Alma Mater Studiorum  $\cdot$  Università di Bologna

Scuola di Scienze Dipartimento di Fisica e Astronomia Corso di Laurea in Fisica

### Confinamento Quantico nei Modulation-doped field-effect transistors

Relatore: Prof. Beatrice Fraboni Presentata da: Olivia Cesarini

Anno Accademico 2017/2018

#### Sommario

Si è voluto studiare il concetto di confinamento quantico, concentrandosi in particolare sul Quantum well e sulla sua applicabilità nell'elettronica. Si è quindi approfondito il funzionamento del MODFET, il quale sfrutta un gas di elettroni bidimensionale, e quindi un Quantum well, come canale di conduzione, e si sono viste anche le tecniche di fabbricazione, in particolare l'MBE, di questi dispositivi. Ciò che distingue questi transistor da quelli tradizionali è l'alta mobilità, raggiunta grazie alla netta separazione delle cariche dai donatori (drogaggio modulato) poichè si evita lo scattering Coulombiano che rallenta le cariche. É stato recentemente scoperto che il MODFET opera oltre che come interruttore, più veloce dei MOSFET tradizionali, anche come rivelatore di onde Terahertz.

# Indice

Il co	onfinamento quantico	3
1.1	Particella in una scatola di potenziale tridimensionale	3
1.2	Quantum well, wires e dots	4
1.3	Funzioni DOS 3D/2D/1D/0D	7
1.4	Approssimazione a massa efficace	9
Gas	di elettroni in due dimensioni	11
2.1	Funzione d'onda e livelli di energia del Quantum well	11
2.2	Buca di potenziale triangolare	13
2.3	Repulsione tra elettroni	
	-approssimazione di Hartree	17
Cre	scita delle eterostrutture	19
3.1	Le eterostrutture	19
3.2	Leghe ternarie e quaternarie di semiconduttori	20
3.3	Tecniche di fabbricazione delle eterostrutture	22
3.4	MBE-epitassia da fascio molecolare	24
	3.4.1 Monitoraggio	26
Mod	dulation-doped field-effect transistor	<b>28</b>
4.1	Drogaggio modulato	29
4.2	Banda di conduzione in un MODFET	29
	4.2.1 Livello di Fermi	31
4.3	Donatori completamente ionizzati	31
	4.3.1 Voltaggio di soglia	32
	4.3.2 Capacità gate-canale	33
4.4	Donatori nell'AlGaAs	33
App	olicazioni	35
$5.1^{-1}$	MODFET ultraveloci per supercomputers	35
5.2	Rivelazione di radiazione Terahertz	38
	Il co 1.1 1.2 1.3 1.4 Gas 2.1 2.2 2.3 Cree 3.1 3.2 3.3 3.4 Moo 4.1 4.2 4.3 4.4 Apr 5.1 5.2	Il confinamento quantico         1.1 Particella in una scatola di potenziale tridimensionale         1.2 Quantum well,wires e dots         1.3 Funzioni DOS 3D/2D/1D/0D         1.4 Approssimazione a massa efficace         Gas di elettroni in due dimensioni         2.1 Funzione d'onda e livelli di energia del Quantum well         2.2 Buca di potenziale triangolare         2.3 Repulsione tra elettroni         -approssimazione di Hartree         3.1 Le eterostrutture         3.1 Le eterostrutture         3.2 Leghe ternarie e quaternarie di semiconduttori         3.3 Tecniche di fabbricazione delle eterostrutture         3.4 MBE-epitassia da fascio molecolare         3.4.1 Monitoraggio         4.2 Banda di conduzione in un MODFET         4.3 Donatori completamente ionizzati         4.3.1 Voltaggio di soglia         4.3.2 Capacità gate-canale         4.4 Donatori nell'AlGaAs         5.1 MODFET ultraveloci per supercomputers         5.2 Rivelazione di radiazione Terahertz

# Introduzione

"Nanostructured materials derive their special properties from having one or more dimension(s) made small compared to a length scale critical to the physycs of the process"[1]. Infatti quando una o più dimensioni vengono ridotte, il sistema che risulta dal confinamento è detto " low-dimensional system". Questi sistemi hanno proprietà differenti da quelle di un "bulk" di materiale e per studiarli non è più sufficiente un approccio classico ed è necessario ricorrere alla meccanica quantistica. Ed è dalla meccanica quantistica che prendono quindi il nome i Quantum wires, wells e dots, low-dimensional systems la cui classificazione è dovuta al numero di gradi di libertà del sistema. Si ricaveranno quindi funzione d'onda e livelli di energia di tali sistemi mentre nel secondo capitolo ci si concentrerà sul Quantum well,che è il low dimensional system più importante per il trasporto elettronico [2]. A seguire si chiarirà il concetto di eterostrutture delinenando quali sono i materiali che le compongono e quali le tecniche di fabbricazione. Verrà descritta più nel dettaglio la tecnica maggiormente usata per la deposizione di sottili film di materiale su un substrato (epitassia) e l'ottimizzazione del monitoraggio durante la crescita. Gli ultimi due capitoli fungono da collante per i precedenti poichè si chiarirà il ruolo di eterostrutture e di Quantum well nei transistor a drograggio modulato.

# Capitolo 1

# Il confinamento quantico

### 1.1 Particella in una scatola di potenziale tridimensionale

La funzione d'onda e i livelli di energia discreti di una particella di massa m racchiusa in una scatola di potenziale 1-D, derivati dalle condizioni al contorno, sono i seguenti:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{1.1}$$

$$E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2},$$
 (1.2)

dove L è la larghezza della scatola e n un intero, detto numero quantico[3].



Figura 1.1: Buca di potenziale uno-dimensionale.

Si può adottare lo stesso approccio per una scatola di potenziale tridimensionale. Ora la particella è racchiusa in un volume  $L_x L_y L_z$  ed è descritta non più da uno ma da un set di numeri quantici  $(n_x, n_y, n_z)$ :

$$\psi(x,y,z) = Dsin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right)$$
(1.3)

$$E = \frac{h^2}{8m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right], \qquad (1.4)$$

dove D è una costante dovuta alla normalizzazione.

### 1.2 Quantum well, wires e dots

Si può notare dalla formula 1.4) del paragrafo precedente che l'energia di una particella in una scatola di potenziale tridimensionale dipende dalla "grandezza della scatola". Si è interessati al caso in cui la scatola è molto piccola (ordine di grandezza del nanometro), perchè c'è maggior separazione tra i livelli di energia, rispetto a un "blocco" (bulk) di materiale. Inoltre anche il gap tra la banda di conduzione e la banda di valenza è più largo per dimensioni molto piccole. Quando il moto di una particella è limitato in tutte e tre le dimensioni spaziali si ottiene ciò che è chiamato *Quantum dot*, ovvero punto quantico, essenzialmente un atomo artificiale [2].



Figura 1.2: Nella figura si può vedere la differenza in termini di livelli di energia e di band gap tra un blocco di materiale semiconduttore e un Quantum dot, ovvero una scatola di potenziale di dimensione molto piccola.

Invece se si rimuovono due gradi di libertà al moto della particella, questa si può muovere solo lungo una direzione e tale sistema di potenziale è chiamato *Quantum wire*[3].

In questo caso  $L_x$  e  $L_y$  sono fissati ad un valore L molto piccolo mentre  $L_z$  è molto più grande degli altri due. Se si definisce:

$$k_z = \frac{n_z \pi}{L_z} \tag{1.5}$$

si ottiene una variabile continua poichè l'energia non cambia apprezzabilmente per  $n_z$ e  $n_z + 1$ . Infine se si confina la particella in due dimensioni, il sistema di potenziale ottenuto è un *Quantum well*, nel quale la particella si muove in un piano.

Quantum dot	Quantum wire	Quantum well	
$L_x = L_y = L_z = L$	$L_x = L_y = L, L_z \gg L_x, L_y$	$L_x, L_y \gg L_z = L$	
$E = \frac{\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)h^2}{8mL^2}$	$E = \frac{h^2}{8m} \left[ k_z^2 + \frac{n_x^2}{L^2} + \frac{n_y^2}{L^2} \right]$	$E = \frac{h^2}{8m} \left[ k_x^2 + k_y^2 + \frac{n_z^2}{L^2} \right]$	

Tabella 1.1: breve riassunto dell'energia (per L piccolo) di una particella in un punto , filo e buca quantici.

Dalla tabella si può anche dedurre il livello di degenerazione di ogni livello di energia per ognuno dei tre sistemi. Infatti per un 2D Quantum well il livello di degenerazione di ogni livello è 1 poichè il rapporto  $E/E_0$  è proporzionale a  $n_z^2$ , quindi ogni livello può essere ottentuto con un solo valore di  $n_z$ . L'energia di un Quantum wire invece è determinata da 2 numeri quantici  $n_x$  e  $n_y$ , più precisamente è proporzionale alla somma dei loro quadrati, come si vede in tabella. Il grado di degenerazione in questo caso è 2, poichè 2 è il numero di permutazioni di 2 elementi (cioè 2!) e ogni livello energetico può essere ottenuto in soli due modi (se i valori di  $n_x$  e  $n_y$  sono diversi tra loro). Per un Quantum dot invece la degenerazione di ogni livello è 6 poichè i numeri quantici sono 3 e 3! = 6.

Per poter osservare delle nanostrutture come quantum well,wires e dots non sono sufficienti i comuni microscopi ottici con risoluzione fino a  $0.2\mu m$ . Vengono utilizzati quindi microscopi elettronici, poichè la lunghezza d'onda degli elettroni è minore (circa  $10^{-12}m$  laddove invece quelle dello spettro di luce bianca vanno dai 400 ai 700nm) di quella dei fotoni che compongono il fascio di luce utilizzato dai microscopi ottici e di conseguenza hanno potere risolutivo maggiore (fino a 1-10nm). I microsocopi elettronici sono di due tipi; a scansione (SEM,"scanning electron microscope") e a trasmissione (TEM). Nel SEM viene fatta appunto una scansione del campione rilevando gli elettroni secondari,che sono dovuti a urti (anelastici) tra elettroni del fascio e atomi del campione, che si ionizzano. In quello a trasmissione invece il fascio passa attraverso il campione e viene rivelato al di sotto di esso,dando quindi una informazione sulla struttura del campione, laddove il SEM da una visione a livello di superficie e topologica. Il microscopio elettronico ha inoltre mostrato che l'autoassemblaggio di piccoli gruppi di atomi produce *pyramidal dots* (ma si vedranno meglio nel terzo capitolo i metodi di crescita di tali sistemi confinati). Infatti i quantum dots tendenzialmente hanno forma cubica,sferica o piramidale(con piramidi anche non simmetriche) e i quantum wires sono di sezione circolare o rettangolare[4]. Un *pyramidal dot* può essere pensato come un punto cubico a barriera finita,ma con quattro potenziali di perturbazione aggiuntivi.



Figura 1.3: Immagini rilevate con il microscopio SEM:in alto a sinistra quantum wires,in alto a destra quantum dots,in basso a sinistra e al centro quantum wells e in basso a destra crescita di quantum wires. [5][6][7][8] [9].

#### 1.3 Funzioni DOS 3D/2D/1D/0D

In natura ci sono tre funzioni di distribuzione dell'energia differenti. La prima è la distribuzione di Maxwell-Boltzmann per particelle identiche ma distinguibili, ovvero considerate classicamente. In meccanica quantistica invece le particelle sono indistinguibili, per il principio di indeterminazione di Heisemberg, quindi bisogna introdurre due nuove funzioni di distribuzione ,una per Bosoni (particelle con spin intero) e una per fermioni (particelle con spin semintero). Queste ultime vengono trattate con la statistica di Fermi-Dirac e sono quelle che ci interessano in quanto gli elettroni appartengono a questa categoria, perchè hanno spin  $\frac{1}{2}$ . La funzione di distribuzione per particelle indistinguibili con spin semintero è:

$$F(E,T) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/KT} + 1}$$

, dove  $E_F$  è l'energia di Fermi e K è la costante di Boltzmann. La funzione di distribuzione per i bosoni è identica tranne che per la somma al denominatore che diventa una differenza.

Si ha inoltre che il numero di fermioni in un certo sistema è:

$$n = \int_0^\infty g(E)F(E,T)dE$$

Per  $E < E_F$  si ha F(E, 0) = 1 e per  $E > E_F$  si ha F(E, 0) = 0. Questa è la situazione ideale, perchè nella situazione reale si ha una temperatura ovviamente più alta e quindi c'è una piccola probabilità di trovare uno stato occupato per  $E < E_F$ .

Se si definisce uno spazio in cui il numero quantico sia un punto n di coordinate  $(n_x, n_y, n_z)$  si può calcolare il numero di stati possibili, proporzionali al volume nell' "n" spazio. Si può ricavare E in termini di  $R = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$ , raggio dell' "n" spazio, e viceversa. Poichè una particella in una scatola di potenziale implica solo valori positivi di n il volume dovrà essere diviso per 8 e moltiplicato per 2 dal momento che l'elettrone può avere due diversi valori di spin, che definiscono quindi due stati diversi. Si ottiene quindi il numero di stati :

$$N = 2\left(\frac{1}{8}\right)\frac{4}{3}\pi R^3 = \left(\frac{8\pi}{3}\right)(2mE)^{\frac{3}{2}}\frac{L^3}{h^3}$$
(1.6)

e il numero di stati per unità di volume  $n = N_{3D}/L^3$ . Infine si ottiene la funzione di densità degli stati per un blocco di materiale:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} \tag{1.7}$$

, che è riportata in tabella per il bulk di materiale semiconduttore e per i vari sistemi confinati. Per una nanostruttura 2D si ragiona allo stesso modo, conteggiando gli stati

$\operatorname{Sistema}$	$D_c$	$D_f$	g(E)
Bulk material	0	3	$\frac{4\pi(2m^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E-E_{min}}$
Quantum well	1	2	$\frac{4\pi m*}{h^2}$
Quantum wire	2	1	$\sqrt{\frac{2m^*}{h^2}} \frac{1}{\sqrt{E-E_{min}}}$
Quantum dot	3	0	$\delta$ di Dirac.

Tabella 1.2: La tabella mette a confronto le funzioni di densità degli stati di ogni sistema.  $D_f$  rappresenta il numero di gradi di libertà del sistema e  $D_c$  è il numero di direzioni di confinamento. Ovviamente si deve avere  $D_f + D_c = 3$ . m<sup>\*</sup> è la massa efficace degli elettroni.

questa volta in uno spazio a due dimensioni, e gli stati vengono confinati in un piano. E così via per gli ulteriori confinamenti. Nel caso di quantum wells infatti si ha un raggio  $R = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$  e ricavato in funzione della energia:

$$R = L\sqrt{\frac{8mE}{h^2} - k_z^2}$$
(1.8)

e quindi il numero di stati:

$$N = 2\frac{1}{4}\pi R^2 = \frac{1}{2}\pi L^2 \left(\frac{8mE}{h^2} - k_z^2\right)$$
(1.9)

, da cui si ricava il numero di stati per unità di superficie  $n_{2D} = N_{2D}/L^2$  e derivandolo rispetto all'energia si ottiene la DOS 2D riportata in tabella.

Si nota che la funzione di densità degli stati per il confinamento in due dimensioni, è una costante, e non dipende dall'energia, differentemente dalle DOS degli altri sistemi. Per un Quantum dot tutti i possibili stati esistono solo a energie discrete e quindi possono essere rappresentati da una funzione  $\delta$  di Dirac.



Figura 1.4: L'immagine mostra la discretizzazione dei livelli di energia e la discontinuità nella densità degli stati.

#### 1.4 Approssimazione a massa efficace

Anche se il potenziale cristallino è complesso, si può utilizzare l'equazione di Shrodinger derivata per un elettrone nel vuoto, se si introduce la massa efficace dell'elettrone  $m^*$ . Quindi si ha l'equazione di Shrodinger dipendente dal tempo seguente, con i rispettivi livelli di energia:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi = E\psi, \quad E = \frac{\hbar^2k^2}{2m^*}$$

Si ottiene una equazione di Shrodinger che ricorda quella dell'elettrone libero, eccetto che per  $m^*$  e tale metodologia è detta approssimazione a massa efficace. Misure sperimentali della massa efficace hanno rivelato che essa è anisotropa (infatti ci si aspetta che il potenziale lungo l'asse [001] sia differente da quello lungo l'asse [111]). La massa efficace dell'Arseniuro di Gallio (GaAs) è di  $0.067m_0$  dove  $m_0$  è la massa a riposo dell'elettrone. Per ricavare a massa efficace si considera la velocità di gruppo del pacchetto d'onda:

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \tag{1.10}$$

Se si applica una forza a tale pacchetto si avrà:

$$F = \frac{1}{v_q} \frac{dE}{dt} = \frac{1}{v_q} \frac{dE}{dk} \frac{dk}{dt} = \frac{d(\hbar k)}{dt}$$
(1.11)

e ovviamente si otterrà anche una accelerazione, derivando la velocità di gruppo  $v_q$ :

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{d(\hbar k)}{dt}$$
(1.12)

E infine, per l'equazione di Newton si ottiene:

$$F = m^* \cdot \frac{dv_g}{dt},\tag{1.13}$$

da cui si ricava la massa efficace:

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1} \tag{1.14}$$

## Capitolo 2

### Gas di elettroni in due dimensioni

In questo capitolo ci si concentra sul 2DEG (two-dimensional-electron gas), che è un esempio di Quantum well. Il 2DEG che si forma in un eterogiunzione è molto importante per il trasporto elettronico ad alta velocità, come vedremo nei capitoli successivi. Infatti nella giunzione di due materiali gli elettroni che cadono nella buca di potenziale della banda di conduzione non hanno la possibilità di tornare indietro, ma possono comunque muoversi in due dimensioni e quindi spostarsi lateralmente, creando corrente. Ora si ricavano funzione d'onda e livelli di energia di un Quantum well e si espongono due modelli di buca di potenziale, funzione d'onda e livelli energetici che si formano in una eterogiunzione.

### 2.1 Funzione d'onda e livelli di energia del Quantum well

A questo punto si vuole approfondire la trattazione mostrando come ottenere le formule per l'energia e per la funzione d'onda di una particella in un Quantum well (ovvero la formula nella tabella 1.1)), e la sua funzione d'onda, iniziando dall'equazione di Shrödinger , in tre dimensioni:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{R})\right]\psi(\vec{R}) = E\psi(\vec{R})$$
(2.1)

Ora si vogliono ridurre le dimensioni in cui la particella è libera di muoversi da tre a due. Per fare ciò, è necessaria una semplificazione in cui si considerano solo i potenziali in cui  $V(\vec{R}) = V(z)$ , perchè nelle strutture stratificate (che verranno descritte nei capitoli seguenti) l'energia potenziale dipende solo dalla coordinata normale agli strati. Quindi il moto lungo x e lungo y non è influenzato da nessun potenziale, e può essere descritto da onde piane nella forma:

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u(z) \tag{2.2}$$

Sostituendo la funzione d'onda qui sopra nell'equazione di Shrödinger, si possono semplificare i termini esponenziali e rimane l'equazione monodimensionale in z:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]u(z) = \epsilon u(z), \qquad (2.3)$$

con l'energia:

$$\epsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \tag{2.4}$$

L'equazione 1.8) da come soluzioni le funzioni d'onda  $u_n(z)$  con le energie  $\epsilon_n$  e la soluzione al problema tridimensionale iniziale è:

$$\psi_{\vec{k},n_z}(\vec{r},z) = \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})u_{n_z}(z) \tag{2.5}$$

$$E_{n_z}(\vec{k}) = \epsilon_{n_z} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$
(2.6)

,dove  $\vec{r} = (x, y)$  e  $\vec{k} = (k_x, k_y)$  sono vettori bidimensionali che descrivono il moto nel piano. Si definiscono gli stati attraverso tre numeri quantici  $(n_z, k_x \text{ and } k_y)$  perchè ci sono tre dimensioni spaziali. La relazione 1.11) è raffigurata in figura 1.4*a*).

Si è visto nel precedente paragrafo che è possibile fare un ulteriore confinamento cosicchè la particella è libera di muoversi sono lungo una direzione z. Si può utilizzare la stessa trattazione usata finora per il Quantum well anche per il Quantum wire. Ora il potenziale diventa  $V(\vec{R}) = V(\vec{r}) = V(x, y)$  e questa volta si inizia dall'equazione di Shrödinger bidimensionale:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(\vec{r})\right]u_{n_x,n_y}(\vec{r}) = \epsilon_{n_x,n_y}u_{n_x,n_y}(\vec{r})$$
(2.7)

Le equazioni risultanti qui sotto sono analoghe alle 1.10) and 1.11):

$$\psi_{n_x,n_y,k_z}(\vec{R}) = u_{n_x,n_y}(\vec{r})exp(ik_z z)$$
(2.8)

$$E_{n_x,n_y}(k_z) = \epsilon_{n_x,n_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$
(2.9)

Infine per un Quantum dot di fatto si ha la stessa trattazione della scatola di potenziale tridimensionale del paragrafo 1.1. Si parte questa volta dall'equazione di Shrödinger tridimensionale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\right]\psi(x, y, z) = E_{x, y, z}\psi(x, y, z)$$
(2.10)

e si ottengono le 1.3) e 1.4) per l'equazione d'onda e i livelli di energia.



Figura 2.1: a)Livelli di energia per n = 1, 2, 3 (includendo l'energia cinetica trasversa per ogni livello) come funzione di  $\vec{k} = (k_x, k_y)$ . Questi livelli sono chiamati sottobande. b)Energia in funzione di  $k_z$  per un Quantum wire. Per  $k_z = 0$  si ha il minimo di ogni parabola che è in  $E_{n_x,n_y}(k_z) = \epsilon_{n_x,n_y}$ . Ogni sottobanda quindi è identificata da una coppia di numeri quantici  $n_x, n_y$  e il numero di livelli di energia è dato dal numero di permutazioni di questi due numeri quantici.

#### 2.2 Buca di potenziale triangolare

La buca di potenziale che si forma nell'eterogiunzione è approssimativamente triangolare. Si ha un potenziale di questo tipo:

$$V(z) = \begin{cases} \infty &, perz \le 0\\ eFz &, perz > 0, \end{cases}$$
(2.11)

dove F rappresenta il campo elettrico (non si è usato E per non confondersi con l'energia). La barriera infinita di potenziale definisce quindi la condizione al contorno: la funzione d'onda  $\psi(z)$  si deve annullare in z = 0. L'equazione di Shrödinger da risolvere diventa :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + eFz\right]\psi(z) = \epsilon\psi(z)$$
(2.12)

Ci si rimanda al caso simile della buca parabolica di potenziale, in cui l'equazione di Shrödinger assume la forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 z^2\right]\psi(z) = \epsilon\psi(z), \qquad (2.13)$$

dove  $\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}$ . A questo punto si riduce il problema fisico a un problema matematico, ovvero utilizzando solo quantità adimensionali. Si definisce quindi:

$$\bar{z} = \frac{z}{z_0}, \quad z_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$$
(2.14)

$$\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}, \quad \epsilon_0 = \hbar\omega_0, \tag{2.15}$$

dove  $z_0 \in \epsilon_0$  sono rispettivamente una scala di lunghezza e una di energia e  $\bar{z} \in \bar{\epsilon}$  sono numeri puri. L'equazione di Shrödinger per una buca parabolica di potenziale diventa quindi:

$$\frac{d^2}{d\bar{z}^2}\psi(\bar{z}) + (2\bar{\epsilon} - \bar{z}^2)\psi(\bar{z}) = 0$$
(2.16)

Analogamente, per la buca triangolare di potenziale si definiranno una scala di lunghezza e una di energia nel tal modo:

$$z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2meF}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{2.17}$$

$$\epsilon_0 = \left(\frac{(eF\hbar)^2}{2m}\right)^{\frac{1}{3}} = eFz_0 \tag{2.18}$$

L'equazione di Shrödinger in questo caso diventa:

$$\frac{d^2}{d\bar{z}^2}\psi(\bar{z}) + (\bar{z} - \bar{\epsilon})\psi(\bar{z}) = 0$$
(2.19)

Se si definisce una variablie  $s = \overline{z} - \overline{\epsilon}$ , l'equazione precedente si riduce all'equazione di Airy:

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} = s\psi \tag{2.20}$$



Figura 2.2: La combinazione lineare delle due funzioni rappresentate sopra è la soluzione dell'equazione di Airy:  $\psi(s) = AA_i(s) + BB_i(s)$ .  $B_i(s)$  viene rigettata poichè si vuole un comportamento tendente a zero per  $s \to \infty$  (o z).

La condizione al contorno a z = 0 richiede che  $\psi(z = 0) = \psi(s = -\overline{\epsilon}) = 0$  e la figura mostra che c'è un numero infinito di valori negativi di s dove Ai(s) = 0, denotati da  $-c_n$ , per rimuovere il segno. Inoltre si deve avere  $\overline{\epsilon} = c_n$  per assicurare la condizione al contorno, e quindi si ottengono i seguenti livelli di energia:

$$\epsilon_n = c_n \left[ \frac{(eF\hbar)^2}{2m} \right]^{\frac{1}{3}} \tag{2.21}$$

e le funzioni d'onda non normalizzate:

$$\psi_n(z) = Ai(s) = Ai(\bar{z} - \bar{\epsilon}) = Ai\left(\frac{eFz - \epsilon_n}{\epsilon_0}\right)$$
(2.22)

derivati dall'equazione al contorno:  $\psi(z = 0) = \psi(s = -\bar{\epsilon}) = 0$ . La funzione d'onda non ha simmetria nè pari nè dispari perchè il potenziale triangolare non è simmetrico. Le equazioni precedenti mostrano che la differenza tra i livelli energetici tra una buca infinita di potenziale e una triangolare: nella prima, se è di larghezza costante, i livelli di energia si allontanano l'uno dall'altro all'aumentare di n mentre nella seconda si avvicinano, perchè la buca si allarga quando l'energia aumenta. La buca parabolica di potenziale invece è un caso intermedio tra i due precedenti, con i livelli di energia di separazione costante. La prima approssimazione che si fa è considerare che la regione lineare si estenda all'infinito,anche se vedremo successivamente che per alto z la curva di potenziale si appiattisce in una eterostruttura. Proprio per questo motivo ,si considera solo il livello di energia più basso perchè la densità elettronica dei livelli più alti è elevata



Figura 2.3: Buche di potenziale parabolica e triangolare.

per z in cui l'approssimazione triangolare non vale più. Dalle 2.11) e 2.12) si hanno:

$$\epsilon_1 = c_1 \left[ \frac{(eF\hbar)^2}{2m} \right]^{\frac{1}{3}} \tag{2.23}$$

$$\psi_1(z) = Ai\left(\frac{eFz - \epsilon_1}{\epsilon_0}\right) \tag{2.24}$$

La trattazione più semplice è quella in cui si assume che la funzione d'onda non possa penetrare la barriera di potenziale che si trova a z = 0, anche se questa trattazione vale solo per casi in cui la barriera è molto alta (eterostrutture di Si/SiO2). Si può calcolare la posizione media degli elettroni nel 2DEG che per definizione è:

$$\langle z \rangle = \int z |\psi_i(z)|^2 dz$$

Senza risolvere l'integrale, un modo più semplice per ricavare la posizione media è utilizzare il **teorema di Feynman-Hellmann**:

$$\frac{\partial \epsilon_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \dot{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle, \tag{2.25}$$

dove  $\lambda$  è un parametro da cui dipende l'Hamiltoniana. Infatti:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle n | \hat{H} | n \rangle = \frac{\partial}{\partial \lambda} \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n \\ &= \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \lambda} \hat{H} \psi_n + \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n + \psi_n^* \hat{H} \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \\ &= \int \frac{\partial \psi_n^*}{\partial \lambda} \epsilon_n \psi_n + \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n + \psi_n^* \epsilon_n \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} \\ &= \epsilon_n \frac{\partial}{\partial \lambda} \int \psi_n^* \psi_n + \int \psi_n^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n, \end{aligned}$$

da cui rimane solo l'ultimo termine poichè il primo è derivata di una costante e il teorema è dimostrato. Nel caso in questione il parametro è il campo elettrico F e considerando che  $\partial \hat{H}/\partial F = ez$ , si ha :

$$\frac{\partial \epsilon_n}{\partial F} = e \langle n | z | n \rangle \tag{2.26}$$

,<br/>da cui si può ricavare  $\langle z\rangle.$  Questa definizione di "spessore" del 2<br/>DEG coincide con la definizione che vedremo nell'ultimo capitolo, cos<br/>a che non accade nella trattazione di Hartree.

### 2.3 Repulsione tra elettroni -approssimazione di Hartree

In una analisi più complessa di un sistema multielettronico, come quello del 2DEG, la repulsione Coulombiana tra gli elettroni non è più considerata trascurabile, poichè il suo effetto diventa considerevole. Nell'Hamiltoniana ora si hanno due termini di potenziale, uno dovuto all'attrazione coulombiana degli ioni positivi $(V_{ext})$ , e l'altro alla repulsione Coulombiana.

$$\hat{H} = \sum \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V_{ext}(R_j) \right] + \frac{1}{2} \sum \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |R_j - R_k|}$$
(2.27)

Davanti a quest'ultimo termine c'è un fattore 1/2 perchè si considera solo un elettrone per ogni coppia di elettroni. In questa approssimazione la funzione d'onda è scritta come il prodotto della funzione d'onda di ogni elettrone:

$$\psi = \psi_1(R_1, s_1) \dots \psi_N(R_N, s_N) \tag{2.28}$$

Nell'equazione di Shrödinger si deve anche considerare il nuovo potenziale di Hartree, generato dalla densità totale di carica dovuta a tutti gli altri elettroni:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + V_{ext}(R_j) + V_H^{(j)}(R_j)\right]\psi_j(R_j) = \epsilon_j\psi_j(R_j)$$
(2.29)

$$V_{H}^{(j)}(R_{j}) = \frac{e^{2}}{4\pi\epsilon} \sum \int \frac{|\psi_{k}(R_{k})|^{2}}{|R_{j} - R_{k}|} d^{3}R_{k}$$
(2.30)

Il problema di questo potenziale è che dipende dalle  $\psi_k$ , le quali sono soluzione dell'equazione di Shrödinger che contiene il potenziale di Hartree. Il metodo di soluzione è quindi autoconsistente poichè si utilizza un potenziale di Hartree di ordine zero, si ricavano dall'equazione di Shrödinger le funzioni d'onda di ordine zero e le si sostituiscono nel potenziale di Hartree per ricavare il potenziale di ordine 1 e così via. Uno svantaggio della funzione d'onda di Hartree è che non obbedisce all'antisimmetria della funzione d'onda voluta dal principio di esclusione di Pauli. Infatti nella teoria a molti corpi la funzione d'onda di un sistema di N particelle è funzione delle coordinate e dello spin e l'operatore di scambio ha autovalore 1 per i Bosoni (quindi l'autofunzione rimane la stessa dopo lo scambio) e -1 per i fermioni,dovuto al principio di esclusione di Pauli:

$$\psi(\dots; R_j, s_j; \dots; R_k, s_k; \dots) = -\psi(\dots; R_k, s_k; \dots; R_j, s_j; \dots)$$
(2.31)

Un sistema multielettronico deve quindi essere descritto da una autofunzione totalmente antisimmetrica[10], come quella sopra. Inoltre due elettroni con stesso spin non possono stare nella stessa posizione, per cui si ha che la funzione d'onda svanisce per  $R_j = R_k$  e  $s_j = s_k$ . A questo punto allora si costruisce una funzione d'onda con simmetria corretta, attraverso i determinanti di Slater:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N}} det \begin{vmatrix} \psi_1(R_1, s_1) & \psi_2(R_1, s_1) & \dots & \psi_N(R_1, s_1) \\ \psi_1(R_2, s_2) & \psi_2(R_2, s_2) & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(R_N, s_N) & \psi_2(R_N, s_N) & \dots & \psi_N(R_N, s_N) \end{vmatrix}$$
(2.32)

Si può notare infatti che scambiando due righe del determinante, ne si cambia il segno, analogamente a quanto fatto nella 2.18). Inoltre c'è un termine di potenziale in più che causa la repulsione tra elettroni con lo stesso spin, caratteristica che di fatto è già presente nella funzione d'onda costruita poichè è stata forzata ad obbedire al principio di Pauli. Questa approssimazione è detta di Hartree-Fock ed è più appropriata per i Quantum dots, mentre quella di Hartree è migliore per i sistemi più estesi come il 2DEG.

In realtà nell'approssimazione di Hartree si può utilizzare anche la funzione di Fang-Howard. Con questa approssimazione si ottiene che il primo livello di energia è minore (si ottiene un fattore  $c_1 = 2.025$  laddove con la funzione di Airy era  $c_1 = 2.338$ ) e le due definizioni di spessore sono diverse ( $h \neq < z >$ ).

## Capitolo 3

### Crescita delle eterostrutture

#### 3.1 Le eterostrutture

Le eterostrutture sono semiconduttori composti da più di un materiale. Con l'ingegneria delle bande si può manipolare il comportamento di elettroni e lacune, poichè materiali diversi hanno diversi band gap. La regione attiva delle eterostrutture è l'interfaccia, quindi i due componenti, per essere performanti devono avere la stessa struttura e la stessa costante di reticolo. Tuttavia si possono sviluppare eterostrutture anche con materiali che hanno diversa struttura cristallina ottenendo così uno "stiramento" di uno o dell'altro materiale che adegua la propria struttura a quella adiacente. Poichè l'energia elastica dello strato stirato è proporzionale al suo spessore, se questo non è molto sottile la struttura cristallina riprende la sua forma originale (con la propria costante di reticolo) e si forma una dislocazione, dannosa per i nostri scopi.



Figura 3.1: a) strato stirato sottile b) strato più spesso: Il SiGe riprende la sua struttura originaria e si forma una dislocazione.

È quindi essenziale conoscere l'allineamento delle bande nell'eterogiunzione, per poter controllare il moto dei portatori. Osserviamo per esempio la figura 2.2a) che ci mostra le bande di conduzione e di valenza di due materiali diversi A e B. Per poter misurare la differenza di band gap tra A e B e per questo ci occorre conoscere le quantità  $\Delta E_c$ e  $\Delta E_v$ , cioè le differenze tra le bande dei due materiali. Dalla regola di Anderson, che afferma che il livello del vuoto di due materiali deve essere allineato, segue quindi che  $\Delta E_c = E_c^B - E_c^A = \chi^A - \chi^B \text{ dove } \chi \text{ è l'affinità elettronica. L'affinità elettronica è una proprietà periodica degli elementi (aumenta lungo un periodo e diminuisce lungo un gruppo della tavola) ed è l'energia richiesta per prendere un elettrone dal fondo della banda di conduzione e portarlo al livello del vuoto, da cui può uscire dal cristallo, processo così schematizzabile: <math>A_g + e^- \rightarrow A_q^-$ .



Figura 3.2: Il relativo allineamento della banda di conduzione e di quella di valenza può avvenire in più modi: Tipo I: il band gap più stretto è racchiuso in quello più largo. Per esempio uno strato di GaAs racchiuso in due strati di AlGaAs intrappola elettroni e lacune. Tipo II: in uno strato vengono favoriti gli elettroni e nell'altro le lacune. TipoIII: la banda di conduzione di un materiale si sovrappone a quella di valenza dell'altro.

#### 3.2 Leghe ternarie e quaternarie di semiconduttori

I semiconduttori sono materiali con conducibilità molto più alta degli isolanti ma minore dei conduttori e con band gap di circa 1eV (1.21eV per il Silicio, 0.8eV il Germanio e 1.4eV l'Arseniuro di Gallio). L'energia di band gap è definita come la differenza tra il minimo della banda di conduzione $(E_c)$  e il massimo della banda di valenza $(E_v)$  e il band gap può essere diretto o indiretto nei semiconduttori. Band gap indiretto significa che l'energia minima della banda di conduzione  $E_c$  non si trova allo stesso valore di vettore d'onda  $\vec{k}$  di  $E_v$ , come rappresentato in figura. L'elettrone può quindi saltare dalla banda di conduzione a quella di valenza, una volta assunta energia sufficiente ( $E = E_g$ ), solo nei semiconduttori a band gap diretto, altrimenti dovrebbe variare il suo momento  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ . Infatti il momento si deve conservare, quindi l'elettrone non può cambiare il suo vettore d'onda  $\vec{k}$  quando assorbe o emette radiazioni. Per la fotonica quindi vengono utilizzati i semiconduttori a band gap diretto perchè permettono l'emissione o assorbimento di luce.



Figura 3.3: Confronto di diagramma a bande di semiconduttore a band gap diretto e indiretto.

Esempi di materiali semiconduttori sono composti binari dei gruppi 13 (Boro, Alluminio, Gallio e Indio) e 15 (Nitrogeno,Fosforo, Arsenico,Antimonio e Bismuto) della tavola periodica, mentre gli unici semiconduttori non composti sono Silicio e Germanio. Anche leghe ternarie come l'AlGaAs vengono largamente usate per aumentare il range di proprietà del materiale. Le leghe sono combinazioni, in soluzione, di due o più metalli e altri elementi e la costante di reticolo di una lega è data dalla legge di Vegard. Per esempio la costante di reticolo dell'  $Al_xGa_{1-x}As$  è data da :

$$aAlGaAs = xa_{AlAs} + (1 - x)a_{GaAs} \quad (3.1)$$

cioè da una interpolazione lineare tra i costituenti della lega, dove a è la costante di reticolo e x la concentrazione. Come è stato detto nel paragrafo precedente per poter ottenere un'eterostruttura performante, i materiali di cui essa è composta devono avere la stessa struttura cristallina, richiesta soddisfatta dai gruppi 13-15(oppure vecchi III-V) della tavola periodica degli elementi.

Si è continuamente alla ricerca di nuovi materiali semiconduttori con proprietà elettroniche e ottiche interessanti. Per esempio negli anni recenti sono stati predetti semiconduttori come il monostrato di  $Sb_2C$   $(E_g = 0.90eV)[11]$  o il monostrato policristallino  $Be_2C(E_g = 1.67eV)[12]$ . In entrambi i casi la stabilità termodinamica è stata valutata calcolando l'energia di coesione che per il  $Sb_2C$  è:

$$E_{coh} = (4E_{sb} + 2E_C - E_{Sb2C})/6 \tag{3.2}$$

La stabilità cinetica invece è stata ottenuta misurando la dispersione fononica. Per il  $Sb_2C$  si ottiene una buona stabilità termica, poichè l'energia di coesione risulta di 4.45 eV/atomo, comparabile con quella di altri semiconduttori (quella del Silicene è 3.94 eV/atomo). Inoltre ha un buon assorbimento e riflessione della luce ultravioletta che suggerisce che possa essere utilizzato come schermante di raggi UV. Invece il  $Be_2C$ risulta essere un buon candidato per applicazioni ad alte temperature poichè mantiene la sua struttura fino a temperature di 1500K. Entrambi quindi sono promessi candidati per applicazioni in elettronica e optoelettronica.



Figura 3.4: a)Materiali che composti tra loro in leghe binarie e ternarie formano semiconduttori b)Il grafico indica la costante di reticolo e il band gap dei materiali sopra citati. Si può notare che le leghe AlAs e GaAs hanno costanti di reticolo molto vicine, quindi le eterostrutture vengono composte principalmente a partire da questi materiali. Vengono anche indicati quali sono i semiconduttori a band gap diretto e indiretto.

#### 3.3 Tecniche di fabbricazione delle eterostrutture

Si possono utilizzare due approcci nella fabbricazione delle nanostrutture : il top-down e il bottom-up (o anche una combinazione dei due).

Nel primo si parte da un blocco di materiale la cui dimensione viene gradualmente ridotta con varie tecniche litografiche. Nel lift-off per esempio si ricopre un substrato con del fotoresist e lo si sottopone a un patterning. Infine viene deposto il materiale target e rimosso il fotoresist (con il target che sta sulla sua superficie). Il patterning viene realizzato sottoponendo il fotoresist a un fascio laser di elettroni oppure di ioni focalizzati (EBL,FBL), oppure a un laser UV.

Invece nel bottom-up la struttura si costruisce "da sola", sfruttando l'autoassemblaggio molecolare e la crescita epitassiale. L'autoassemblaggio è un processo per cui le molecole o segmenti di molecole si assemblano spontaneamente tramite deboli interazioni (per esempio forze di van der Waals,legame idrogeno,ecc...), differenti dai legami covalenti che invece sono legami forti. Le strutture che risultano da questo autoassemblaggio sono chiamate supramolecole. La crescita epitassiale è la deposizione di sottili strati di materiale su un substrato massivo, entrambi cristallini. Un film sottile di materiale A può depositarsi su un substrato B in tre modi possibili che sono riportati in figura. Nel primo metodo (crescita Frank- Van der Merwe) c'è una maggior attrazione tra gli atomi di A e di B che tra gli atomi di A stessi e la crescita avviene strato dopo strato. Si formano infatti delle isole monostrato che si espandono fino a ricoprire tutta la superficie del substrato su cui avviene la crescita. Nella crescita Volmer–Weber invece si formano isole che cresceranno fino a formare un film unico (l'attrazione tra gli atomi di A è maggiore di quella tra A e B). Infine la crescita Stranski–Krastanow è una unione delle due precedenti poiché le forze sono bilanciate durante il procedimento [13]. Quest'ultima è quella più indicata per ottenere Quantum dots. Le particelle alla nanoscala possiedono un'alta energia superficiale che contribuisce all'energia di Gibbs[14]. Se  $\gamma_{AV}$  è l'energia superficiale di A,  $\gamma_{BV}$  quella di B e  $\gamma_{AB}$  è l'energia di interfaccia (per unità di area) tra A e B, si ha:

$$\Delta G_{interfaccia} \propto \gamma_{AV} - \gamma_{BV} - \gamma_{AB}. \tag{3.3}$$



Figura 3.5: Nella crescita Volmer–Weber si creano delle isole sferiche sopra il substrato poichè l'energia di interfaccia è minimizzata.

Non solo l'eteroepitassia, ma anche la omoepitassia (ovvero la crescita di un materiale su un substrato dello stesso materiale) è molto usata perchè si ottiene una migliore impurità e qualità del film rispetto al substrato. Inoltre il target di materiale che si deve depositare sul substrato può essere allo stato solido, liquido (cioè fuso) o di vapore dando luogo rispettivamente a SPE(solid phase epitaxy), LPE, VPE. Le tecniche più utilizzate per la fabbricazione di eterostrutture sono di tipo bottom-up e sono l'epitassia da fascio molecolare (MBE) oppure la deposizione chimica (come la Metal-organic vapour deposition) e infine anche la pulsed laser deposition(LPD), particolarmente usata per semiconduttori composti da ossigeno[15].

Durante la crescita delle eterostrutture bisogna tenere conto di due fattori in particolare: innanzitutto l'interfaccia non deve essere contaminata da impurità poichè è stato precedentemente detto che essa rappresenta la regione attiva dell'eterostruttura. Inoltre gli strati dei vari materiali devono essere sottili per poter cambiare la composizione degli strati successivi molto rapidamente, preferibilmente da uno strato all'altro. La tecnica MBE è molto lenta poichè viene creato un monostrato al secondo, ma soddisfa un accurato controllo dello spessore al livello atomico (gli strati possono essere sottili fino a 10



Figura 3.6: Tre tipi di crescita epitassiale: a)crescita Franck-Van der Merve in cui la crescita di un nuovo strato finisce solo dopo la fine dello strato precedente, b) Vollmer-Weber in cui si formano isole 3D, c) Stransky-Krastanov, in cui si ha nella prima fase una crescita strato per strato e poi la formazione di isole

Å) e una buona uniformità tra i vari wafers[16]. La tecnica MOCVD(Metal-organic chemical vapour deposition) è invece più veloce dell'MBE e opera a pressione atmosferica. In questa tecnica il substrato è posto su un blocco riscaldato in una camera in vengono immessi vari tipi di gas trasportati da idrogeno.



Figura 3.7: A sinistra schema degli approcci bottom-up e top-down e a destra esempi di supramolecole.

#### 3.4 MBE-epitassia da fascio molecolare

Nella tecnica MBE il substrato in cui deve crescere l'eterostruttura viene riscaldato all'interno di un evaporatore in cui viene fatto un UHV, ultrahigh vacuum, di circa  $5 * 10^{-11}$  mbar. Un modo per riscaldare il substrato è per esempio irradiarlo nella superficie posteriore (quella in cui non deve avvenire la crescita) con una luce infrarossa emesso da un diodo laser a onda continua e la temperatura viene monitorata da un pirometro all'esterno della camera. Gli elementi che devono comporre l'eterostruttura vengono vaporizzati in fornaci con fori rivolti verso il substrato. Vengono anche posti degli schermanti tra fornaci e substrato. All'interno della camera dell'evaporatore si forma un regime Knusden, a causa della bassa pressione, in cui il libero cammino medio delle molecole è maggiore della larghezza della camera (quindi non avvengono collissioni). In questo regime, una volta che le fornaci vengono aperte, le molecole degli elementi al loro interno non si diffondono nella camera, ma piuttosto formano un fascio. La crescita dell'eterostruttura comincia quando gli schermanti vengono tolti e quindi il fascio può raggiungere il substrato. Spesso vengono anche utilizzati droganti, come il silicio, posti in ulteriori fornaci. Sebbene sembri un processo semplice ,nella pratica non lo è. Infatti si possono avere due rischi:

- la contaminazione : ogni wafer deve essere "puro" se si vuole che l'eterostruttura sia performante.
- gli strati devono essere uniformi

Il primo problema viene controllato dalla bassa pressione e quindi dal regime Knusden. Si cerca invece di evitare il secondo facendo ruotare il substrato e controllando la temperatura nelle fornaci per mantenere il flusso costante.

Per ottenere una migliore efficienza dalla tecnica MBE si possono adottare due strategie: la prima è sviluppare il design del sistema MBE, per esempio ottimizzando l'angolo formato dal substrato con l'asse delle celle. La strategia però che rappresenta una via più realistica per la maggior parte delle ricerche è regolare i parametri di crescita di cui la rotazione del substrato ne è un esempio[16].

La tecnica MBE è utilizzata per la crescita di eterostrutture di AlGaAs/GaAs negli heterojunction FET's (HJFET). Di questa categoria di transistor fanno parte gli heterojunction insulating FET's (HIGFET) e gli high mobility transistors (HEMT anche detti MODFET, modulation doped FET).

La combinazione di MBE e di PLD da vita alla laser-MBE sviluppata per la prima volta nel 1998 da scienziati dell'istituto di fisica in Cina e dal Shenyang Scientific Instrument Development Center[17] mentre invece il processo MBE è stato inventato nel 1985 da K.G. Günter). Al posto delle celle Knusden i materiali target vengono messi in una piattaforma rotante ed esposti a un raggio laser pulsato. Quando il laser irradia il target questo evapora formando il cosidetto "plasma plume" e si deposita nel substrato. La sostituzione delle celle con la piattaforma rotante è un vantaggio, oltre che economico, perchè permette di cambiare il target velocemente e senza modificare il cammino ottico del laser[18]. Un altro vantaggio di questa tecnica è che tende a preservare la stechiometria dal target al substrato, anche se può avvenire un re-sputtering dal film in crescita in presenza elementi volatili (il cui uso è quindi evitato). Tendenzialmente nel sistema Laser-MBE non viene fatto il vuoto poichè è comunemente usata per ossidare il materiale depositato e quindi viene lasciato un gas di background che di solito è appunto ossigeno. A causa del legame ionico degli ossidi, i differenti strati atomici in genere non sono neutri e quindi è più favorevole la crescita di uno strato molecolare per garantire la neutralità. Per questo motivo l'epitassia a strati molecolari o a blocchi è più utilizzata per gli ossidi mentre quella atomica per i semiconduttori.

#### 3.4.1 Monitoraggio

Per monitorare si usa la tecnica RHEED (reflected high energy electron diffraction) che consiste di una pistola elettronica e di uno schermo fluorescente in cui visualizzare il pattern di diffrazione. Questa tecnica può essere a trasmissione o a riflessione, se rispettivamente il fascio attraversa la superficie oppure se è radente ad essa (simile al principio di TEM e SEM) dove l'una provvede a dare informazioni sulla superficie mentre l'altra sulla struttura, evidenziando eventuali difetti di costruzione. Il monitoraggio con il RHEED provvede a un range più completo di informazioni quando accoppiato con il microscopio elettronico a trasmissione, poichè provvede a dare informazioni chimiche e strutturali con eccellente risoluzione[19].



Figura 3.8: a,b,c) Il pattern RHEED (sopra) e quello FFT (Fast Fourier transform) ottenuto dalle immagini TEM coincidono perfettamente. d) Crescita nel tempo di strato di GaAs in un nanorod di InAs. Durante i primi stadi di crescita il reticolo cristallino del GaAs si adatta a quello dell'InAs ma la troppa differenza strutturale tra i due composti prevale in uno stadio successivo e il GaAs ritorna ad avere la sua costante di reticolo. Nella crescita dell'AlGaAs (non riportata in figura) invece non si ha nessun disallineamento.

Sebbene si possa pensare che usarle entrambe sia eccessivo in quanto le due tecniche siano simili, l'una offre vantaggi all'altra. Infatti la RHEED ha una più ampia dimensione del fascio e quindi permette di osservare la struttura dell'intero campione, mentre il TEM assicura la risoluzione. L'efficienza di questo accoppiamento è stata verificata confrontando immagini acquisite con TEM e RHEED della crescita di nanofili coassiali di InAs ricoperti da uno strato di GaAs (o di InGaAs) su un substrato di Silicio.



Figura 3.9: Schema dell'apparato per l'MBE. La camera viene raffreddata da criopannelli di azoto liquido che assicurano l'eliminazione di gas residui e se posti tra una cella e l'altra fungono anche da isolanti termici. La pompa criogenica assicura il mantenimento del vuoto all'interno della camera. Il misuratore di ioni monitora la pressione: un filamento caldo emette elettroni che vengono accelerati e entrano in una griglia cilindrica dove si scontrano con le restanti molecole di gas ionizzandolo. All'interno della griglia c'è un filo collettore di ioni che da quindi un'indicazione della pressione del gas. Il tutto è monitorato da un computer collegato all'apparato RHEED.

### Capitolo 4

# Modulation-doped field-effect transistor

Le eterostrutture possono essere verticali o orizzontali nel senso che la corrente può scorrere lungo la direzione normale all'interfaccia o parallelamente ad essa. Queste ultime vengono usate per i MODFET, cioè i transistor a effetto di campo con drogaggio modulato. Nell'eterogiunzione infatti si forma un gas di elettroni in due dimensioni che costituisce il canale attraverso cui passa la corrente. La convenienza dei MODFET è la alta mobilità, il cui valore più alto misurato è  $1000m^2V^{-1}S^{-1}$ (laddove invece quello dei MOSFETè circa di  $4m^2V^{-1}S^{-1}$ ), misurata a basse temperature, alle quali si ha poco scattering. L'approssimazione che si fa è considerare che la buca di potenziale sia completamente triangolare e che gli elettroni occupino solo il ground e la prima sottobanda. Infatti come si è visto nel primo capitolo, i livelli di energia di un Quantum well sono rappresentati da sottobande e a basse temperature e bassa densità di elettroni $(n_{2D})$  le sottobande occupate sono solo quella del ground state (che corrisponde al livello  $\epsilon_0$ ) e la prima parzialmente.



Figura 4.1: Sezione semplificata di un MODFET GaAs-AlGaAs. Solitamente lo strato di substrato è dello spessore di circa 700nm[20], mentre gli altri strati dell'ordine della decina di nm.

### 4.1 Drogaggio modulato

Il drogaggio di un materiale serve a introdurre portatori (che siano elettroni o lacune) nella regione desiderata ma la collisione, dovuta al potenziale Coulombiano, tra donatori (o accettori) e cariche libere daneggia la propagazione. Per evitare questo problema si realizza un drogaggio modulato, cosicchè il drogaggio cresce in una direzione ma i portatori di carica successivamente migrano nell'altra. Quindi i semiconduttori realizzati con drogaggio modulato hanno alta mobilità perchè i portatori sono spazialmente separati dai donatori e non c'è scattering tra loro. Questa separazione crea un potenziale elettrostatico dovuto ai donatori positivi che richiamano indietro gli elettroni. Una volta però che i portatori di carica raggiungono il substrato di GaAs non riescono a tornare indietro a causa della barriera di potenziale e rimangono intrappolati in una buca triangolare, confinati in due dimensioni (piano xy). Gli elettroni nella buca quindi occupano tutti lo stesso stato per il moto lungo z, e formano un gas di elettrostatico e dall'energia cinetica che non varia con la posizione, a parte nell'eterogiunzione.

#### 4.2 Banda di conduzione in un MODFET

La figura rappresenta la banda di conduzione di un MODFET lungo i vari strati: sopra il GaAs è presente un sottile strato di AlGaAs non drogato, detto spacer, e infine lo strato drogato sul quale giace il gate metallico. Tra l'AlGaAs drogato e il gate può essere presente anche un "cap" di GaAs. Partendo da destra si ha una curva piatta nel substrato non drogato, che poi cala a causa della carica negativa del 2DEG. Nell'eterogiunzione(z = 0) si ha un salto di  $\Delta E_c$  quando finisce il 2DEG e nello spacer (cioè la parte non drogata dell'AlGaAs) la curva è di nuovo pressochè costante per poi risalire nello strato drogato

n a causa della densità di carica positiva. Infine se è presente il cap di GaAs si avrà un ulteriore salto per poi rimanere costante (se il GaAs non è drogato) e di nuovo scendere al contatto con il gate metallico.



Figura 4.2: Banda di conduzione lungo gli strati a drogaggio modulato con un voltaggio di gate positivo di  $v_G = 0.2V$  e concentrazione elettronica nel 2DEG di  $n_{2D} = 3 * 10^{15} m^{-2}$ . É rappresentata anche la funzione d'onda del 2DEG.  $\epsilon_1$  è il primo livello di energia,  $\mu_s$  il livello di Fermi e  $E_F = \mu_s - \epsilon_1$  l'energia di Fermi.



Figura 4.3: a-b) Banda di conduzione, di valenza e livello di Fermi (solo del semiconduttore) in un MODFET AlGaAs/GaAs. c) Banda di conduzione di una multi interfaccia con drogaggio modulato.

Una struttura come quella rappresentata in figura 4.3c) è chiamata "superlattice" (una alternanza di buche e di barriere di potenziale) perchè c'è un secondo livello di periodicità imposto sul primo, che è il potenziale cristallino dei semiconduttori. Questo tipo di potenziale si forma nelle eterostrutture in cui si alternano due sottili strati di diversi materiali. Quando le barriere tra le buche diventano molto spesse e non si ha quasi più l'effetto tunneling, le buche sono quasi praticamente isolate e questa struttura è detta *Multiquantum-well*.

#### 4.2.1 Livello di Fermi

Il GaAs ha una alta densità di stati nella superficie, che occupano una spessa banda di energia, vicina a metà del band gap, a  $V_b$ , sotto la banda di conduzione. Il livello di Fermi si trova in questa banda quando non c'è il gate, quindi sembra impossibile mettere altre cariche negli strati superficiali. Invece quando viene posto il gate sopra il cap di GaAs il  $V_b$  cambia di 0.1/0.2 eV e si forma una barriera Schottky. Il livello di Fermi nel gate metallico è  $\mu_m$  mentre nel semiconduttore è  $\mu_s$  e la differenza tra questi due livelli da  $ev_g$ , dove  $v_g$  è il voltaggio applicato al gate.



In figura è rappresentata la variazione della densità elettronica in funzione del livello di Fermi che è stata misurata dal fondo della banda di conduzione nel GaAs e nel Silicio. Poiché la densità degli stati nella banda di conduzione è molto alta nel Si, il livello di Fermi si trova sempre sotto la banda di conduzione e le previsioni sono accurate quando si utilizza il modello tridimensionale e la quantizzazione è trascurata. Per il GaAs invece è necessario utilizzare un modello che comprende la natura bidimensionale della popolazione elettronica[21].

#### 4.3 Donatori completamente ionizzati

In questa sezione si opera una ulteriore semplificazione: i donatori possono essere trattati con il modello idrogenoide poichè vengono considerati come completamente ionizzati. Ci interessa ottenere i due livelli di Fermi poichè come è stato detto sopra si ha :  $v_G = (\mu_s - \mu_m)/e$ .

$$\mu_m = E_c(-(c+d+s)_+) - V_b \tag{4.1}$$

$$\mu_s = \epsilon_1(n_{2D}) + E_F(n_{2D}), \tag{4.2}$$

dove  $E_F$  è l'Energia di Fermi. L'analisi del livello di Fermi mostra che esso è funzione lineare della concentrazione di carica se questa è maggiore di 5 \* 10<sup>11</sup> cm<sup>-2</sup> [21], per cui si ha  $E_F = (\pi \hbar^2/m) n_{2D}$ .  $\epsilon_1$  è l'energia dello stato più basso nella buca di potenziale dell'eterogiunzione e per ora la si considera come una funzione incognita. Nella 4.1)  $V_b$ è l'energia sul gate mentre nel semiconduttore proprio sotto il gate, l'energia è  $E_c(-(c + d + s))$ . Poichè  $E_c(z) = -e\phi(z)$ , si deve trovare il potenziale elettrostatico  $\phi(z)$  in z=-(c+d+s) per ottenere  $\mu_m$ . Si sa che  $\phi(z) = -Fz$ , dove F è il campo elettrico. Si hanno tre contributi:

- Strato "spacer": per il teorema di Gauss si ha  $F = \sigma/\epsilon_0\epsilon_b = en_{2D}/\epsilon_0\epsilon_b$ , con  $\sigma$  densità superficiale di carica del 2DEG, per unità di superficie.
- Strato drogato: In questo strato ci sono i donatori per cui si ha l'equazione di Poisson :  $\partial^2 \phi / \partial z^2 = -eN_D/\epsilon_0 \epsilon_b$
- Strato "cap": anche questo strato può essere drogato e avere  $N_C$  donatori.

Quindi si ottiene:

$$\phi(z) = -\frac{eN_C}{2\epsilon_0\epsilon_b}[z + (d+s)]^2 + \frac{eN_Dd}{\epsilon_0\epsilon_b}\left[z + \left(s + \frac{1}{2}d\right)\right] - \frac{en_{2D}}{\epsilon_0\epsilon_b}z$$
(4.3)

e si ottiene il gate bias:

$$v_{G} = \frac{\epsilon_{1}(n_{2D})}{e} + \frac{V_{b}}{e} + \frac{e}{\epsilon_{0}\epsilon_{b}} \left[ n_{2D} \left( c + d + s + \frac{a_{B}}{4} \right) - \frac{N_{c}c^{2}}{2} - N_{d}d \left( c + \frac{d}{2} \right) \right], \quad (4.4)$$

dove  $a_B$  è il raggio di Bohr.

#### 4.3.1 Voltaggio di soglia

Gli elettroni iniziano a popolare il canale quando la tensione applicata al gate raggiunge un valore di soglia  $V_T$ , analogamente a quanto succede nell'inversione dei FET tradizionali. Ora il 2DEG scompare ( $n_{2D} = 0$ ) e di conseguenza anche  $\mu_s = 0$  perchè è somma di funzioni che dipendono da  $n_{2D}$ . Quindi si ottiene :

$$\frac{V_b}{e} - V_T = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_b} \left[ -\frac{N_c c^2}{2} - N_d d\left(c + \frac{d}{2}\right) \right]$$
(4.5)

Si vede che  $V_T$  dipende fortemente dalla concentrazione e dal drogaggio degli strati drogati.

#### 4.3.2 Capacità gate-canale

Importante nei FET è la capacità differenziale, il cui reciproco, in un MODFET è:

$$\frac{1}{C_G} = \frac{1}{e} \frac{\partial V_G}{\partial n_{2D}} = \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_b} \left[ (c+d+s) + \frac{a_B}{4} + \frac{\epsilon_0 \epsilon_b}{e^2} \frac{\partial \epsilon_1}{\partial n_{2D}} \right]$$
(4.6)

Il primo contributo è dovuto allo spessore del dielettrico ed è la capacità di un condensatore a faccie piane parallele. Il secondo è dovuto alla struttura elettronica del 2DEG (il livello di Fermi e la derivata parziale). L'ultimo termine della 4.6) rappresenta lo spessore (o profondità) del 2DEG:

$$h(n_{2D}) = \frac{\epsilon_0 \epsilon_b}{e^2} \frac{\partial \epsilon_1}{\partial n_{2D}}$$
(4.7)

Poichè h varia molto poco può essere trattata come costante. Anche  $C_G$  è una costante e quindi settando  $V_G = 0$ , dalla 4.6) si ottiene la densità di elettroni nel 2DEG:

$$n_{2D} = \frac{-V_T C_G}{e} \tag{4.8}$$

#### 4.4 Donatori nell'AlGaAs

Nel paragrafo si è assunto che i donatori siano completamente ionizzati, ma il Silicio (che è il donatore standard nell'AlGaAs) può esistere anche in un secondo stato che è il "DX centre". Accade che il reticolo si "distende" intorno ai donatori all'arrivo dell'elettrone e viene rilasciata energia cosicchè l'elettrone diventa fortemente legato. Si formano due barriere di energia: una per entrare nella buca del donatore, e un altra per poterne uscire.

Energia di legameModello atomo idrogenoideCentri DX $E_D = 5meV$  $E_{DD} = 0.12eV$ 

Tabella 4.1: Si può notare che l'energia con cui gli elettroni sono legati ai donatori è maggiore se si tiene conto dei centri DX. Inoltre il raggio della funzione d'onda, che nell'atomo idrogenoide è il raggio di Bohr  $(a_B = 10nm)$  è ridotto alla scala atomica nei centri DX.



Figura 4.4: Distorsione del reticolo intorno a un centro DX.

Se l'energia  $E_{DD}$  dei centri DX cade sotto il livello di Fermi  $\mu$ , essi intrappolano gli elettroni, il materiale diventa neutro, e la banda di conduzione si appiattisce al valore:

 $E_c(z) = \mu + E_{DD}$ . Nello strato drogato di AlGaAs allora si forma una parte neutra, seguita subito da una ionizzata prima dello spacer. Questo fatto fa capire che la superficie dell'eterostruttura e il 2DEG sono disaccoppiati e che quindi la  $n_{2D}$  non dipende da d come invece avveniva nella trattazione precedente. La discontinuità della banda di conduzione diventa:

$$\Delta E_c = \epsilon_1 + E_F + E_{DD} + \frac{e^2 N_D L^2}{2\epsilon_0 \epsilon_b} + \frac{e^2 n_{2D} s}{\epsilon_0 \epsilon_b}$$

$$\tag{4.9}$$

Poichè bastano pochi donatori per bilanciare il 2DEG, si conclude che la  $n_{2D}$  è quasi indipendente dal drogaggio sotto queste condizioni. Quindi cancellando il termine contenente  $N_D$  si ottiene:

$$n_{2D} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_b}{e^2} \frac{\Delta E_c - E_{DD}}{s + h + \frac{1}{4} a_B}$$

$$\tag{4.10}$$

Si può notare che un sottile strato di spacer porta a una alta densità di elettroni nel 2DEG, perchè  $n_{2D} \propto \frac{1}{s}$ . Un altro modo per aumentare la densità degli elettroni mobili è dare energia (tramite illuminazione) sotto il band gap. Gli elettroni quindi si eccitano ed escono dai centri DX, dando così luogo al fenomeno della *fotoconduttività persistente*, utilizzato soprattutto per controllare la densità del 2DEG a basse temperature, dove l'occupazione dei centri DX è "congelata". Infatti ad alte temperature è sufficiente l'agitazione termica a fare uscire gli elettroni dai centri. Un fenomeno conseguente alla fotoconduttività e che può dipendere da un troppo alto voltaggio del gate è la *conduzione parallela*: si crea una seconda popolazione elettronica (oltre a quella del 2DEG) nell'AlGaAs drogato. Sebbene comunque la mobilità della seconda popolazione sia bassa, poichè gli elettroni si ricombinano con i molti donatori presenti in quella zona, la performance del dispositivo diventa minore al verificarsi di questo fenomeno, che quindi andrebbe evitato.

# Capitolo 5

# Applicazioni

### 5.1 MODFET ultraveloci per supercomputers

Il tempo di switching di un dispositivo è dato dalla somma del tempo di carica/scarica dei condensatori e dal ritardo di propagazione (ovvero dal tempo impiegato per trasmettere l'impulso di input a un output). Per ottenere interruttori più veloci si può ridurre questo tempo di switching avvicinando i terminali (drain e source) tra loro in modo che il cammino delle cariche sia più breve oppure aumentando la velocità di queste ultime. Poichè vale la relazione  $v = \mu E$ , si ha che a bassi campi la mobilità è molto alta. Avere gli elettroni confinati nel 2DEG molto vicini al gate e una perfetta interfaccia portano a mobilità molto alte e larghe velocità, per valori di voltaggio sul drain molto bassi. Di conseguenza il tempo di carica del condensatore diminuisce drasticamente e si dissipa poca potenza. Questi vantaggi raddoppiano quando il sistema è raffreddato a 77 K, cosa realizzabile con sistemi di supercomputer complessi. Una alta concentrazione elettronica è richiesta per alte correnti e quindi alte velocità ma questo comporta anche ad una alta concentrazione di donatori e quindi allo scattering donatore-elettrone. Come è stato detto nei precedenti paragrafi questo problema viene risolto dal drogaggio modulato, separando quindi nettamente donatori e elettroni i quali vengono intrappolati dalla barriera di potenziale. La mobilità è ridotta non solo dallo scattering donatore-elettrone ma anche dallo scattering degli elettroni coi fononi e con le impurità. Poiché i fononi sono vibrazioni del reticolo cristallino, si può ridurre lo scattering elettrone- fonone abbassando la temperatura, mentre lo scattering con le impurità è ridotto dallo schermaggio elettrostatico delle impurità da parte degli elettroni nel 2DEG.

A questo punto ci si chiede perché è necessario un MODFET piuttosto che un MO-SFET, per ottenere uno dispositivo ultraveloce. I principi di funzionamento di questi due strumenti infatti sono simili; tuttavia un modfet presenta vantaggi cruciali:

• il canale e il gate sono molto ravvicinati ( separati da solo 400 Å)

- L'AlGaAs ha una alta costante di dielettrico (confrontata con il  $SiO_2$ ) che porta quindi ad alta trasconduttanza ( $G \propto \epsilon_0$ )
- All'interfaccia si può raggiungere una alta densità di elettroni  $(10^{12}cm^{-2})$ , che come si è detto precedentemente, porta quindi all'alta corrente richiesta

L'AlGaAs drogato è impoverito all'eterointerfaccia, a causa della diffusione elettrica nel GaAs (fatto che però è limitato a solo 100 Åper un livello di drogaggio di  $10^{18} cm^{-3}$ ) e anche nella superficie, a contatto con il cup GaAs, dalla barriera Schottky. Quindi si ha conduzione anche nell'AlGaAs se le due depletion region si sovrappongono.

- Negli ON-devices (in cui viene applicato un voltaggio al gate) la depletion region dovuta al gate è sufficiente ad avere una "surface" depletion estesa fino all'interfaccia. C'è troppo alta dissipazione di potenza per essere utilizzati nei circuiti a larga scala, quindi utilizzato per applicazioni analogiche ad alta velocità.
- Negli OFF-devices lo spessore dell'AlGaAs drogato sotto il gate è minore e la tensione propria (integrata) del gate lo esaurisce, ed esaurisce anche il 2DEG. La corrente non scorre nel dispositivo a meno che non venga applicato un voltaggio positivo al gate, come nel caso precedente. Si ha una bassa dissipazione di potenza e quindi i MODFET vengono usati come interruttori nei circuiti integrati digitali ad alta velocità.

Lontani dal regime di cutoff (dove  $V_G = V_T$ ) la capacità sotto il gate è costante e la carica all'interfaccia è linearmente proporzionale a  $V_G - V_T$ . Quando il potenziale raggiunge il valore di soglia la buca di potenziale si allarga e il livello di Fermi si abbassa. Nel regime di velocità saturata la corrente è linearmente proporzionale al voltaggio del gate e la transconduttanza è costante.

Per poter calcolare la caratteristica I-V bisogna conoscere come varia la velocità degli elettroni in funzione del campo elettrico ed è necessario considerare gli effetti del trasporto ad alto campo (come la velocità di saturazione). In figura si può osservare la caratteristica v - E di un MODFET e trarre le seguenti conclusioni:

- A campi di circa 200 V/cm si ottiene una quasi saturazione della velocità (e questo implica che l'alta mobilità a bassi campi non ha molta rilevanza nella performance dello strumento.)
- L'alta mobilità a campi bassi fa si che il voltaggio di saturazione abbia un valore basso (e anche una bassa resistenza)
- A 300 e a 77 K si possono ottenere rispettivamente picchi di velocità di  $2*10^7 cm/s$

Il MODFET quindi prevede un trasporto di corrente che richiede la carica/scarica delle capacità, ma che non degrada la velocità, come accade invece nelle strutture convenzionali, a causa dei donatori. Tenendo conto solo della velocità, esso offre il 20% di progresso a 300K e il 60% a 77K.



Figura 5.1: a) Caratteristica I - V di un MODFET (a 77 e a 300K) confrontata con quella di un MOSFET e di un MESFET. b) Velocità in funzione del campo elettrico misurata in una struttura a drogaggio modulato con singola interfaccia e in un bulk di GaAs puro, alle temperature di 77 e 300K e con densità di impurità ionizzate (donatori)  $N_I$  uguale a zero e a  $10^{15}cm^{-3}$ . Si può notare che le caratteristiche dei MODFET sono comparabili con quelle del GaAs puro e si può quindi concludere che le proprietà del GaAs in MODFET non vengono quindi degradate. c) Transconduttanza in funzione dello spessore dello spacer. Si può notare che il valore più alto di transconduttanza lo si ha a 20-30 Å.

Il massimo voltaggio del gate (quindi in un dispositivo on) è limitato al valore oltre il quale il AlGaAs comincia a condurre poiché se si eccede questo valore si riduce la performance del dispositivo, come è stato detto nel precedente capitolo quando si è parlato di conduzione parallela. La velocità finale di switching di un dispositivo è direttamente proporzionale alla transconduttanza e inversamente proporzionale al voltaggio del gate. Infatti in un FET tradizionale si ha:

$$G = \frac{\partial I_{out}}{\partial v_{in}} = \frac{\partial I_D}{\partial V_G} = \frac{\epsilon \mu_n W}{Ld} (V_G - V_T)$$
(5.1)

In un MODFET la transconduttanza è alta perché è alta la velocità elettronica e inoltre siccome il 2DEG è separato da soli 400Ådal gate, una alta concentrazione di carica può essere modulata anche solo da un basso voltaggio. Quest'ultimo avviene a spesa di capacità di gate un po' più alta. La transconduttanza in un MODFET può essere ottimizzata quindi riducendo lo spessore dell'AlGaAs, così che aumenti anche la concentrazione di carica del 2DEG. Ovviamente la zona di "spacer" non si può ridurre estremamente poiché è necessaria, come è stato detto inizialmente, a separare donatori da portatori e se questo spazio è troppo breve ricomincia lo scattering Coulombiano che rallenta la velocità delle cariche. Una volta considerati tutti questi fattori si è valutato che per avere una buona performance lo spessore del setback deve essere intorno ai 20-30 Å, né più né meno.

Riassumendo, per ottimizzare il transistor nell'uso off logic, bisogna regolare parametri quali lo spessore e il drogaggio dell'AlGaAs e la concentrazione di Al nel AlGaAs.

- Aumentare la concentrazione di Al nel AlGaAs permette di aumentare sia l'altezza della barriera Shottky sia della barriera all'eterogiunzione, cosa che permette un maggiore voltaggio nel gate. Inoltre è quindi più facile evitare che le cariche passino dal GaAs all'AlGaAs e quindi avere maggior concentrazione elettronica nel canale senza conduzione parallela nell'AlGaAs.
- Per massimizzare la trasconduttanza l'AlGaAs deve essere il più possibile sottile.
- Lo strato di setback deve essere più sottile possibile(20-30Å)
- Il massimo voltaggio applicato al gate è di 0.8 V a temperatura ambiente e 1V a temperatura dell'azoto liquido.

### 5.2 Rivelazione di radiazione Terahertz

Un altro ambito di applicazione dei MODFET è la rilevazione della radiazione THz. La radiazione THz è compresa tra gli infrarossi e le microonde (range da 30 a 300GHz) ed è utile perché molto penetrante in materiali come plastica e nella cellulosa, con minor diffusione rispetto all'infrarosso e permette una buona risoluzione di immagini. Poichè è una radiazione non-ionizzante, differentemente dai raggi X, evita di danneggiare i tessuti ed è quindi molto utile anche per l'imaging medico oltre che scientifico. Nel 1990 è stato dimostrato teoricamente da Drakanov e Shur che i FET di dimensioni microscopiche possono essere utilizzati come rivelatori di radiazioni THz. Gli elettroni del canale di un FET se eccitati da onde THz generano delle onde al plasma che determinano una variazione di tensione misurabile fra drain e source (come in figura). Nel caso non risonante le onde al plasma sono sovrasmorzate e quindi il FET può operare come rivelatore a banda larga. Invece se si ha alta mobilità elettronica c'è risonanza e anche emissione di radiazione elettromagnetica con stessa frequenza delle onde al plasma(tipicamente la velocità è di  $10^8 cm/s$ ). Le frequenze risonanti delle oscillazioni del plasma bidimensionale dei FET aumenta con la riduzione delle dimensioni del canale e raggiunge il range THz per le lunghezze di gate sotto il micrometro. Bisogna tenere in conto che le onde al plasma esistono nel limite  $\omega \tau > 1$ , dove  $\omega$  è la frequenza e  $\tau$  è il tempo di rilassamento della quantità di moto. In caso contrario infatti si ha un sovrasmorzamento delle onde (regime non risonante). Per un gas 2D di elettroni a cui è applicato un voltaggio al gate valgono le seguenti relazioni:

$$\rho = ne = CV, \quad E = -\nabla U = -\nabla \rho/C$$
(5.2)

$$\omega(k) = sk, \quad s = \sqrt{\frac{ne^2}{mC}},\tag{5.3}$$

dove s è la velocità delle onde al plasma e la relazione di dispersione è lineare. Le due relazioni 5.1) valgono solo se la lunghezza d'onda è molto maggiore della separazione gate canale( $kd \ll 1$ ), altrimenti l'esistenza del gate non ha importanza e valgono le relazioni del gas 2D senza voltaggio applicato al gate[22]. Interessante poi il confronto tra le equazioni che legano il campo elettrico alla densità di carica elettronica  $\rho$  in un bulk di materiale e in un gas 2D. Infatti nel primo vale l'equazione di Maxquell per cui si ha  $\partial E_x/\partial x \sim \rho$ , mentre nel secondo caso si ha:  $E_x \sim \partial \rho/\partial x$  dalla 5.1).

E' stata recentemente studiata[23] la rivelazione non risonante della radiazione THz utilizzando uno strained silicon MODFET a temperatura ambiente e sottoposto a un voltaggio tra drain e source. Si è notato allora che applicando un voltaggio  $V_{DS}$  diverso da zero vi è un aumento di due ordini di grandezza della responsività, così stimata:

$$R_v = \frac{\Delta U S_t}{P_t S_d}.$$

 $\Delta U$  è il segnale di fotoresponso misurato,  $P_t$  il potere della radiazione THz nel piano del rivelatore (minore rispetto alla sorgente perché attenuato dall'atmosfera ),  $S_d$  l'area attiva del rivelatore e  $S_t$  la dimensione dello spot del fascio di radiazione.





Figura 5.2: Fotoresponsi in funzione del voltaggio di gate a) per differenti frequenze, con  $V_{DS} = 0$ , b) per differenti  $V_{DS}$ , con frequenza fissata a 182 GHz. In entrambi i casi la temperatura è quella ambiente. L'intensità del segnale dipende dalla frequenza della radiazione THz incidente.

Per indurre un tale voltaggio è necessaria una certa asimmetria che può derivare da vari motivi. Per esempio può essere causato da una differenza di condizioni al contorno tra source e drain, dovuta a alcune capacità parassite esterne. Un altro possibile motivo può essere l'asimmetria nella alimentazione della radiazione in arrivo e infine può essere causata da una corrente DC tra source e drain che crea una zona di depressione elettronica nel lato drain del canale.

## Conclusione

In questo lavoro si è voluto capire cos'è il confinamento quantico e l'importanza del ruolo che ricopre nei FET a drogaggio modulato. Si è visto infatti che nell'eterogiunzione di un MODFET si forma una buca di potenziale approssimativamente triangolare in cui viene intrappolato un gas di elettroni in due dimensioni (2DEG) e si sono ricavati funzione d'onda e livelli di energia di un elettrone così confinato. Il drogaggio modulato è una tecnica utile poiché permette di separare le cariche mobili dai relativi donatori, evitando lo scattering coulombiano e aumentando quindi la mobilità rispetto ai MOSFET tradizionali. Sono stati inoltre approfonditi i materiali con cui sono realizzati questi dispositivi, con una breve distinzione tra quelli a band gap diretto e indiretto, e le proprietà delle leghe di questi materiali. Si è cercato poi di capire come ottenere una crescita efficiente dell'eterostruttura che comporrà il MODFET, una volta aggiunti i tre terminali del transistor, e si è visto che si può ottenere un buon monitoraggio di tale crescita se si accoppiano microscopio elettronico a trasmissione e tecnica RHEED. Infine si è verificata l'utilità dello studio del funzionamento dei MODFET andando ad osservare gli ambiti di applicazione. Uno degli utilizzi più frequenti è che sia usato nei circuiti come interruttore e a tal fine si è visto come i parametri di fabbricazione devono essere valutati per ottenere buona performance, e alta velocità. Negli anni recenti invece si è scoperto che il MODFET può fungere anche da rivelatore per le onde Terahertz, che giacciono in un range di frequenza difficile da rilevare, ma possibile con le onde al plasma generate dall'oscillazione degli elettroni nel gas 2D.

## Bibliografia

- [1] Stuart Linsday. Introduction to nanoscience. 2009.
- [2] John H.Davies. The physics of low-dimesional semiconductors. A cura di Cambridge University Press. 1997.
- [3] Andrew TS Wee Chin Wee Shong Sow Chorng Haur. Science at the nanoscale. 2007.
- [4] Paul Harrison. Quantum Well, Wires and Dots. 2000.
- [5] http://www.labsem.cetuc.puc-rio.br/project\_FQ-en.html.
- [6] http://www.nanoimages.com/sem-applications/semiconductors/.
- [7] https://aip.scitation.org/doi/am-pdf/10.1063/1.4916347.
- [8] http://www.saha.ac.in/web/spd-facilities/spd-epitaxy/metalorganicvapour-phase-epitaxy-movpe.
- [9] http://anff-act.anu.edu.au/HTML/News\_detail/nl22\_art2.html.
- [10] Robert Martin Eisberg Robert Resnick. Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles. 1974.
- [11] M.M. Abutalib. "A new antimony carbide monolayer: An indirect semiconductor with a tunable band gap". In: (2018).
- [12] MosayebNaseria et al. "A new stable polycrystalline Be2C monolayer: A direct semiconductor with hexa-coordinate carbons". In: (2018).
- [13] Manuel Cardona Peter Y.Yu. Fundamentals of Semiconductors. 1995.
- [14] J M Topple S A Burke e P Grutter. "Molecular dewetting on insulators". In: (2009).
- [15] Marius Gründmann. Physics of semiconductors. 2006.
- [16] Pingping Chen Yaguang Zhanga Yi Gud. "Composition uniformity characterization and improvement of AlGaAs/GaAs grown by molecular beam epitaxy". In: (2018).
- [17] Yang Guo zhen et al. "Laser molecular beam epitaxy system and its key technologies". In: (1998).

- [18] Matthias Opel et al. "Laser molecular beam epitaxy of ZnO thin lms and heterostructures". In: (2018).
- [19] Janghyun Jo et al. "Real-Time Characterization Using in situ RHEED Transmission Mode and TEM for Investigation of the Growth Behaviour of Nanomaterials". In: (2018).
- [20] Y. Wang Yuchun Chang Hailin Luo. "GaAs/InGaAS/AlGaAs MODFETs with a very thin buffer layer and very high transconductances". In: (2001).
- [21] Hadis Morkoc Paul M.Solomon. "Modulation-Dope'd GaAs/AIGaAs Heterojunction Field-Effect Transistors (MODFET's), Ultrahigh- Speed Device for Supercomputers". In: (1984).
- [22] Michel I. Dyakonov. "Generation and detection of Terahertz radiation by field effect transistors". In: (2010).
- [23] Y.M. Meziani et al. "Enhancement of sub-terahertz detection by drainto- source biasing on strained silicon MODFET devices". In: (2015).