_A(E)$ ill. $g_B(E)$ állapotsűrűség-függvényét kapjuk. Az így definiált alapanyag-állapotsűrűségek valenciásáv éleknél vett különbsége adja a VBO-t.

A lokális állapotsűrűség használatát azonban általában elkerülik, mivel nehezen számolható mennyiség. Helyette rögtön a két alapanyag integrált állapotsűrűségét használják. Ezek szintjei meghatározzák a két alapanyag sávstruktúráját, így a probléma ezen két sávszerkezet közötti merev eltolódás vizsgálatára egyszerűsödik. Ennek az egyszerűsödésnek azonban ára van.

3.2 A közös energiaskála problémája

Az energia csak egy tetszőleges állandó erejéig van meghatározva, azaz határozatlan az energiaskála nullszintje. Ez nem is zavar bennünket, ha csak egy egyszerű alapanyag-sáv szerkezet számolásról van szó. A heteroátmeneteknél azonban ez a probléma kritikus pontját alkotja, mivel nem ismerjük azt a közös energiaskálát, amelyhez a két félvezető sáv szer-

kezetét viszonyítani lehetne. Ily módon a heteroátmenet sávszerkezetének vizsgálata két különálló problémára bomlik. Először ki kell számolni a két alapanyag sávszerkezetét, majd meg kell keresni azt a közös energiaskálát, amelyen ezeket a sávszerkezeteket el lehet helyezni.

A probléma megoldására különféle módszereket alkalmaznak. A pontos numerikus önkonzisztens (esetleg ab-initio) számításokból az interface-nél lévő töltéseloszlást is megismerjük (egy ilyen mutatok be a 4. fejezetben), míg a különféle modellelméletekben kisebb-nagyobb közelítő feltevésekkel élnek. Ezeknek az az előnye, hogy könnyebben végrehajthatók és az anyagok nagyobb részére alkalmazhatók. (Néhány ilyen modellelméletet nagy vonalakban ismertetni fogok a következő két pontban.)

3.3 Referenciaszint-elméletek

Tegyük fel, hogy létezik közös abszolút energiaskála. Ekkor minden félvezetőre létezik E_r referenciaszint ezen a skálán. A valenciasáv maximumának helyzete az E_r -hez viszonyítva:

$$E_v^r = E_v - E_r \quad (3.1)$$

Egy A/B átmenetnél a következőképpen kell megválasztanunk a referenciaszinteket:

$$E_r(A) = E_r(B) \quad (3.2)$$

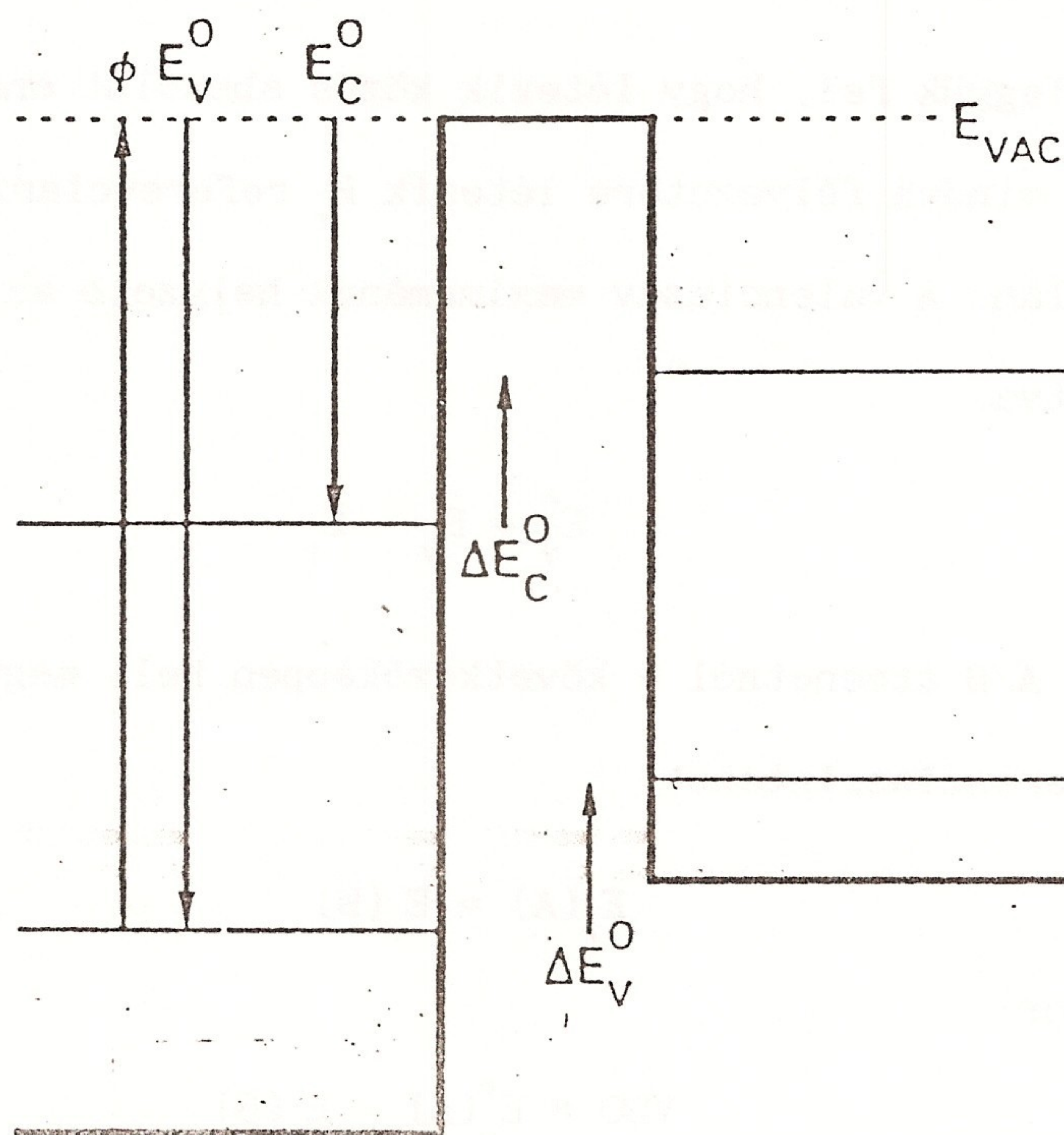
Ekkor:

$$VBO = E_v^r(A) - E_v^r(B) \quad (3.3)$$

Látszik, hogy a kommutativitás és tranzitivitás teljesül, sőt az interface-orientációtól való függetlenség is. Tudjuk viszont a kísérleti eredményekből, hogy a VBO némely esetben igenis függ az interface irányítottságától. Tehát a modell hiányossága rögtön kitűnik. Módosították az elméletet úgy, hogy az E_r referenciaszintet függővé tették az orientációtól, de ez az egyszerű modell már nem jól működik, ha az interface-részleteket is figyelembe akarjuk venni.

Számos olyan modellelmélet látott napvilágot, amely a vákuumszintet tekinti megfelelő közös referenciaszintnek. Ez nem más, mint a szilárdtesttől végtelen távolságra eltávolított elektron energia-nullszintje.

A heteroátmenetnél a vákuumszint akkor tekinthető jó referenciaszintnek, ha az átmenetet alkotó félvezetők között nincs kölcsönhatás illetve ha egy vékony vákuumréteggel van-



3.1 ábra

nak elválasztva egymástól, ahogy az a 3.1 ábrán látható. Ekkor ugyanis az interface-részletek nem fontosak, a VBO csak az alapanyag-jellemzőktől függ.

A vákuumszintet, mint referenciaszintet használó elméletekre közös néven mint *elektronaffinitás-szabályra* hivatkoznak. Az elnevezés Andersontól [4] ered, aki a CBO-t a két félvezető elektronaffinitásainak különbségeként adta meg. Ha a tiltott sávok ismertek, a VBO számolható. Jelölje Φ az ionizációs potenciált a félvezetőben, ez a valenciasávél és a vákuumszint távolsága (pozitív), ekkor $E_v^r = -\Phi$, tehát

$$VBO = -(\Phi_A - \Phi_B) \quad (3.4)$$

A modell ellen szól az, hogy nem tudjuk, milyen ionizációs potenciált használjunk. A kísérleti értékek nem megfelelőek, mivel a mérések valódi felületekre vonatkoztak és mert az ionizációs potenciál erősen függ a felülettől, az adatok igencsak szórnak.

Ezért az ionizációs potenciálok megfelelő ideális félvezető-felületekre vonatkozó számolt értékeire van szükség, ahogy azt Freeouf és Woodall [5] javasolta. Ezeket a felületeket referenciafelületeknek nevezzük.

Az, hogy a két félvezető között nincs kölcsönhatás, kifejezhető a következőképpen is: az interface-töltéssűrűség egyenlő a két referenciafelület töltéssűrűségeinek szuperpozíciójával. Ha az egyenlőség nem teljesül, akkor a kettő különbségét δn -nel jelöljük és *interface-dipólnak* nevezzük.

Tehát kijelenthetjük: az elektronaffinitás-szabály akkor működik helyesen, ha az interface-dipól elhanyagolhatóan kicsi.

További referenciaszint-elméletek: Harrison [6] erős kötés közelítésen alapuló számolást végezve azt javasolta, hogy a szabad atomok által meghatározott vákuumszintet használják referenciaszintként.

Frensley és Kroemer [7] olyan gömbszimmetrikus töltéssűrűségek szuperpozíciójával előállított töltéssűrűséget használt, ahol a köztes tartományokban a töltéssűrűség elhanyagolható, így a belőle számított potenciál jól közelíti a végtelenbeli potenciált, tehát használható referenciaszintként.

3.4 Tersoff modellje

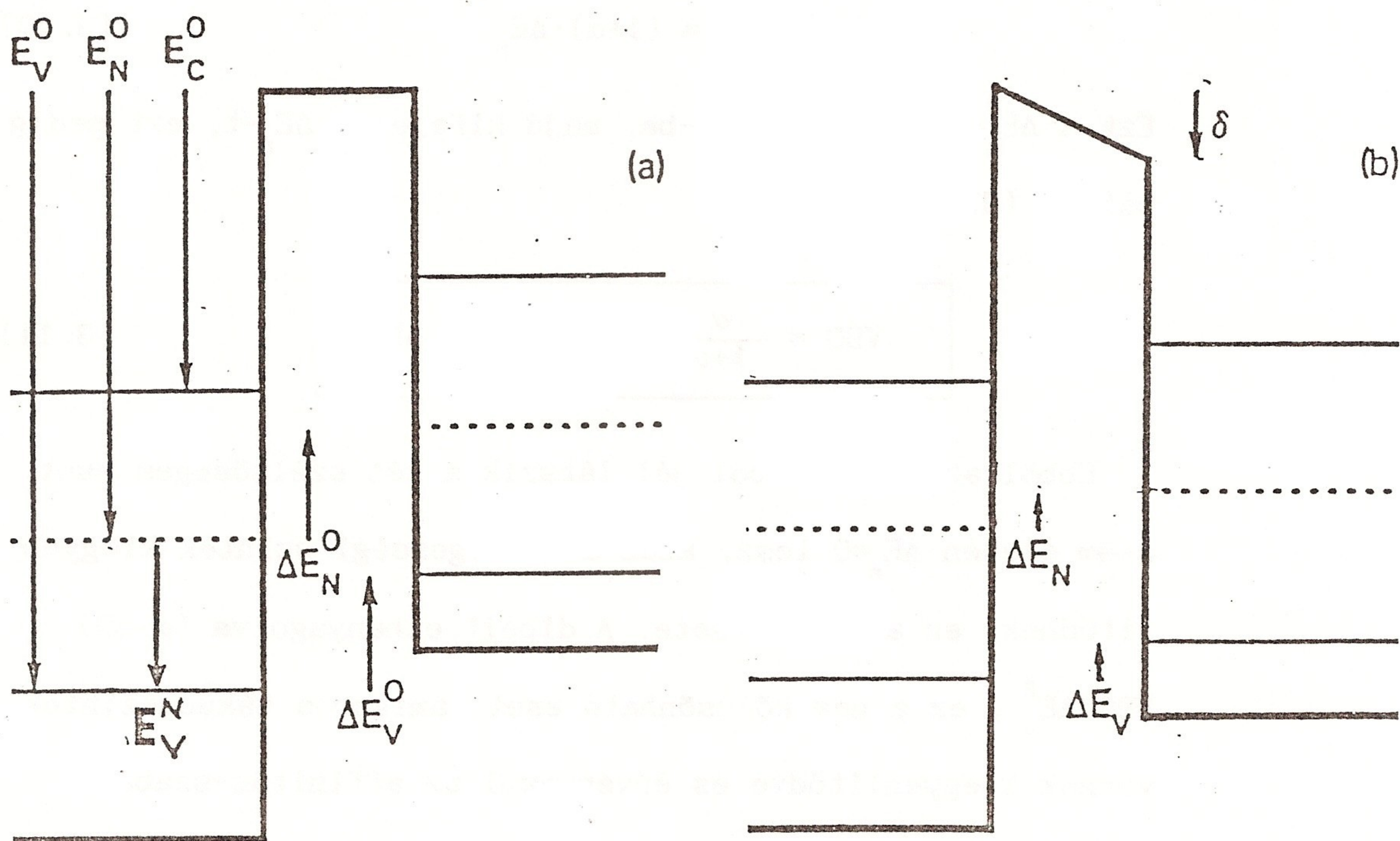
Tersoff [8] modelljének alapötlete kapcsolódik az elektronaffinitás-szabályhoz, de kiemeli az interface-dipól szerepét, amely úgy jön létre, hogy a két félvezető között kölcsönhatás lép fel, elektronáramlás jön létre az interface-en át, aminek következtében töltésszétválasztódás alakul ki.

Megvilágítandó az elméletét Tersoff egy fém-fém interface-ből indult ki. Ha két fémet érintkezésbe hozunk, töltésáramlás indul meg, amely addig tart, amíg a Fermi-szintek (amik jól meghatározottak) ki nem egyenlítődnek. Ez a különbség a Fermi-szintek között megfelel egy interface-dipólnak.

Tersoff ötlete az volt, hogy a félvezetők esete valahol "félúton" van a fémek és a nem kölcsönható (dipól nélküli) félvezető heteroátmenetek esete között. Ezen azt kell érteni, hogy a fémeknél is van közös referenciaszint (a Fermi-szint) és a dipól nélküli átmeneteknél is van közös referenciaszint (a vákuumszint). Ezért Tersoff javasolta a

félvezetőknél egy "semlegességi-szint" (neutrality level) bevezetését, amely analóg a fémek Fermi-szintjével és jellemző minden félvezetőre.

A problémát a 3.2 ábrán szemléltetjük. A 3.2/a ábrán látható a kölcsönhatás nélküli heteroátmenet esete. Szaggatott vonallal van jelölve a semlegességi-szint, 0 index-szel a vákuumszinthez, n index-szel a semlegességi szinthez viszonyított mennyiségeket jelöltük. Az index nélküli mennyiségek arra az esetre vonatkoznak, amikor a töltésátrendeződés már végbement (3.2/b ábra), kialakult az interface-dipól (δ).



3.2 ábra

Vezessük be az α paramétert a következőképpen:

$$\delta = -\alpha \cdot \Delta E_n \quad (3.5)$$

ahol $\alpha > 0$. Mivel a sávszerkezetek δ -val való merev eltolódá-

sáról van szó, a VBO kifejezhető a következőképpen:

$$VBO = \Delta E_v^0 + \delta = \Delta E_v^0 - \alpha \cdot \Delta E_n \quad (3.6)$$

Felírható a következő egyenlet (a 3.2/a ábra alapján):

$$E_v^n(A) + \Delta E_n^0 = E_v^n(B) + \Delta E_v^0 \quad (3.7)$$

Amiből:

$$\Delta E_v^n + \Delta E_n^0 = \Delta E_v^0 \quad (3.8)$$

Fennáll:

$$\Delta E_n = \Delta E_n^0 + \delta = \Delta E_n^0 - \alpha \cdot \Delta E_n \quad (3.9)$$

Amiből:

$$\Delta E_n^0 = (1+\alpha) \cdot \Delta E_n \quad (3.10)$$

Ezt a ΔE_n^0 -t beírva (3.8)-ba, majd kifejezve ΔE_n -t, ezt pedig beírva (3.6)-ba kapjuk:

$$VBO = \frac{\alpha}{1+\alpha} \Delta E_v^n + \frac{1}{1+\alpha} \Delta E_v^0 \quad (3.11)$$

Ebből az egyenletből jól látszik a két szélsőséges eset. $\alpha \rightarrow \infty$ esetén $\Delta E_n = 0$ lesz, azaz a semlegességi szintek kiegyenlítődnek, ez a fémek esete. A dipólt elhanyagolva ($\alpha \rightarrow 0$) $VBO = \Delta E_v^0$, ez a nem kölcsönható eset, amikor a vákuumszintek vannak kiegyenlítődve és érvényesül az affinitás-szabály.

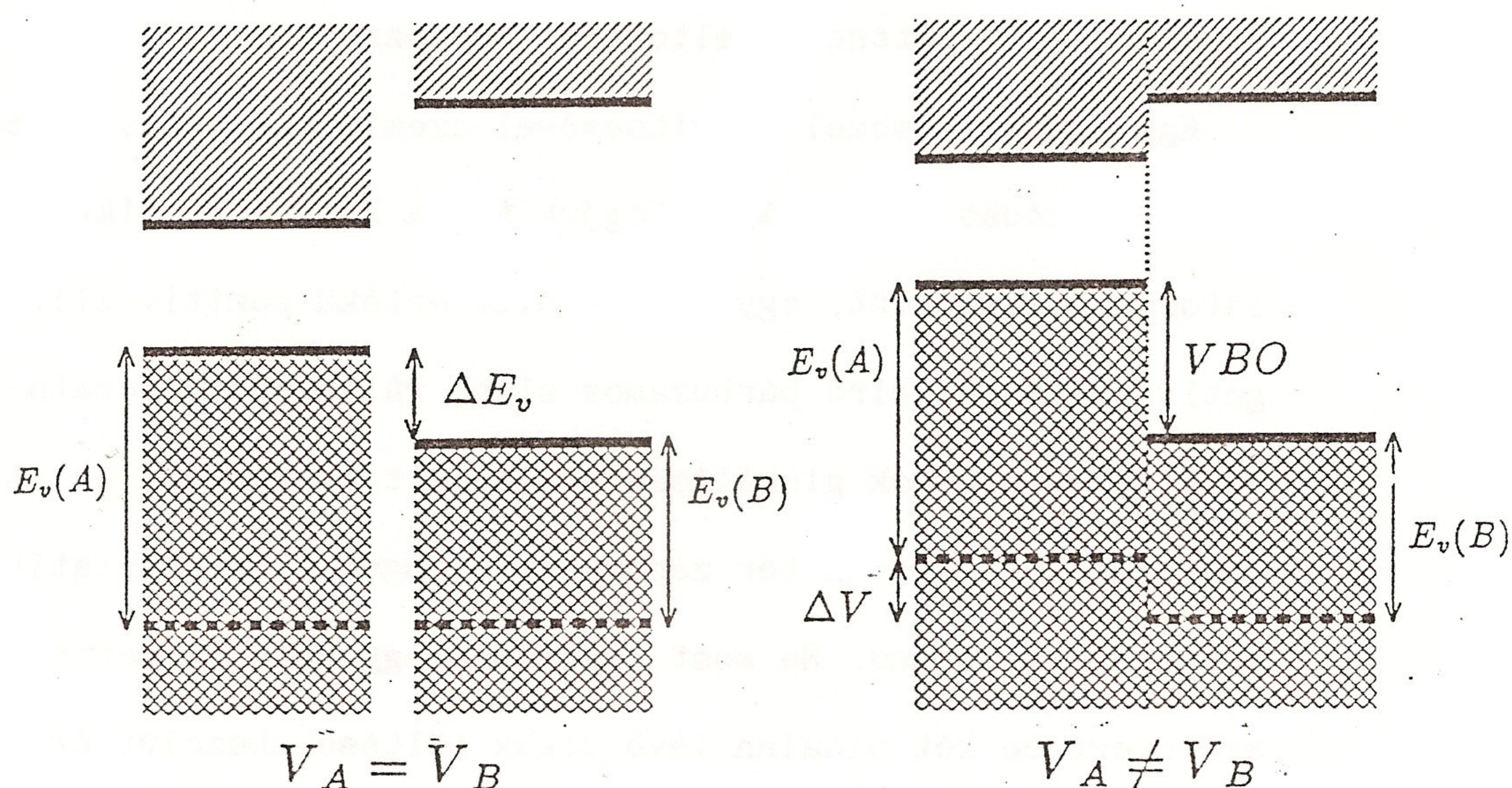
Tersoff kimutatta, hogy $\alpha \approx 10$ a tipikus érték, tehát a félvezető heteroátmenetek esete közel áll a fémek esetéhez, azaz a $VBO \approx \Delta E_v^0$ egy jó közelítésnek számít.

Itt említem meg, hogy létezik az ún. közös anion szabály, mely szerint közös anionú interface-nél a VBO kicsi, lévén a valenciasáv tetején elsősorban anion-állapotok helyezkednek

el. Ezen állítás helytelenségét bizonyítja az a kísérletek által is alátámasztott eredmény, hogy sok esetben a VBO és a CBO közelítőleg egyenlő arányban részesedik a sávszakadásból

3.5 A potenciál eltolódás

Most pedig be fogom mutatni azt az eljárást, amelyet én is követni fogok. Az integrált alapanyag-állapotsűrűségeket használom és az alapanyag-sávstruktúrák merev eltolódását vizsgálom. A módszer alapja az, hogy az alapanyag-sávstruktúrák számolásakor az alapanyag átlagos potenciálját használom referenciaszintként.



3.3 ábra

A lényeg a 3.3 ábráról jól leolvasható. ΔE_v jelöli a saját átlagos elektrosztatikus potenciálokhoz (V_A , V_B) viszonyított valenciasávélék, $E_v(A)$ és $E_v(B)$, közötti különbséget. Ha a két félvezetőt érintkezésbe hozzuk, az átlagos e-

elektrosztatikus potenciálok a két alapanyagban megváltoznak és az interface két oldalán is más lesz az értékük. Különbségüket *potenciál eltolódásnak* (*potential lineup*) nevezzük, és ΔV -vel jelöljük. A VBO a 3.3/b ábra alapján a következőképpen írható fel:

$$VBO = \Delta E_v + \Delta V \quad (3.12)$$

A potenciál eltolódás az átlagpotenciálokból így fejezhető ki:

$$\Delta V = V_A - V_B \quad (3.13)$$

Látszik, hogy ΔE_v tisztán alapanyag-jellemzők segítségével felírt mennyiség, az összes interface-specifikus tulajdonságot a ΔV potenciál eltolódás hordozza.

Egy egyszerű modell segítségével szemléltethető a potenciál eltolódás problémája. Fogjuk fel a kristályt síkkondenzátorok halmazaként, egyező abszolút értékű pozitív ill. negatív töltéssel bíró párhuzamos síkok váltakozó sorozataként. Ezek a síkok globálisan semlegesítik egymást, az átlagos elektrosztatikus tér zérus, az átlagos elektrosztatikus potenciál konstans. Ha most tekintünk egy heteroátmenetet, az interface két oldalán lévő síkok töltése abszolút értékben különböző; az ebből származó potenciál miatt töltésáramlás indul meg az interface-en keresztül és kialakul az interface-dipól. Mivel az interface két oldalán az össztöltés különböző, az átlagos potenciál a jobb és bal oldalon különböző, különbségük megfelel a potenciál eltolódásnak.

A potenciál eltolódás nagyságára vonatkozólag a modellel-

méletek különféle közelítő, egyszerűsítő feltevésekkel élnek; a 4. fejezetben tárgyalt önkonzisztens eljárás végén viszont megkapjuk a potenciált és a töltéssűrűséget. A potenciálból átlagolási eljárás során kapjuk az eltolódást, ezt az eljárást tárgyalja a következő pont.

3.6 Makroszkopikus átlagok

Az $f^{(\text{micro})}(\mathbf{r})$ mikroszkopikus mennyiségből az $f^{(\text{macro})}(\mathbf{r})$ makroszkopikus mennyiség egy konvolúció segítségével állítható elő:

$$f^{(\text{macro})}(\mathbf{r}) = \int w(\mathbf{r}-\mathbf{r}') f^{(\text{micro})}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.14)$$

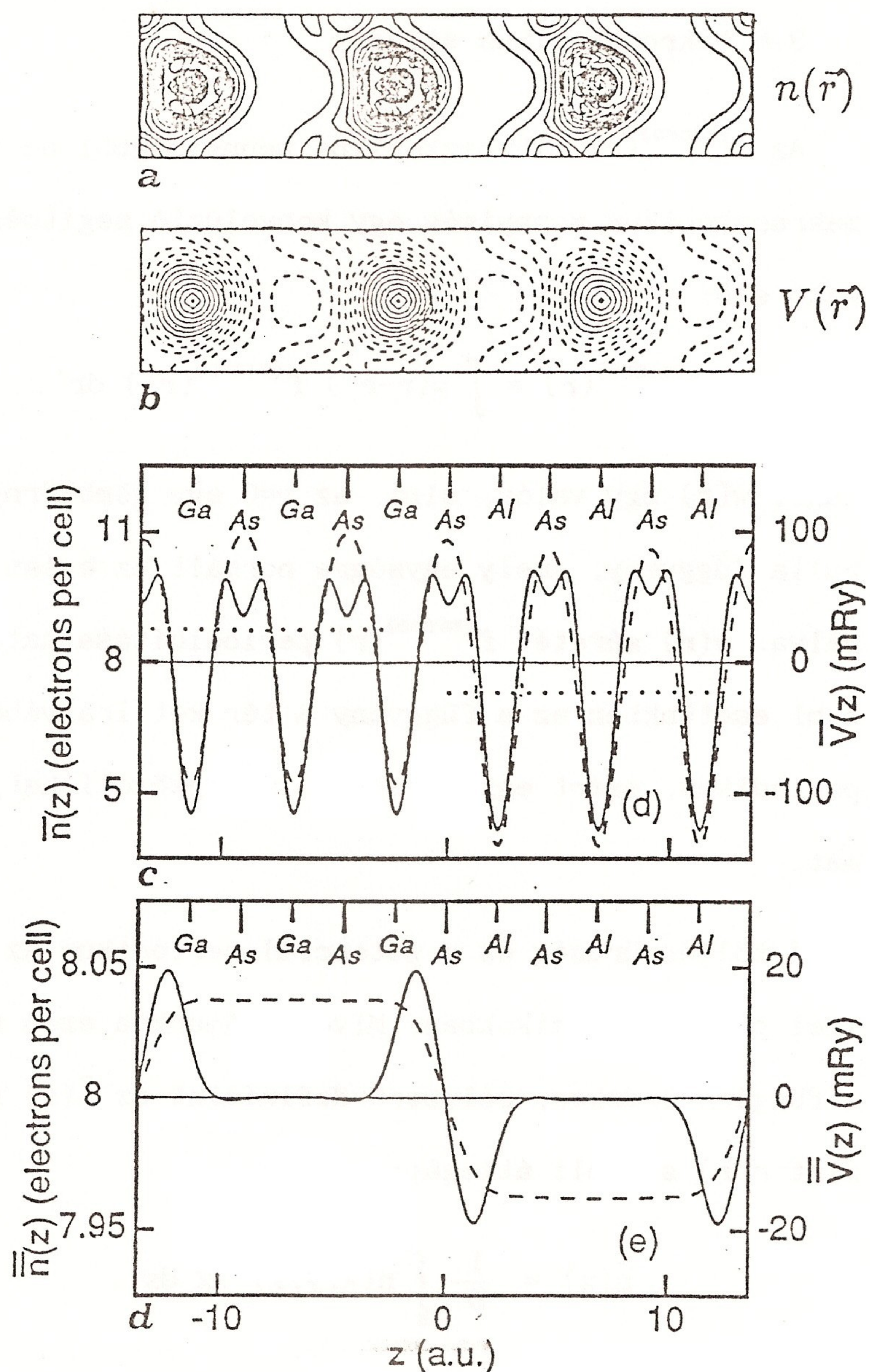
ahol $w(\mathbf{r})$ egy valós, sima, az $\mathbf{r}=0$ egy gömbkörnyezetében nem nulla függvény, amely egységre normált az egész térre integrálva. $w(\mathbf{r})$ méretét $f^{(\text{micro})}(\mathbf{r})$ periodicitása határozza meg. A mi esetünkben ez a függvény a tér két irányában teljesen periodikus, ezért egyszerűbben is megközelíthetjük a problémát.

A töltéssűrűség és a potenciál periodikus az interface-szel párhuzamos síkokban. Mivel számunkra ezen mennyiségek z -függése érdekes, célszerű definiálni az $\bar{n}(z)$ függvényt, mint $n(\mathbf{r})$ síkbeli átlagát:

$$\bar{n}(z) = \frac{1}{S} \int_S n(x,y,z) dx dy, \quad (3.14)$$

ahol S a kétdimenziós egységcella területe az xy síkban. A potenciálra egy hasonló formula érvényes, ebből kapjuk a $\bar{V}(z)$ függvényt. A 3.4/c ábra mutatja $\bar{n}(z)$ -t és $\bar{V}(z)$ -t egy

GaAs/AlAs (001) átmenetre. A szaggatott vonal a potenciált, a folytonos vonal a töltéssűrűséget jelöli. (A 3.4/a ábrán az $n(\vec{r})$, a 3.4/b ábrán a $V(\vec{r})$ szintvonalas ábrázolása látható az $(1\bar{1}0)$ síkban.) Látható, hogy $\bar{n}(z)$ és $\bar{V}(z)$ nem periodikus az interface-régióban, az interface-től messze asz-



3.4 ábra

szimptotikusan simul a két különböző periodikus függvénybe a két alapanyagban. Az itt bemutatott rácsillesztett átme-

netnél a két periódus ugyanaz, két azonos atom (pl. Ga) távolsága: $L=a/2$, ahol a az FCC cella oldalhosszúsága. Az ábrához tartozó elemi cella megvizsgálható a 6.1 ábrán.

A következő lépés az $\bar{n}(z)$ síkbeli átlagból az $\bar{\bar{n}}(z)$ makroszkopikus átlag előállítása egy konvolúció segítségével:

$$\begin{aligned}\bar{\bar{n}}(z) &= \frac{1}{L} \int_{z-L/2}^{z+L/2} \bar{n}(z') dz' = \\ &= \frac{1}{L} \int \theta(L/2 - |z-z'|) \bar{n}(z') dz', \quad (3.16)\end{aligned}$$

ahol θ a lépcsőfüggvény, L pedig a síkbeli átlag periódusa.

A számolás eredménye az előbbi GaAs/AlAs (110) átmenetre a 3.4/d ábrán látható. Jól megfigyelhető az interface-dipól a szupercella közepén és a két szélén a periodicitásnak és a kifelé mutatott semlegességnek megfelelően.

A jobb és bal oldalon vett $V(z)$ átlagpotenciálok különbsége adja a potenciál eltolódást.

4. FEJEZET

EGY ÖNKONZISZTENS PSZEUDOPOTENCIÁLÓS SÁVSZÁMÍTÁSI MÓDSZER

4.1 Az eljárás

A félvezető-kristály Hamilton-operátora egyelektron közelítésben a következő:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ion}} + V_{\text{H}} + V_{\text{Exc}}, \quad (4.1)$$

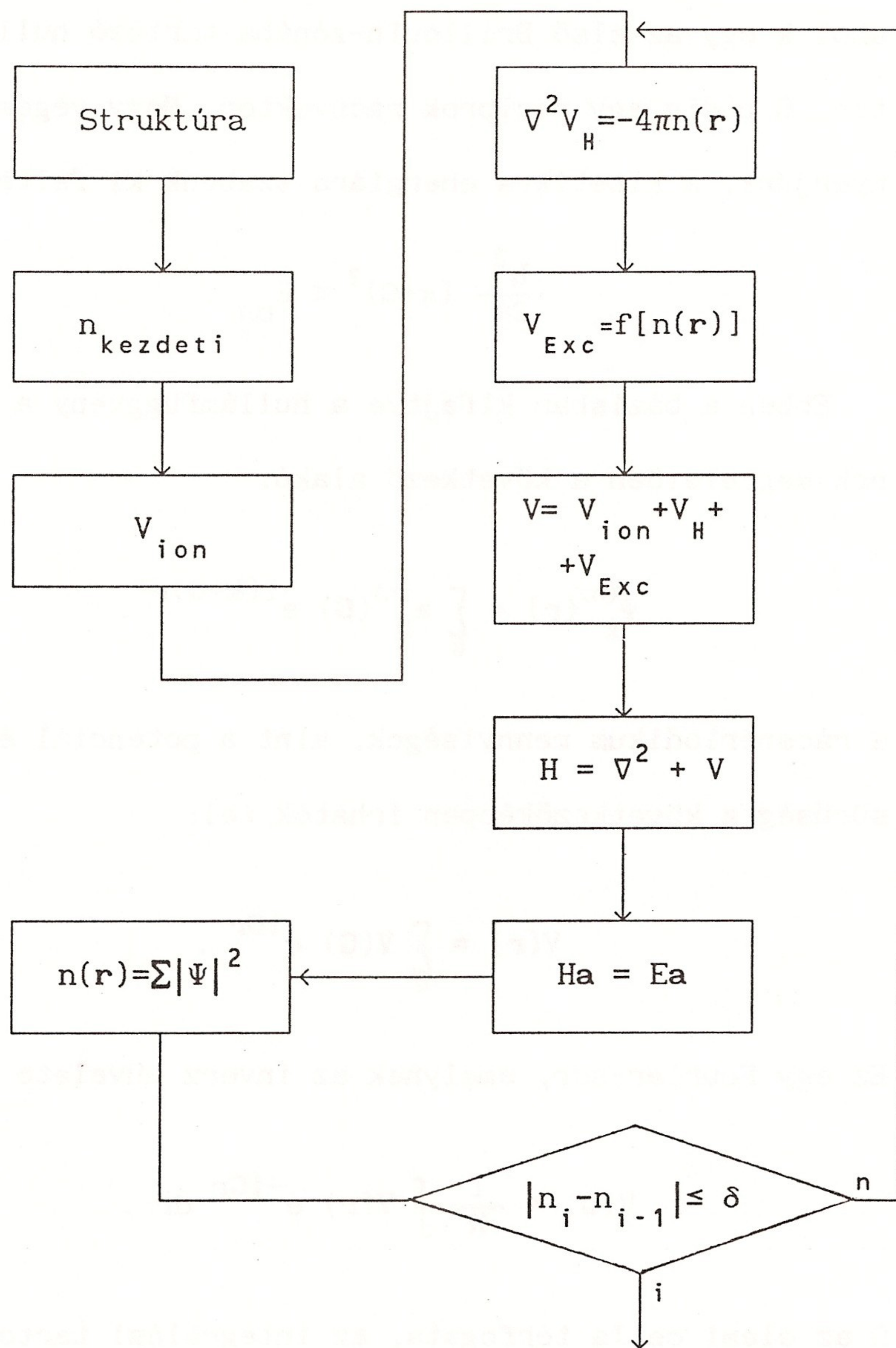
ahol V_{ion} az iontörzs potenciálja, V_{H} a Hartree-potenciál, V_{Exc} pedig a kicserélődési potenciál. A két utóbbi tag írja le az elektron-elektron kölcsönhatást.

Az önkonzisztens módszer alapját az adja, hogy a V_{H} és a V_{Exc} potenciálokat a töltéssűrűség egyértelműen meghatározza. A (4.1) Hamilton operátor sajátértékeit és sajátvektorait kiszámítva, a legmélyebb eneregiájú betöltött állapotok segítségével a töltéssűrűség kiszámítható, amiből a következő iterációban a potenciál származtatható. Az eljárás addig folytatódik, amíg az előző és az újonnan számolt töltéssűrűség egy előre megadott értéknél kevésbé tér el egymástól.

A 4.1 ábrán látható az eljárás blokkdiagramja, amit a következőkben lépésenként, részletesen is megvizsgálunk.

4.2 A bázis

A kristály transzlációs szimmetriája meghatározza a reciprok teret. Mennyiségeinket természetesen az ezen reciprok tér által generált síkhullám-bázisban fejtjük ki. A síkhullámok alakja a következő:



4.1 ábra

$$e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}, \quad (4.2)$$

ahol $\mathbf{k}$ egy az első Brillouin-zónába tartozó hullámszámvektor, $\mathbf{G}$ pedig egy reciprok rácsvektor. Hogy véges bázist nyerjünk, a kinetikus energiára szabunk ki feltételt:

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}+\mathbf{G})^2 \leq E_{\text{CUT}}. \quad (4.3)$$

Ebben a bázisban kifejtve a hullámfüggvény a Bloch-tételnek megfelelően a következő alakú:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}, \quad (4.4)$$

a rácsperiodikus mennyiségek, mint a potenciál és a töltéssűrűség a következőképpen írhatók fel:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}. \quad (4.5)$$

Ez egy Fourier-sor, amelynek az inverz művelete a következő:

$$V(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (4.6)$$

Ω az elemi cella térfogata, az integrálási tartomány Ω . Ha az állapotfüggvény és a potenciál (4.4) és (4.5)-beli kifejezését beírjuk a

$$H \Psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = \left[-\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}^{(n)} \Psi_{\mathbf{k}}^{(n)}(\mathbf{r}) \quad (4.7)$$

Schrödinger-egyenletbe és $\frac{1}{\Omega} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\mathbf{r}}$ -rel való szorzás után $\mathbf{r}$ szerint integrálunk, akkor a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\left[(k+G)^2 - E_k^{(n)} \right] a_k^{(n)}(G) + \sum_{G'} V(G-G') a_k^{(n)}(G') = 0 \quad (4.8)$$

A (4.7) egyenlet már a jelen eljárás során használt mértékegység-rendszerben van felírva, amely a következő:

$$\hbar=1, m=1/2, e^2=2. \quad (4.9)$$

Az energia mértékegysége a 2 Ry:

$$[E] = 2 \text{ Ry} = 2 \cdot 27.212 \text{ eV}, \quad (4.10)$$

a hosszúságé pedig az 1 bohr = 0.529 Å = 0.529 · 10⁻¹⁰ m. Ebben a rendszerben: $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$.

4.3 A struktúra

Most pedig hozzáfogok a 4.1 ábra lépésenkénti elemzéséhez.

A struktúra-faktor (ld.: 4.4) számolásához szükséges az atomi elrendezés ismerete az elemi cellán belül. Az atomi pozíciót jelölje az $R_j^{(i)}$ vektor, ahol a felső zárójeles index jelöli, hogy milyen fajtájú atomról (Ga, As, Zn vagy Se) van szó, az alsó index pedig azt, hogy ezen belül hányadik atomot szemléljük. Az "i" atomból a cellában legyen összesen n_i darab.

A síkhullámokhoz természetesen szükség van a reciprok rácsvektorokra, ezeket is itt a program elején kell definiálni.

4.4 A pszeudopotenciál

A törzselektronok részletes leírása megköveteli egy erősen vonzó potenciál figyelembe vételét; a megfelelő hullámfüggvény erős oszcillációt mutat, ami egy túlságosan nagy síkhullám-bázis használatát feltételezi. A *pszeudopotenciál módszer* [9] lényege, hogy a törzselektronok részletes leírását elkerüli. A valenciaelektronok hullámfüggvényeinek ortogonalitását a törzselektronok hullámfüggvényeire egy taszító potenciállal veszi figyelembe. Az így kapott pszeudopotenciál jóval gyengébb, mint az eredeti, így az ebből számolt pszeudohullámfüggvények is simábbak lesznek az eredetinél, ami egy lényegesen kisebb bázist eredményez.

A pszeudopotenciál előállításának kétféle módja van. Egyrészt meghatározható a szabad atom sokelektronos Schrödinger egyenletének *ab-initio* számolásából. Ez a gépidőt rendkívüli módon igénybe vevő eljárás. Ehelyett sokszor egy ún. *modellpotenciált* használnak, amelyet kísérleti úton határoztak meg úgy, hogy paramétereit a szabad atom energiaszintjeihez illesztették.

Az itt használt pszeudopotenciál az Appelbaum és Haman [10] által kidolgozott ún. "soft core" három paraméteres modellpotenciál, amelynek törzstagja:

$$V_c = (V_1 + V_2 r^2) e^{-\alpha r^2}. \quad (4.11)$$

Paramétereit úgy választották, hogy a segítségével számolt pszeudo-töltéssűrűség minél jobban megegyezzen az *ab-initio* önkonzisztens módon számolt valódi töltéssűrűséggel; a nyert

sávszerkezet pedig egyezzen az optikai adatokkal. Előnye, hogy Fourier-transzformáltja megadható analitikusan:

$$V_c(G) = \frac{2}{\Omega} \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{3/2} \left[V_1 + \left(\frac{3}{2\alpha} - \frac{G^2}{4\alpha^2} \right) V_2 \right] \exp(-G^2/4\alpha) \quad (4.12)$$

Ehhez jön még egy árnyékoló tag, melynek alakja:

$$V_{sc}(G) = -\frac{2}{\Omega} (4\pi Z/G^2) \exp(-G^2/4\alpha), \quad (4.13)$$

ahol Z a valenciaelektronok száma. A kettő összege adja a pszeudopotenciál Fourier-komponensét:

$$V_{at}(G) = V_c(G) + V_{sc}(G) \quad (4.14)$$

Ez az atomi helykoordinátáktól függő potenciál, minden atomhoz tartozik egy ilyen, tehát az atomi minőségtől is függ, ezért egy felső index-szel látjuk el: $V_{at}^{(i)}(G)$. A teljes potenciál a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned} V_{ion}(r) &= \sum_i \sum_j^{n_i} V_{at}^{(i)}(r-R_j^{(i)}) = \\ &= \sum_i \sum_j^{n_i} \sum_G V_{at}^{(i)}(G) e^{iG(r-R_j^{(i)})} = \\ &= \sum_G \left[\sum_i V_{at}^{(i)}(G) \left(\sum_j^{n_i} e^{-iGR_j^{(i)}} \right) \right] e^{iGr}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

ahonnan:

$$V_{ion}(G) = \sum_i V_{at}^{(i)} S^{(i)}(G) \quad (4.16)$$

ahol

$$S^{(i)}(G) = \sum_j^{n_i} e^{-iGR_j^{(i)}} \quad (4.17)$$

a. struktúrafaktor. A potenciálparamétereket a 4.1 ábrán látható táblázat tartalmazza.

	α	V_1	V_2
Ga	0.61	2.768	-1.080
As	0.61	2.511	-1.394
Zn	0.61	2.896	-0.924
Se	0.61	2.383	-1.550
Si	0.61	3.042	-1.372
Ge	0.61	2.640	-1.237

4.2 ábra

4.5 A Hartree-potenciál

A Hartree-potenciált a

$$\nabla^2 V_H(\mathbf{r}) = -8\pi n(\mathbf{r}) \quad (4.18)$$

Poisson-egyenletet megoldva kapjuk. A kettes szorzó oka a jobb oldalon az, hogy $n(\mathbf{r})$ elektronsűrűség, $V_H(\mathbf{r})$ energia dimenziójú mennyiség, ezért szükség van egy e^2 -tel való szorzásra, ami a használt mértékegységrendszerben 2. A fenti egyenlet mindkét oldalát felírva síkhullám bázisban kapjuk:

$$\nabla^2 V_H(\mathbf{r}) = \nabla^2 \sum_G V_H(G) e^{iGr} = \sum_G V_H(G) (-G^2) e^{iGr} \quad (4.19)$$

$$-8\pi n(\mathbf{r}) = -\sum_{\mathbf{G}} 8\pi n(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (4.20)$$

A két egyenlet jobb oldalainak összevetéséből adódik:

$$V_H(\mathbf{G}) = 8\pi n(\mathbf{G})/\mathbf{G}^2 \quad (4.21)$$

Itt jegyzem meg, hogy $\mathbf{G}=0$ esetben mindhárom potenciál értékét nullának választottuk.

4.6 A kicserélődési potenciál

A statisztikus kicserélődési potenciál [11]:

$$V_{\text{Exc}}(\mathbf{r}) = -3\alpha \left[\frac{3}{4\pi} \right]^{1/3} [n(\mathbf{r})]^{1/3}. \quad (4.22)$$

$n^{1/3}$ -t a következő sorfejtéssel vettük figyelembe:

$$n^{1/3} = a_1 n + a_2 n^2 + O(n^3) \quad (4.23)$$

ahol $a_1 = 0.15$, $a_2 = 0.0026$. Az $[n(\mathbf{r})]^2$ Fourier-együtthatóit a következőképpen számoltuk ki:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{G}''} n^2(\mathbf{G}'') e^{i\mathbf{G}''\mathbf{r}} &= \left[\sum_{\mathbf{G}''} n(\mathbf{G}'') e^{i\mathbf{G}''\mathbf{r}} \right]^2 = \\ &= \sum_{\mathbf{G}', \mathbf{G}''} n(\mathbf{G}'') n(\mathbf{G}') e^{i(\mathbf{G}''+\mathbf{G}')\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.24)$$

$\frac{1}{\Omega} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}}$ -rel való szorzás és integrálás után kapjuk:

$$n^2(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} n(\mathbf{G}') n(\mathbf{G}-\mathbf{G}'). \quad (4.25)$$

Ezzel a kicserélődési potenciál:

$$V_{\text{Exc}}(\mathbf{G}) = -3\alpha \left[\frac{3}{4\pi} \right]^{1/3} \left[a_1 n(\mathbf{G}) + a_2 n^2(\mathbf{G}) \right] \quad (4.26)$$

Számolásainkban az $\alpha=0.76$ értéket használtuk.

4.7 A Hamilton-mátrix

A (4.8) egyenletből kiolvasható, hogy a Hamilton-mátrix alakja a következő:

$$H(\mathbf{G}, \mathbf{G}') = (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 \delta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \quad (4.27)$$

ahol $V(\mathbf{G}) = V_{\text{ion}} + V_{\text{H}} + V_{\text{Exc}}$. A mátrix felépítése után legalább annyi sajátértékét és sajátvektorát meg kell keresni a mátrixnak, ahány betöltött állapot létezik. Ez a szám az elemi cellában lévő valenciáelektronok számának a fele, jelöljük N -nel.

4.8 A speciális-pont technika

Itt ismertetem azt a módszert [12], amelynek révén a Brillouin zónára való integrálás leredukálható néhány $\mathbf{k}$ pontban vett érték súlyozott összegzésére. Vegyünk egy $f(\mathbf{k})$ függvényt, amely szimmetrikus és periodikus a $\mathbf{k}$ térben. Ekkor $f(\mathbf{k})$ sorbafejthető a következő alakban:

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} f(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \quad (4.28)$$

ahol $\mathbf{R}$ direkt térbeli rácsvektor. Jelentse S_m a rácsvektoroknak egy olyan osztályát, amelynek elemeit a rács pontcso-

portjának szimmetriatranszformációi átviszik egymásba.

Könnyen belátható, hogy egy ilyen osztály elemein az $f(\mathbf{k})$ függvény Fourier-együtthatói ugyanakkorák:

Legyen S egy szimmetriatranszformáció. Ekkor $f(\mathbf{k})=f(\mathbf{k}S)$, mivel f szimmetrikus. Felírható:

$$f(\mathbf{k}S) = \sum_{\mathbf{R}} f(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}S\mathbf{R}} = f(\mathbf{k}) , \quad (4.29)$$

amiből következik, hogy $f(\mathbf{R})=f(\mathbf{SR})$.

Az S_m osztályon ezt az együtthatót jelölje f_m . Ekkor:

$$f(\mathbf{k}) = f_0 + \sum_{m=1}^{\infty} f_m G_m(\mathbf{k}) \quad (4.30)$$

ahol:

$$G_m(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R} \in S_m} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \quad (4.31)$$

Mivel:

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} G_m(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = 0 \quad m=1,2,\dots \quad (4.32)$$

ezért:

$$\langle f \rangle = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} f(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = f_0 . \quad (4.33)$$

Ha létezik olyan $\mathbf{k}^*$ pont, hogy:

$$G_m(\mathbf{k}^*) = 0 \quad \forall m\text{-re} , \quad (4.34)$$

akkor

$$f_0 = f(\mathbf{k}^*) \quad (4.35)$$

Ilyen pont általában nem létezik, de tudunk találni n db. $\mathbf{k}_i^*$

pontot n db. w_i normálási tényezővel, melyek kielégítik az alábbi egyenletrendszer valamely N -re:

$$\sum_{i=1}^n w_i G_m(k_i^*) = 0 \quad m=1, 2, \dots, N \quad (4.36)$$

Ekkor jó közelítéssel:

$$\langle f \rangle = \sum_{i=1}^n w_i f(k_i^*) \quad (4.37)$$

Sokszor, mint ahogy az általunk végzett számolás esetén is, elég egyetlen speciális pont használata.

4.9 A töltéssűrűség

A töltéssűrűség (helyesebben az elektronsűrűség) egzaktul a következőképpen számolható:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \Psi_k^{(n)*}(\mathbf{r}) \Psi_k^{(n)}(\mathbf{r}) d\mathbf{k} , \quad (4.38)$$

ahol N a betöltött állapotok száma. Véve egy $\mathbf{k}^*$ speciális pontot, a formula leegyszerűsödik a következőképpen:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \Psi_k^{(n)*}(\mathbf{r}) \Psi_k^{(n)}(\mathbf{r}) , \quad (4.39)$$

ahol $\Psi^{(n)}$ jelöli a speciális pontban vett $\Psi_k^{(n)}$ hullámfüggvényt. Ebből a szokásos eljárás után adódik:

$$n(\mathbf{G}) = \sum_{n=1}^N \sum_{\mathbf{G}'} a^{(n)*}(\mathbf{G}') a^{(n)}(\mathbf{G}'+\mathbf{G}) . \quad (4.40)$$

Ezt a töltéssűrűséget használjuk a (4.21) és (4.26) egyenletekben a megfelelő potenciálok kiszámításához. Amennyiben két egymást követően számolt töltéssűrűség egy előre megadott limitnél kevésbé tér el egymástól, akkor az eljárást befejezettnek tekintjük.

4.10 A makroszkopikus átlagok számolása

Az $\bar{n}(z)$ síkbeli átlagot az eredményül kapott $n(G)$ együtthatók segítségével a következőképpen lehet kiszámítani:

Mivel $\bar{n}(z)$ rácsperiodikus a z irányban, felírható:

$$\bar{n}(z) = \sum_G \bar{n}(G) e^{iGz} \quad (4.41)$$

ahol:

$$\begin{aligned} \bar{n}(G) &= \frac{1}{L} \int \bar{n}(z) e^{-iGz} dz = \\ &= \frac{1}{L} \int \left[\frac{1}{S} \int n(r) dx dy \right] e^{-iGz} dz = \\ &= \frac{1}{\Omega} \int \sum_{G'} n(G') e^{iG' r} e^{-iGz} dr = \\ &= \sum_{G'} n(G') \frac{1}{\Omega} \int e^{i(G'_x x + G'_y y + G'_z z - Gz)} dr = n(0, 0, G) \quad (4.42) \end{aligned}$$

Itt felhasználtuk $\bar{n}(z)$ (3.14) alatti kifejezését és $n(r)$ (4.5)-beli sorfejtését.

A makroszkopikus átlag a következőképpen számolható:

$$\bar{\bar{n}}(z) = \frac{1}{L} \int_{z-L/2}^{z+L/2} \bar{n}(z') dz' = \frac{1}{L} \int_{z-L/2}^{z+L/2} \sum_G \bar{n}(G) e^{iGz'} dz' =$$

$$= \sum_G \bar{n}(G) W(G, z) , \quad (4.43)$$

ahol

$$W(G, z) = \frac{1}{L} \int_{z-L/2}^{z+L/2} e^{iGz'} dz' . \quad (4.44)$$

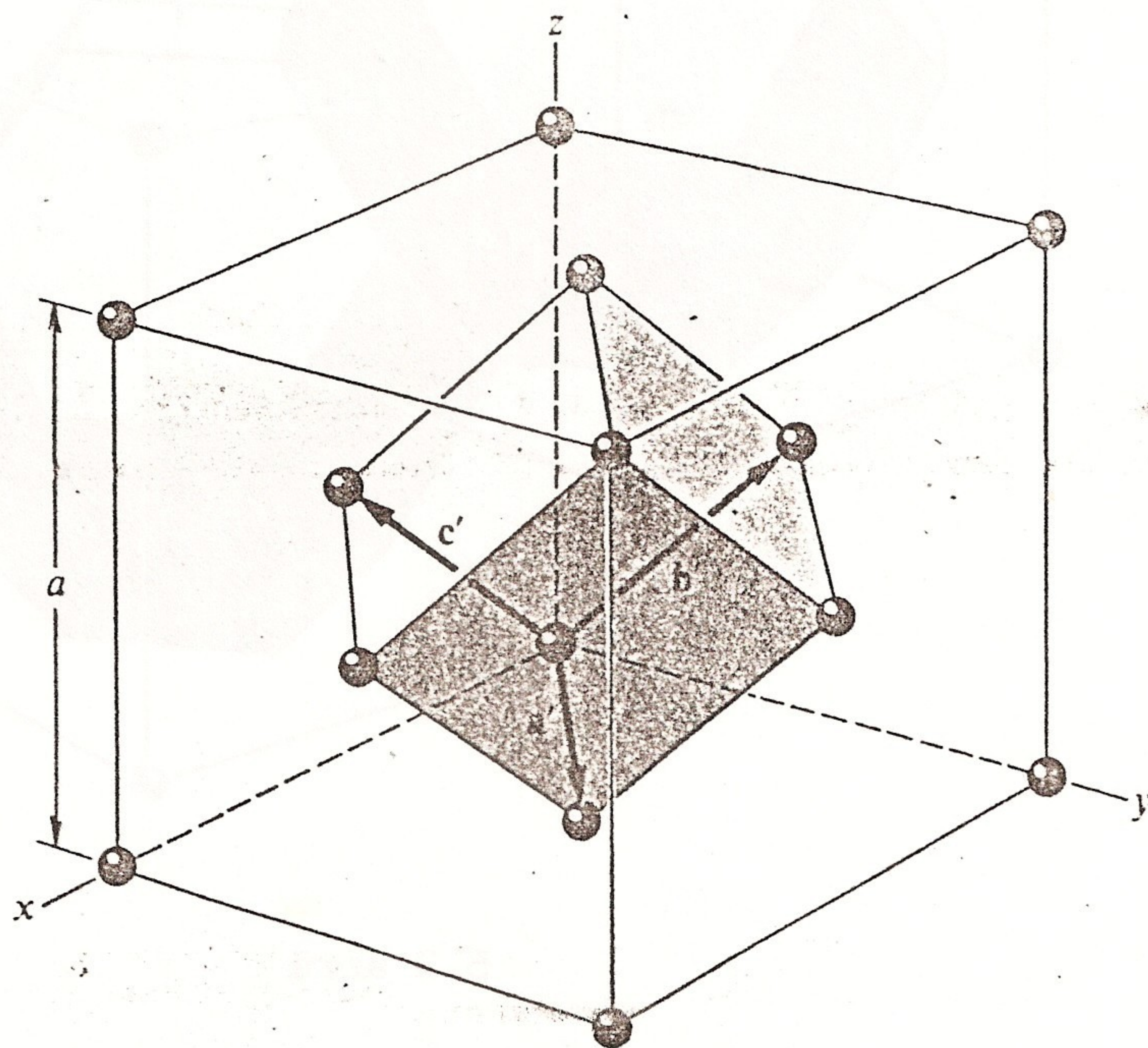
5. FEJEZET

ALAPANYAG-SZÁMOLÁSOK

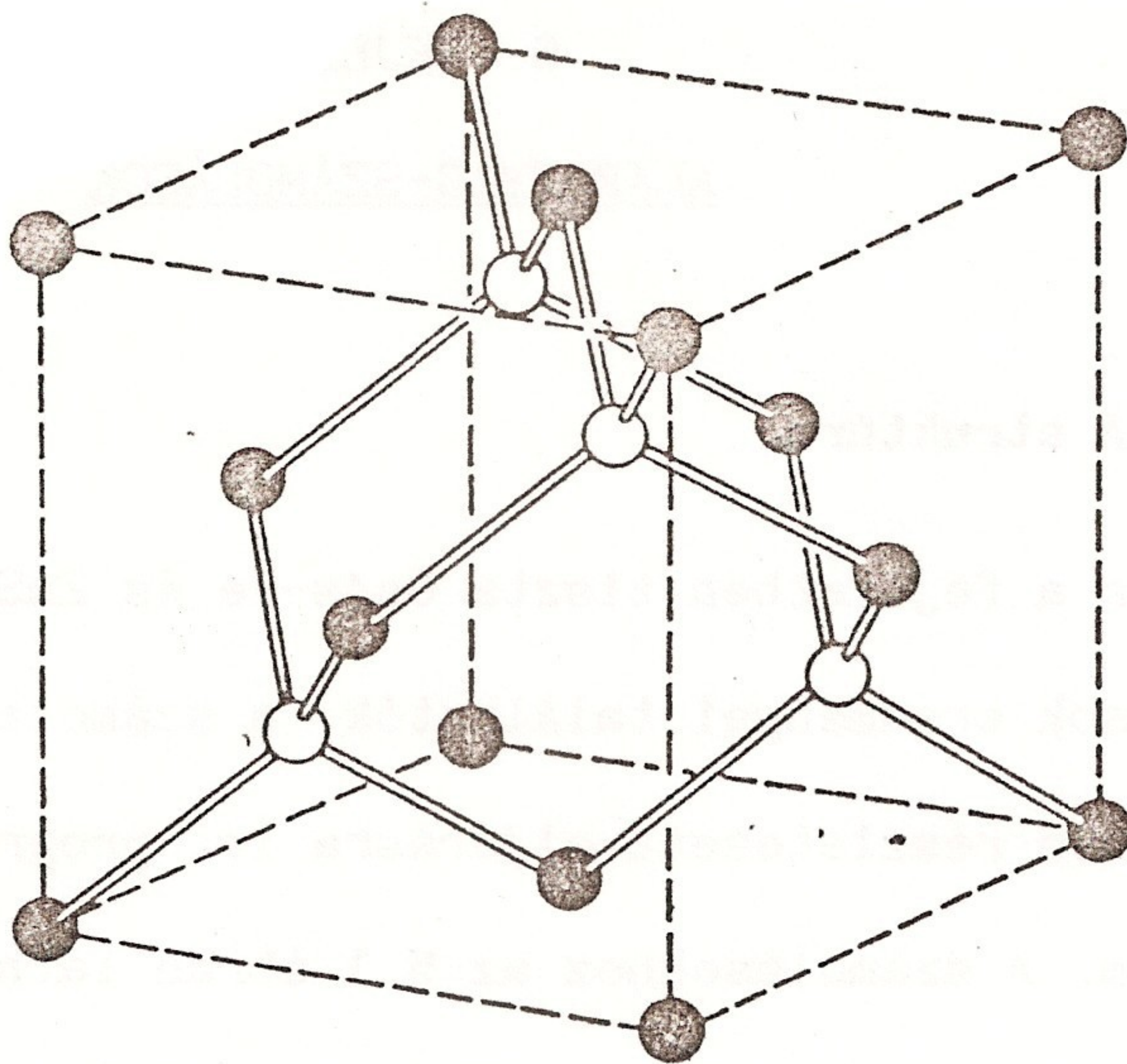
5.1 A struktúra

Ebben a fejezetben tiszta GaAs-re és ZnSe-re vonatkozó számolások eredményei találhatók, a számolásokat egy a 4. fejezetben részletezett eljárásra írt program segítségével végeztem. A számolásokhoz az 5.1 ábrán látható kétatomos cellát használtam. Mivel a GaAs és a ZnSe cinkszulfid-szerkezetben kristályosodik (5.2 ábra), a direkt rács lapcentrálalt köbös (FCC), a reciprok rács tehát tércentrálalt köbös (BCC, 5.3 ábra)

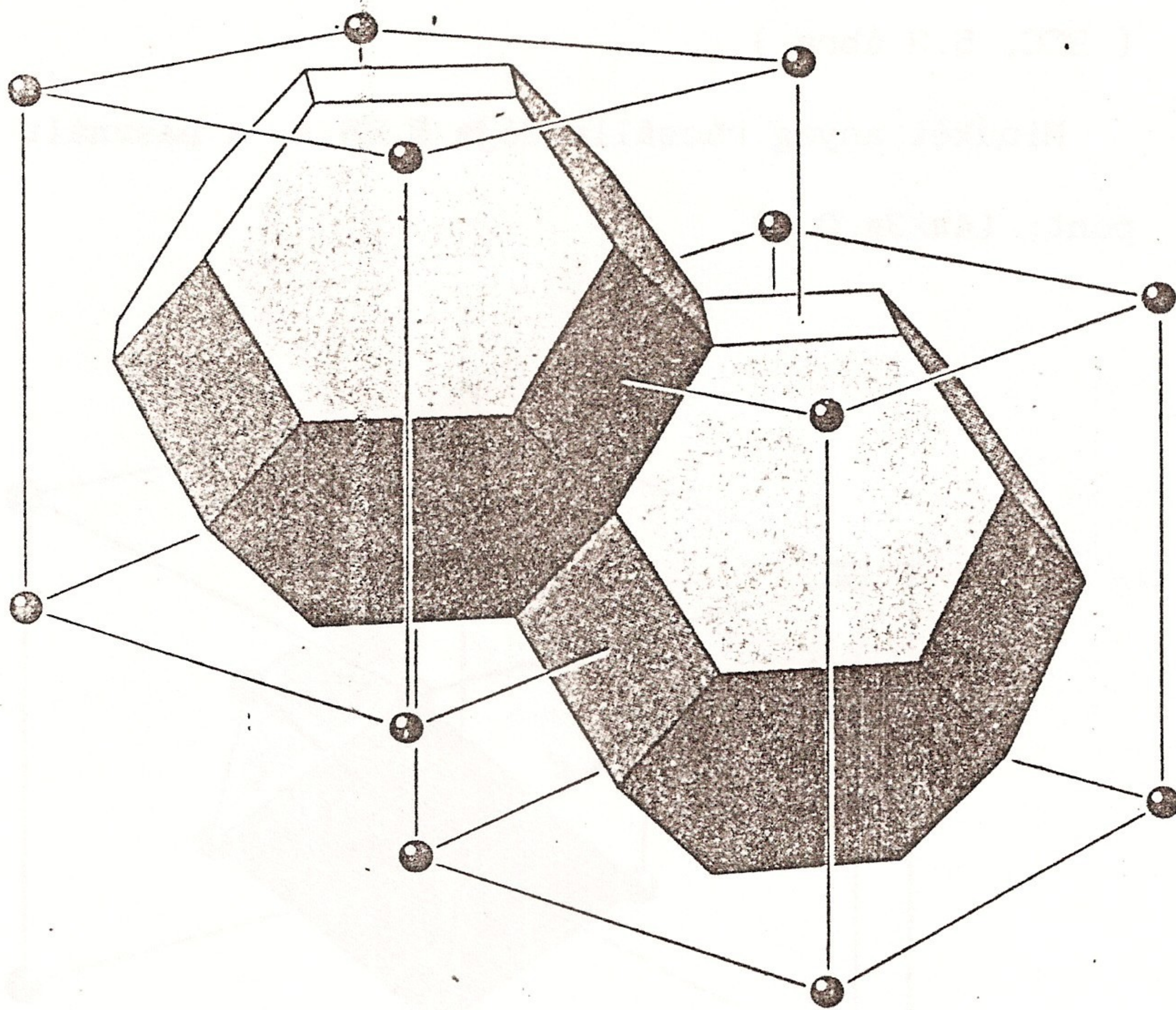
Mindkét anyag rácsállandója 5,65 Å. A használt speciális pont: $(4\pi/3a, 0, 0)$.



5.1 ábra



5.2 ábra



5.3 ábra

5.2 Eredmények

A valenciasávok maximuma az átlagos potenciálhoz viszonyítva: $E_v(\text{GaAs}) = 6.940 \text{ eV}$

$$E_v(\text{ZnSe}) = 1.727 \text{ eV}$$

Innen: $\Delta E_v = 5.213 \text{ eV}$

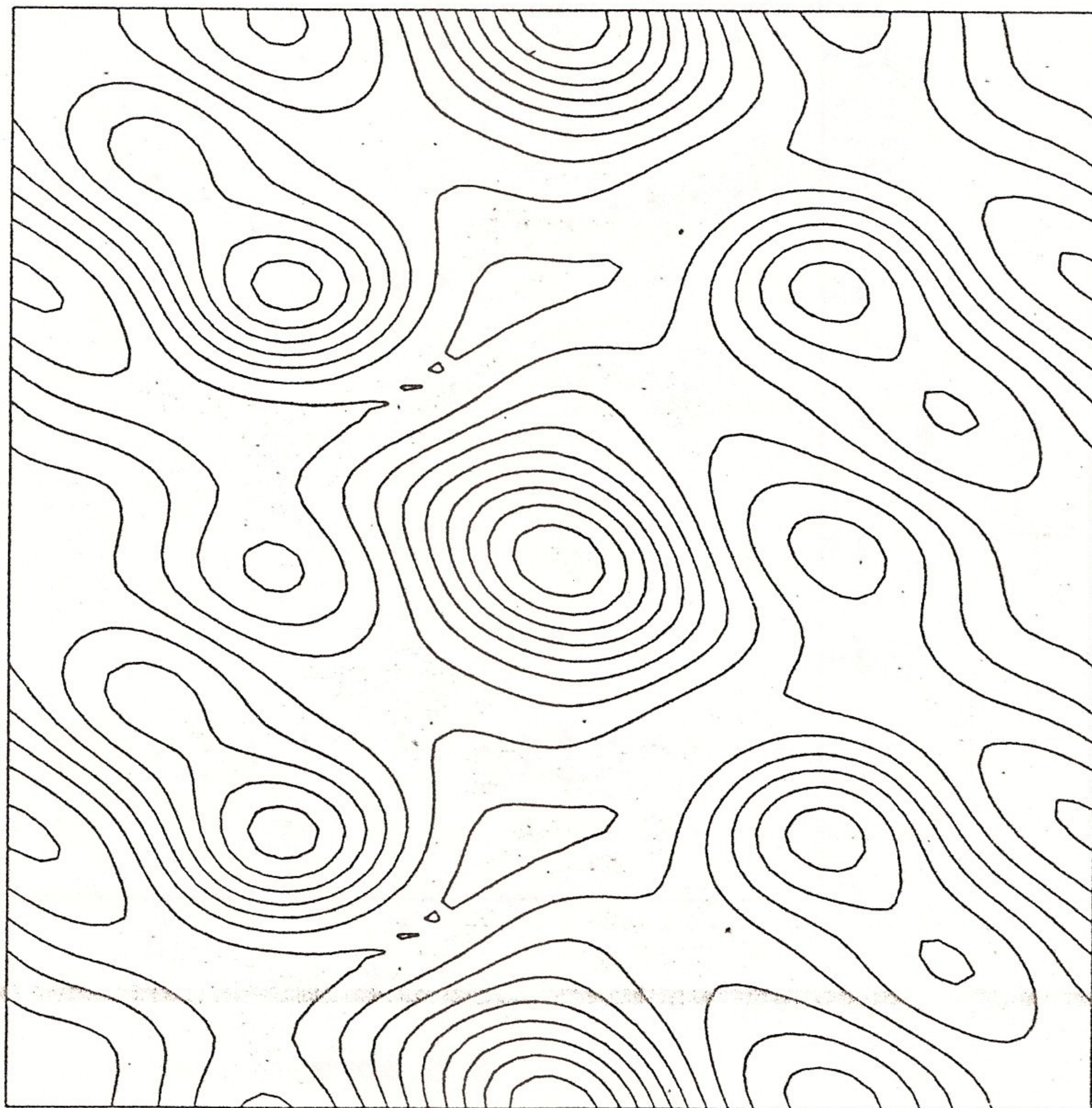
A vezetési sávok minimuma az átlagos potenciálhoz viszonyítva: $E_c(\text{GaAs}) = 10.256 \text{ eV}$

$$E_c(\text{ZnSe}) = 9.157 \text{ eV}$$

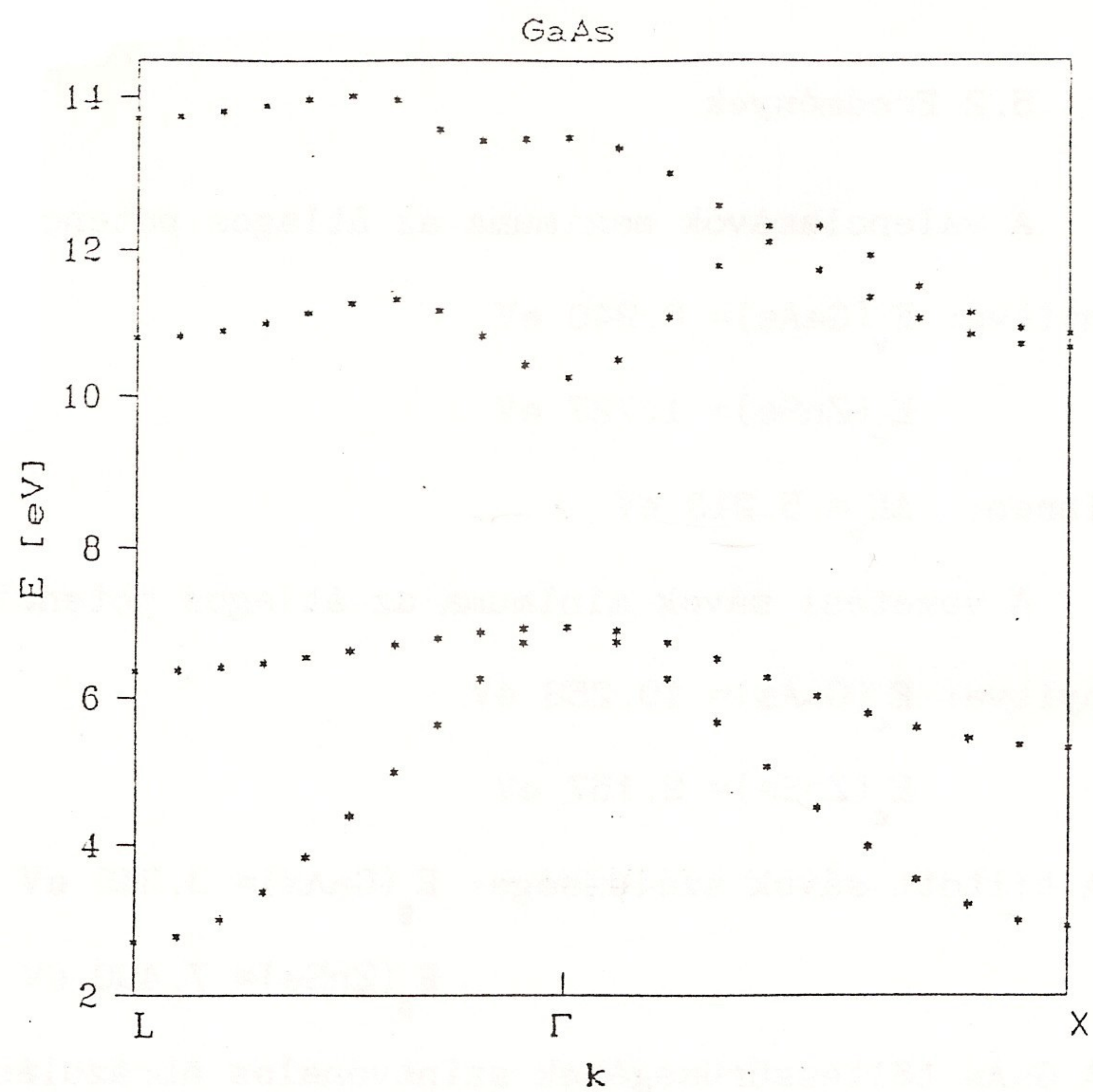
A tiltott sávok szélessége: $E_g(\text{GaAs}) = 3.316 \text{ eV}$

$$E_g(\text{ZnSe}) = 7.430 \text{ eV}$$

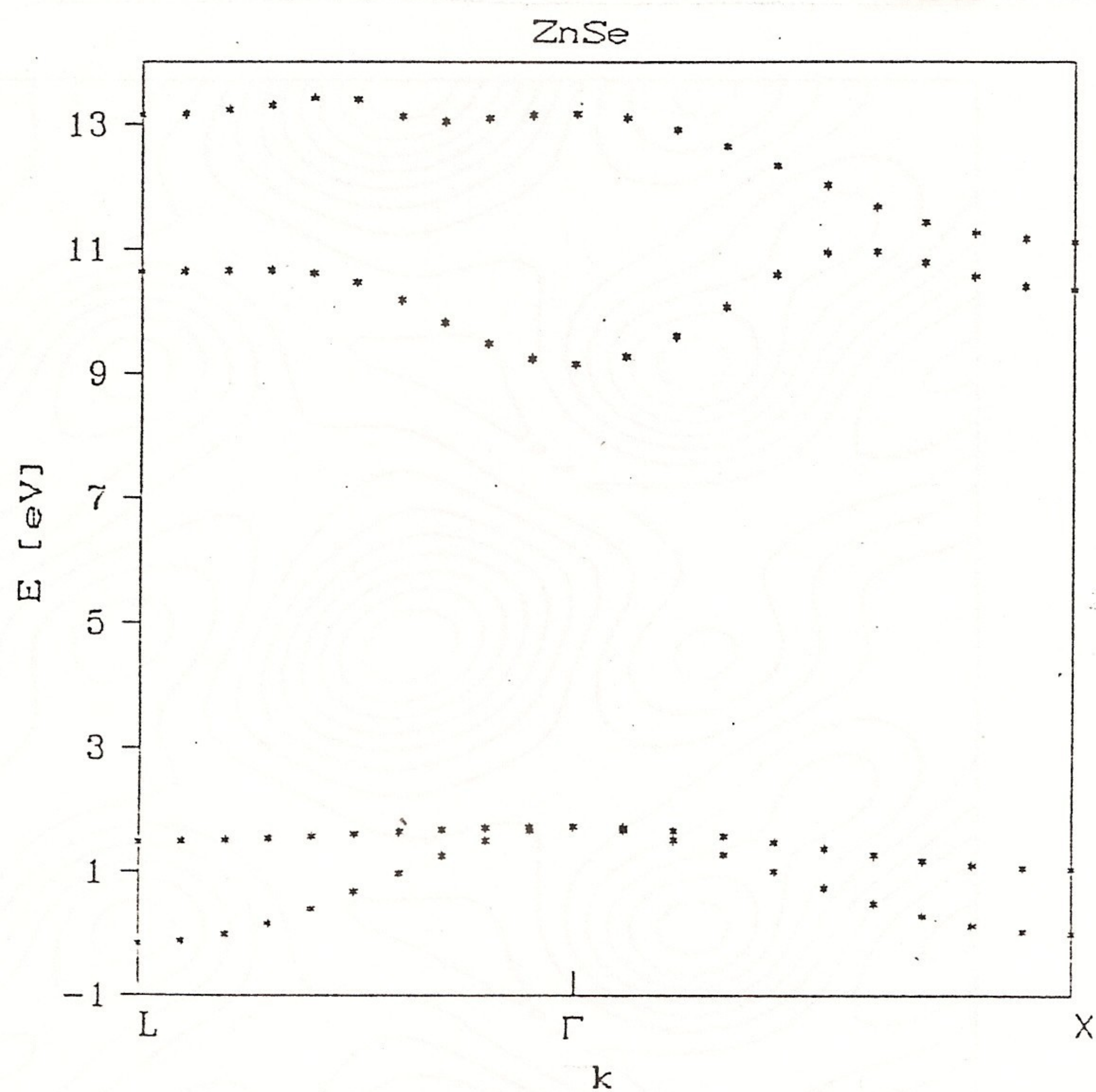
A GaAs töltéssűrűségének szintvonalas ábrázolása megtekinthető az 5.4 ábrán. Az 5.5 ábrán a GaAs, az 5.6 ábrán a ZnSe sávszerkezete látható az (111) és (001) irányokban.



5.4 ábra



5.5 ábra



5.6 ábra

INTERFACE-SZÁMOLÁSOK

6.1 A struktúra

A 4. fejezetben leírt eljárás interface-re való alkalmazásához szükséges egy az interface-orientációnak megfelelő elemi cella, valamint a hozzá tartozó reciprok rács definiálása.

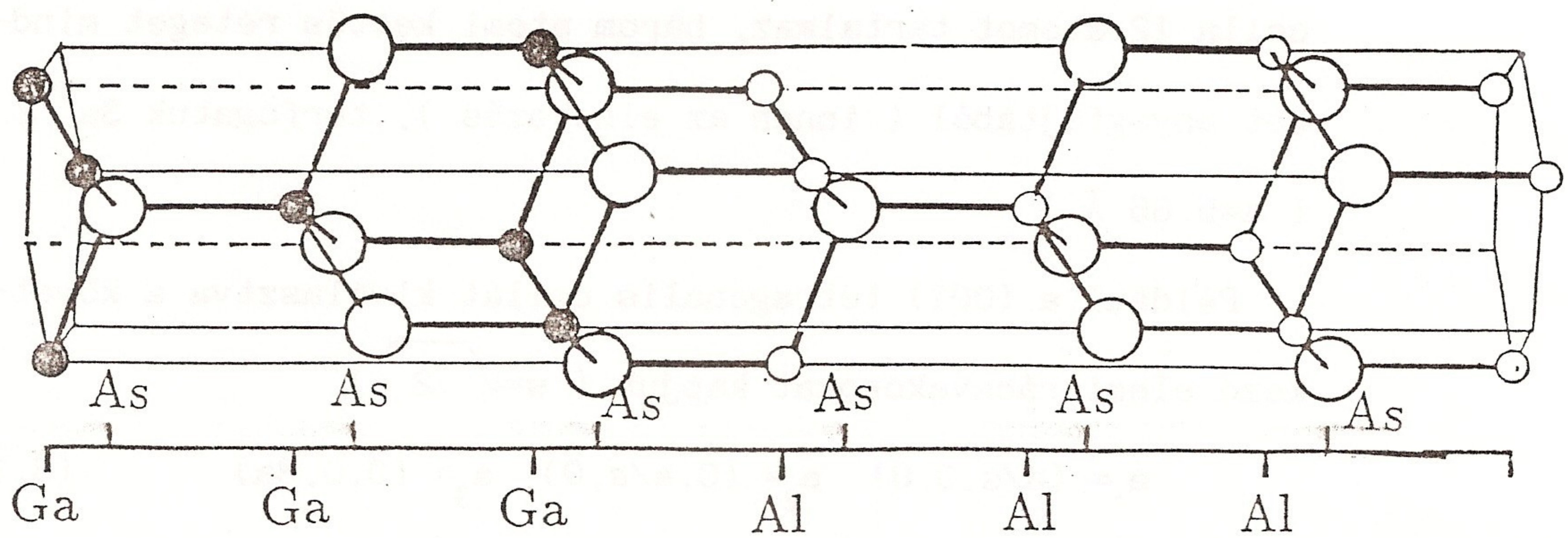
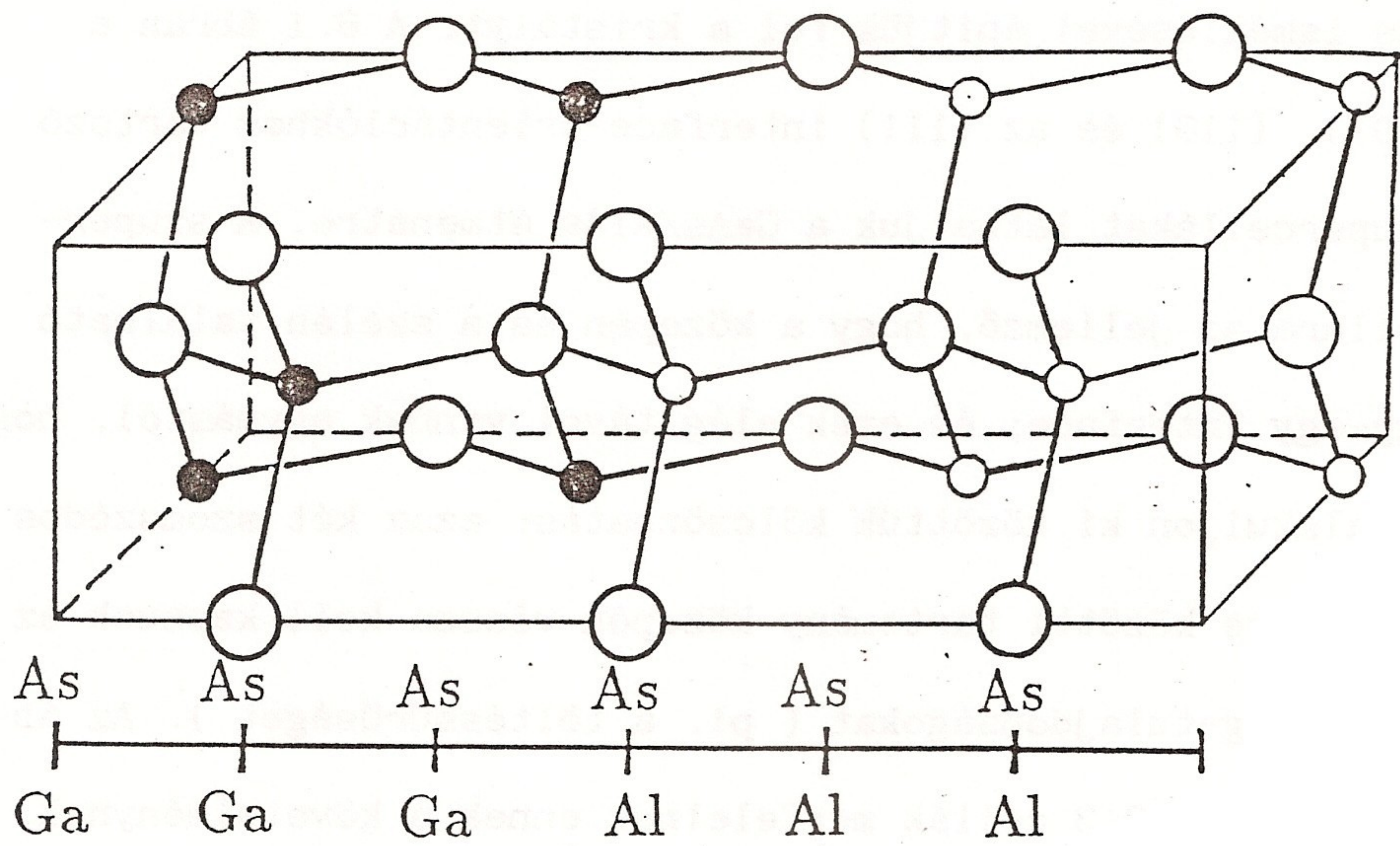
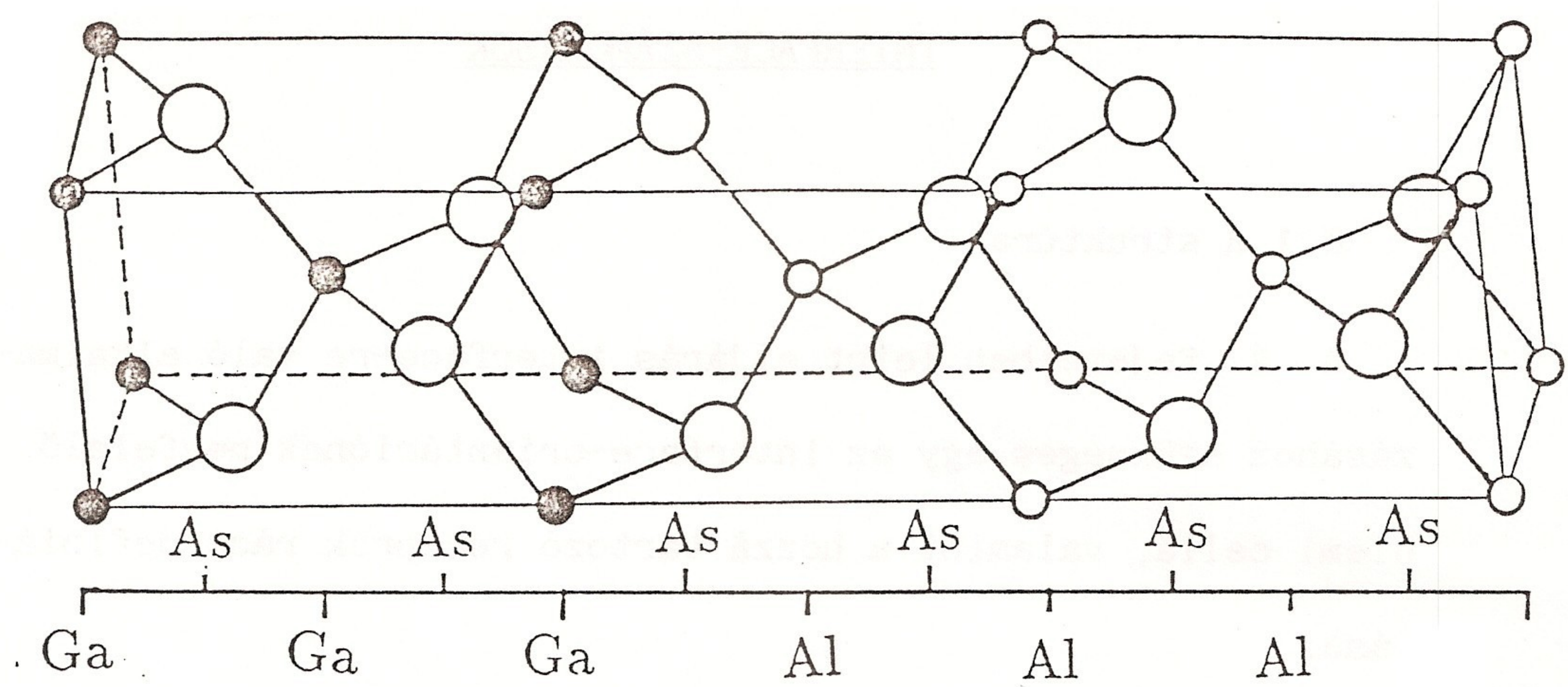
Az interface tanulmányozásakor ún. szupercellák periodikus ismétlésével építjük fel a kristályt. A 6.1 ábrán a (001), (110) és az (111) interface-orientációkhoz tartozó szupercellákat láthatjuk a GaAs/AlAs átmenetre. A szupercellára az jellemző, hogy a közepén és a szélén található egy-egy interface; és ezek elég távol vannak egymástól, hogy ne alakuljon ki közöttük kölcsönhatás; azaz két szomszédos interface közötti tartomány közepén vissza kell kapnunk az alapanyag-tulajdonságokat (pl. a töltéssűrűséget). Az ábrán látható 3+3 cellák megfelelnek ennek a követelménynek, még a legrövidebb (az (110) irányítotttságú) is. Mindhárom cella 12 atomot tartalmaz, három atomi kettős réteget mindkét anyagfajtából (innen az elnevezés), térfogatuk $3a^3/2$.
($a=5.65 \text{ \AA}$)

Például a (001) tetragonális cellát kiválasztva a következő elemi rácsvektorokat kapjuk ($s=\sqrt{2}$)

$$\mathbf{a}_1 = (a/s, 0, 0) \quad \mathbf{a}_2 = (0, a/s, 0) \quad \mathbf{a}_3 = (0, 0, 3a) \quad (6.1)$$

Egy tetszőleges reciprok rácsvektor alakja:

$$\mathbf{G}_{ijk} = \frac{2\pi}{a} (is, js, k/3) \quad (6.2)$$

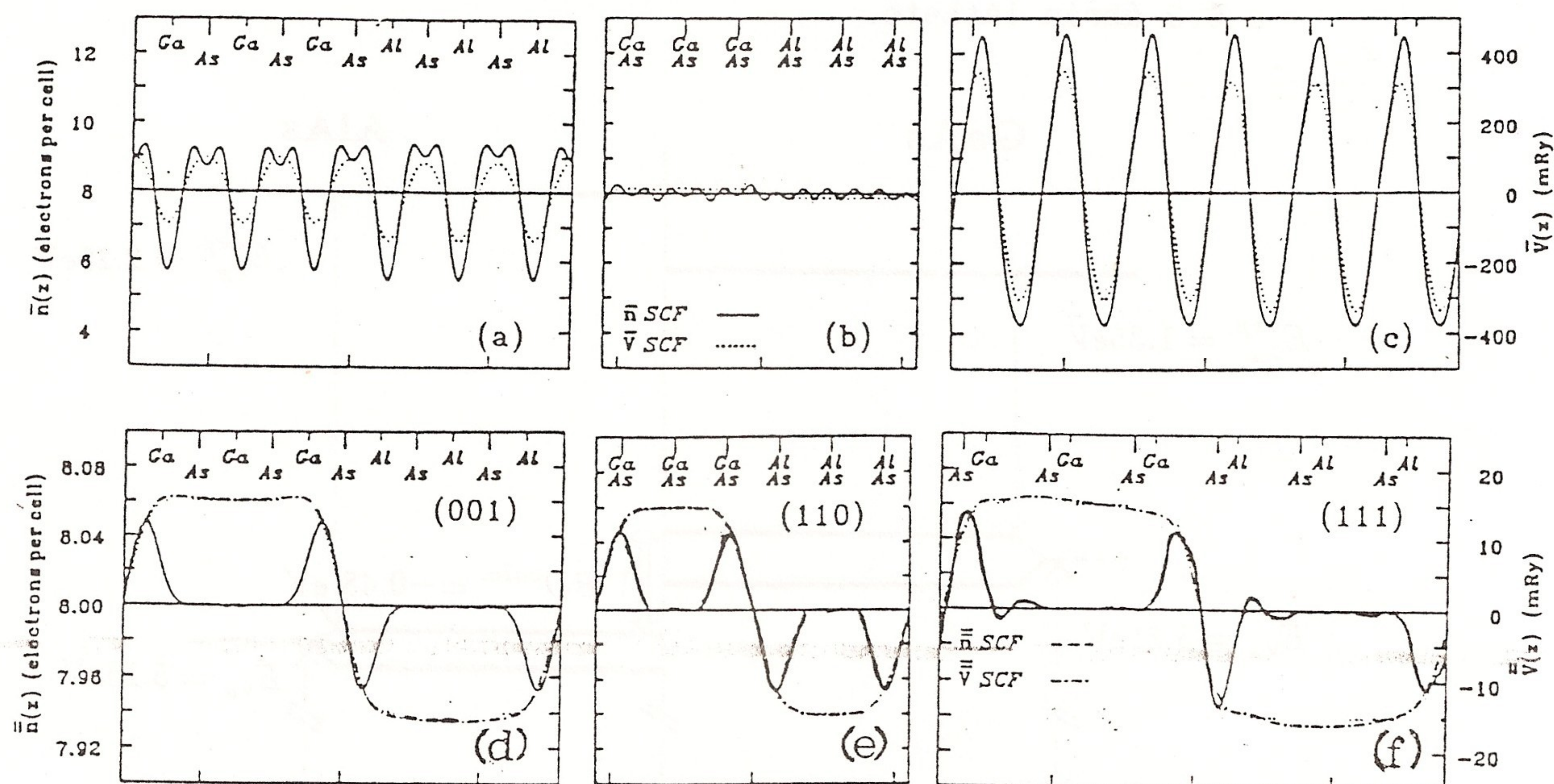


6.1 ábra

Az itt bemutatott struktúrára és 4. fejezetben leírt pszeudopotenciális eljárásra épülő program készítése folyamatban van. Értékelhető eredményeket még nem adott, ezért a következő pontban mutatok néhány (különböző szerzők által publikált) eredményt a VBO-ra GaAs/AlAs, GaAs/Ge és AlAs/Ge rendszerekre.

6.2 A GaAs/AlAs interface sáv szerkezete

M. Peresi [13] közölte a következő, GaAs/AlAs átmenetre vonatkozó számolást. Ennek során a 6.1 pontban ismertetett szupercellákat és a Bachelet, Hamman és Schlüter [14] által előállított pszeudopotenciált használta. A 3. fejezetben leírt potenciál eltolódás formalizmust használta, azaz az átlagos elektrosztatikus potenciálhoz viszonyította az energiát.



6.2 ábra

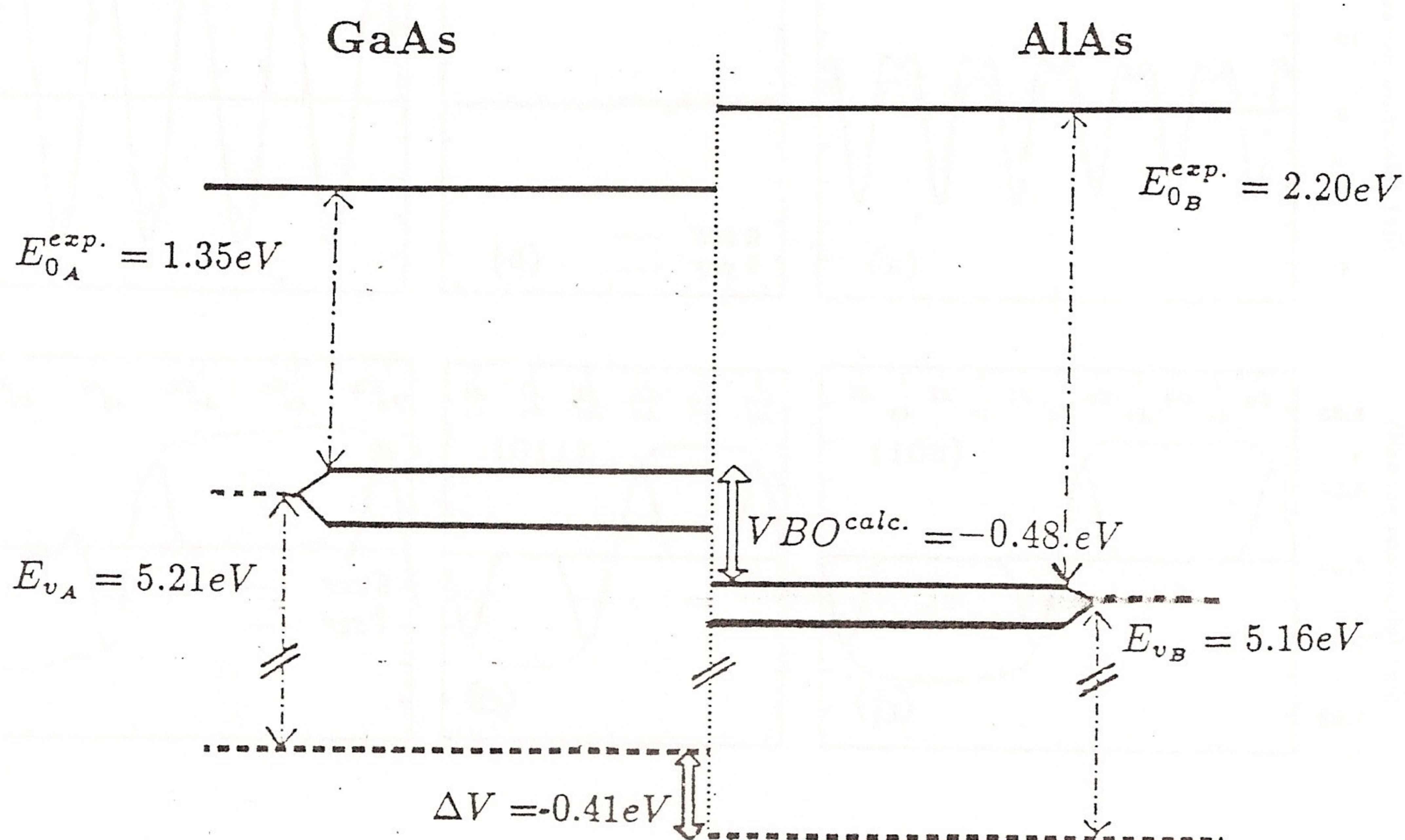
Az önkonzisztens számolás eredményeként kapott $\bar{n}(z)$, $\bar{V}(z)$ és $\bar{V}(z)$ függvények a (001), (110) és (111) irányokban a 6.2 ábrán láthatók. Az ábrán jól megfigyelhető az interface-dipól és látható az is, hogy a potenciál eltolódás jó közelítéssel független az interface irányítottságától. Az eltolódás nagysága: $\Delta V = -0.41$ eV.

Az alapanyag-számolásokat elvégezve az adódott, hogy a valenciasáv teteje a saját átlagos elektrosztatikus potenciálhoz viszonyítva 0,04 eV-tal magasabban van a GaAs-ben, mint az AlAs-ben. Ehhez hozzáadva a spin-pálya kölcsönhatásból származó felszakadások különbségének 0.03 eV-os kísérleti értékét, kapjuk: $\Delta E_v = -0.07$ eV.

A VBO ezen érték és a potenciál eltolódás összegeként adódik:

$$VBO = -0.48 \text{ eV} \quad (6.3)$$

A GaAs/AlAs interface sávszerkezetének sematikus ábrázolása a 6.3 ábrán látható.



6.3 ábra

A 6.4 ábrán látható táblázat különböző szerzők által a VBO-ra adott értékeket tartalmaz három rendszernél.

	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)
$AlAs/GaAs$	0.37	0.53	0.42	0.50	0.54	0.45
$GaAs/Ge$ (110)	0.63	0.46			0.45	0.56
$AlAs/Ge$ (110)	1.05	1.03			1.07	1.07

6.4 ábra

Az eredmények a következő kutatóktól származnak:

- a) Van de Walle és Martin [15]
- b) Christensen [16]
- c) Wei és Zunger [17]
- d) Massidda, Min és Freeman [18]
- e) Lambrecht és Segall [19]
- f) Bylander és Kleinman [20]

Következtetések

Diplomamunkámban rácsillesztett heteroátmenetek elméleti tanulmányozását tűztük ki célul. Feladatként kaptam a GaAs/ZnSe heteroátmenet vizsgálatát. Ehhez először lokális pszeudopotenciálon alapuló sávszerkezet számolást végeztem külön a GaAs-re és a ZnSe-re. A nyert sávszerkezeteket az 5. fejezet tartalmazza. A számolás elvégzése egyben annak ellenőrzése volt, hogy a használt pszeudopotenciál paraméterek alkalmasak-e a sávszerkezet meghatározására. Az eredményeket összehasonlítva más módszerrel történt sávszerkezet számolásokkal azt a következtetést vontam le, hogy a tilos sáv környékén levő ágak viselkedése egyező, s a valenciasáv szélessége is egyezik az irodalmi értékkel.

A heteroátmenetek vizsgálatához a kristályt alkalmasan választott periodikusan ismételt cellákból építettem fel. Ezekhez a különböző irányokban lévő interface-eket tartalmazó cellákhoz megfelelő rács kiválasztása s a cellákban az atomi koordináták meghatározása volt szükséges. Az irodalmi eredmények tanulmányozása azt mutatta, hogy a megfelelő méretű cella 12 atomot tartalmaz. Az így felépített anyagra vonatkozó sávszerkezet számolás teszi lehetővé a heteroátmenetre vonatkozó mennyiségek meghatározását. Az ehhez szükséges számítógépes program megírása során több, a numerikus eljárásra jellemző probléma kiküszöbölése szükséges. Az egyik ilyen probléma az eljárás konvergenciája. Ahhoz, hogy a kapott eredményeket konvergensnek tekintsük, az utolsó előtti iterációban nyert töltéssűrűség nem térhet el jobban

az utolsóban kapott értéktől egy általunk választott, a sáv-
szerkezet számolásoknál már tesztelt értéknél. Ezen pontos-
ság elérése előtt a rendszer oszcillálni kezdett.

A potenciál eltolódást használó módszert szemléltetendő
a 6. fejezetben bemutatok egy a szakirodalomban talált szá-
molást GaAs/AlAs interface-re.

- [1] *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, NATO Advanced Science Institute Series, edited by L. L. Chang and K. Ploog (Nijhoff, Dordrecht, 1985)
- [2] *Metal Organic Vapor Phase Epitaxy*, edited by J. B. Mullin, S.C.J. Irvine, R.H. Moss, P.N. Robson and D.R. Wight (North-Holland, Amsterdam, 1984)
- [3] *Heterojunctions Band Discontinuities: Physics and Device Application*, edited by F. Capasso and G. Margaritondo (North-Holland, Amsterdam, 1987)
- [4] L.R. Anderson, *Solid-State Electron.* **5**, 341 (1962)
- [5] J.L. Freeouf and J.M. Woodall, *Surf. Sci.* **168**, 518 (1986); *Appl. Phys. Lett.* **39**, 727 (1981)
- [6] W.A. Harrison, *J. Vac. Sci. Technol.* **14**, 1016 (1977)
- [7] W.R. Frensley and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* **16**, 2642 (1977)
- [8] J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **30**, 4874 (1984); *Surf. Sci.* **168**, 275 (1986); *J. Vac. Sci. Technol. B* **3**, 1157 (1985); *Phys. Rev. Lett.* **56**, 675 (1986)
- [9] M.L. Cohen and V. Heine, *Solid State Physics* **24**, 38 (1970); V. Heine and D. Weaire, *ibid* **24**, 249 (1970)
- [10] J.A. Appelbaum and D.R. Hamann, *Phys. Rev. B* **8**, 1777 (1973)
- [11] J.C. Slater, *Phys. Rev.* **81**, 385 (1951); R. Gáspár; *Acta Phys. Hung.* **3**, 263 (1954)
- [12] L. Kleinman and J.C. Phillips, *Phys. Rev.* **116**, 880 (1959); A. Baldereschi, *Phys. Rev. B* **12**, 5212 (1973)

- [13] M. Peresi: *Energy-Band Discontinuities At Lattice-Matched Semiconductor Heterojunctions* (Trieste, 1989)
- [14] G.B. Bachelet, D.R. Hamann and M. Schlüter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982)
- [15] C.G. Van de Walle and R.M. Martin, J. Vac. Sci. Technol. B **4**, 1056 (1986); Phys. Rev. B **35**, 8154 (1987)
- [16] M. Cardona and N.E. Christensen, Phys. Rev. B **35**, 6182 (1987); N.E. Christensen, Phys. Rev. B **37**, 4528 (1988); *ibid.* B **38**, 12687 (1988)
- [17] Su-Huai Wei and A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **59**, 144 (1987)
- [18] S. Massidda, B.I. Min and A.J. Freeman, in *Superlattice and Microstructures* **4**, No. 1, 15 (1988); Phys. Rev. B **38**, 1291 (1988)
- [19] W.R.L. Lambrecht and B. Segall, Phys. Rev. Lett. **61**, 1764 (1988)
- [20] D.M. Bylander and L. Kleinmann, Phys. Rev. B **34**, 5280 (1986); *ibid.* **36**, 3229 (1987); *ibid.* **39**, 5116 (1989); Phys. Rev. Lett. **59**, 2091 (1987)
- [21] Papp György: *Ponthibák elektronszerkezetének elméleti vizsgálata félvezetőkben*, kandidátusi értekezés (Szeged, 1985)
- [22] Charles Kittel: *Bevezetés a szilárdtest-fizikába* (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1981)

Képek jegyzéke

1.1-7, 2.1-4, 3.1-4, 6.1-4 _____ Ref.[13]

5.1-3 _____ Ref.[22]

Köszönetnyilvánítás

Először is köszönetet kell mondanom témavezetőmnek, Papp Györgynek mindenért, amit tőle kaptam.

Hálával tartozom Bartha Ferencnek és Bogár Ferencnek, akiknek áldozatos közreműködése nélkül ez a dolgozat nem születhetett volna meg.

Köszönet illeti Gyémánt Ivánt, akinek tanácsaiból, észrevételeiből nagyon sokat tanultam.